М.Холодниок, А.Клич, М.Кубичек, М.Марек

МЕТОДЫ АНАЛИЗА НЕЛИНЕЙНЫХ ДИНАМИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ

В современной теории динамических систем разработан большой арсенал мощных качественных, аналитических и численных методов исследования. В книге известных авторов из Чехословакии эти методы изложены доступным для пользователей-нематематиков образом. Читатель с инженерным образованием может научиться по этой книге применять современные методы теории бифуркаций как для исследования систем с конечным числом степеней свободы, описываемых обыкновенными дифференциальными уравнениями, так и для исследования процессов в сплошных средах, описываемых уравнениями с частными производными. Описаны математические модели процессов, численные методы и алгоритмы, применение которых проиллюстрировано конкретными задачами, доведенными до числовых ответов и графиков (в книге более 100 рисунков).

Для математиков-прикладников, инженеров различных специальностей, студентов технических вузов.

Содержание

Предисловие редактора перевода 5
Предисловие 9
Глава 1. Введение 11
Литература 19
Глава 2. Бифуркации в нелинейных динамических системах 20
2.1. Введение 20
2.2. Бифуркации положений равновесия 30
2.3. Бифуркации периодических решений 39
2.4. Предельные множества траекторий 52
2.5. Показатели Ляпунова 55
2.6. Дифференциальные уравнения с частными производными 62
Литература 71
Глава 3. Ветвление состояний равновесия на диаграмме решений 73
3.1. Диаграмма стационарных решений 73
3.2. Ветвление в точках бифуркации. Одномерный случай 76
3.3. Ветвление в точках бифуркации. Многомерный случай 78
3.4. Заключительные замечания 81
Литература 83
Глава 4. Математические модели 84
4.1. Построение математических моделей 84
4.2. Задачи с сосредоточенными параметрами 93
4.3. Задачи с распределенными параметрами 110
Литература 125
Глава 5. Численные методы и алгоритмы, используемые для анализа нелинейных систем с сосредоточенными параметрами 128
5.1. Стационарные решения 129
5.2. Зависимость стационарных решений от параметра—диаграмма 134

решений
5.3. Исследование устойчивости стационарных решений 149
5.4. Точки ветвления стационарных решений. Вещественная бифуркация 156
5.5. Комплексная бифуркация (бифуркация Хопфа) 177
5.6. Бифуркационная диаграмма 187
5.7. Методы моделирования динамических систем 195
5.8. Вычисление периодических решений в автономном случае 205
5.9. Хаотические аттракторы 238
5.10. Квазистационарное поведение динамических моделей 247
5.11. Расчет и анализ периодических решений в неавтономных случаях 256
5.12. Задачи 264
Литература 270
Глава 6. Численные методы и алгоритмы, используемые для анализа систем с распределенными параметрами 272
6.1. Стационарные решения (методы решения нелинейных краевых задач) 273
6.2. Зависимость стационарных решений от параметра 291
6.3. Нахождение точек ветвления 312
6.4. Методы динамического моделирования параболических уравнений 328
6.5. Периодические решения в распределенных системах 340
6.6. Квазистационарное поведение распределенных систем 352
6.7. Задачи 355
Литература 357
Примечания редактора перевода 359
Дополнительная литература 362

ПРЕДИСЛОВИЕ РЕДАКТОРА ПЕРЕВОДА

О предмете книги. Основная тема этой книги — численные методы и алгоритмы для исследования обыкновенных дифференциальных уравнений, более точно — для изучения зависимости их решений от параметров. Соответственно, гл. 5, где обсуждаются эти методы и алгоритмы, является центральной. В этой главе речь идет в основном о стационарных и периодических решениях, но вкратце затронута и проблема сложных («хаотических») режимов поведения простых систем. Шестая глава по постановке вопросов примыкает к пятой. В ней рассматриваются уравнения с частными производными типа «реакция — диффузия» с одной пространственной переменной.

Книга в целом посвящена двум основным вопросам. Первый: как отследить плавную эволюцию стационарных или периодических решений при изменении одного параметра. Второй, более трудный: как обнаружить и рассчитать перестройки (бифуркации), которые могут происходить при изменении параметров. При этом основное внимание уделяется здесь не общим математическим идеям и не событиям в конкретных системах, а «инструментальной», вычислительной стороне дела.

Многочисленные таблицы и рисунки служат в этой книге не просто иллюстрациями. Вместе с формулами, описывающими алгоритмы, они составляют важную компоненту изложения, по меньшей мере равноценную остальному тексту. Именно здесь авторы находятся «в своей стихии» и здесь более всего сказывается их громадный вычислительный опыт.

Вычислительные алгоритмы, как и во многих других книгах, демонстрируются на конкретных задачах. Отличительная особенность этой книги — выделение 17-ти *задач* в отдельную главу 4 и многократное обращение к этим *задачам* в гл. 5 и 6.

Об авторском замысле книги. Авторы этой книги — преподаватели Пражского химико-технологического института. Они известны специалистам по многочисленным статьям и нескольким монографиям. Книга была задумана как учебник для студентов или инженеров, получивших стандартную математическую подготовку.

Как и всегда в таких случаях, желательно, чтобы с книгой можно было работать, не обращаясь к другим руководствам и монографиям. Поэтому авторы написали гл. 2, содержащую сведения, не входящие в обычные математические курсы. Они не придерживаются здесь совершенной математической строгости, не стремятся к полноте и сообщают лишь тот минимум сведений, который, по их мнению, необходим. Эта глава более других нуждается в комментариях; часть из них написана мной (и помещена в конце книги).

В конце каждой из двух основных глав (5 и 6) имеются учебные задачи. Почти все они требуют обращения к компьютеру и являются скорее заданиями для вычислительного практикума, чем задачами в привычном смысле.

Происхождение книги и область прикладных интересов авторов наложили явный отпечаток на подбор *задач* в гл. 4. Но в остальном книга достаточно универсальна.

Терминологические проблемы. Такие проблемы, всегда возникающие при переводе, здесь стоят особенно остро. Главная причина не зависит от языка: некоторые из основных бифуркационных явлений не имеют общепринятого, твердо установленного названия. Важнейший пример: исчезновение стационарного состояния системы при изменении параметра за счет слияния его с другим (и рождение пары стационарных состояний «из ничего» при изменении параметра в противоположном направлении). Кажется естественным называть это явление «бифуркация слияния» или «бифуркация рождения — уничтожения пары», однако подобные названия не привились. Авторы используют во второй главе (в ее новом варианте) термин «бифуркация типа седло—узел»; в гл. 5 при описании того же явления говорится о «вещественной бифуркации».

Явление рождения периодического решения из стационарного называется в гл. 2 «бифуркацией Андронова—Хопфа», а в последующих главах — «комплексной бифуркацией». Далее, авторы называют «диаграммой решений» схематический рисунок, изображающий зависимость решений (стационарных, периодических и т. д.) от одного параметра. Такую картинку часто называют «бифуркационная диаграмма». Этот последний термин использован в книге совсем в другом смысле: как «па-

раметрический портрет» системы на плоскости *двух* параметров.

Следующая проблема не связана непосредственно с рассмотрением бифуркаций и возникает из-за несогласованности терминологии у физиков и математиков. В русскоязычной литературе системы с конечным числом степеней свободы часто называют «системы с сосредоточенными параметрами». Напротив, «системы с распределенными параметрами» имеют бесконечное число степеней свободы. Здесь «параметры» — это величины (переменные), определяющие состояние системы, — словоупотребление, привычное для физиков. Такая достаточно наглядная терминология не приводит к недоразумениям до тех пор, пока рассматривается система с фиксированными свойствами. Если же каким-то из констант, входящих в уравнения, разрешено меняться, то математики называют эти константы параметрами (в отличие от неизвестных, подлежащих определению из уравнений). Я старался следить, чтобы разные употребления термина «параметр» были разделены и чтобы двусмысленность не возникала.

В двух случаях мне пришлось отступить от терминологии оригинала. Так, авторы употребляют термин «предельная точка» (limitní bod) для обозначения точки на диаграмме решений, отвечающей бифуркации слияния. Однако этот термин имеет в математике другое значение (предельная точка множества). Поэтому в переводе использован термин «точка поворота», отвечающий английскому «turning point». Далее, в оригинале авторы называют точку на диаграмме решений «бифуркационной», если в ней пересекаются две (или более) ветви. Во избежание недоразумений мы говорим в таких случаях о точках ветвления: точке поворота тоже отвечает бифуркация.

Наконец, есть случаи, когда подходящего русского термина подобрать не удалось; они отмечены в подстрочных примечаниях.

О переводе. Для русского издания книга была довольно сильно переработана. Прежде всего была заново написана глава 2. Она стала короче и приблизилась по стилю к остальным главам. Сокращена и упрощена также глава 3. Более или менее значительные изменения были внесены и в остальные главы. Авторы исходили при этом как из внутренних побуждений, так и из моих пожеланий и советов. При редактировании было внесено много мелких изменений и уточнений (частично вынесенных в подстрочные примечания).

В целом работа над переводом (как переводчика И. Е. Зино, так и редактора) оказалась гораздо более трудной, чем предполагалось. Потребовались встречи с авторами (в нашей стране

и в Чехословакии), многочисленные телефонные звонки и письменные послания. Я надеюсь, что в результате книга стала лучше, но не уверен, что мы всегда работали «в линейном диапазоне» (внутри которого эффект пропорционален усилиям).

В заключение я хочу поблагодарить авторов за стремление к взаимопониманию и сотрудничеству. Я должен также с признательностью отметить долготерпение и благожелательное отношение к нашей работе со стороны издательства. Без такого отношения перевод книги с моим участием едва ли был бы возможен.

Э. Э. Шноль

ПРЕДИСЛОВИЕ

Стремительное развитие математического моделирования, которое происходило в течение последних двадцати лет и которое продолжается со все возрастающей скоростью, связано как с бурным прогрессом вычислительной техники, так и со все более широким использованием теоретических подходов в естественных науках. В настоящее время математическое моделирование широко применяется в самых различных областях человеческой деятельности. Математическая модель динамической системы обычно представляет собой совокупность дифференциальных уравнений, обыкновенных или с частными производными. При этом описание линейных систем исходит из практически завершенных теоретических предпосылок. В отличие от этого, теория нелинейных динамических систем находится пока в том состоянии, когда формулируются и последовательно проверяются методики анализа лишь отдельных типов нелинейных моделей.

В этой книге, задуманной как учебное пособие, мы постарались, с одной стороны, предоставить читателям (в основном студентам и выпускникам вузов технического и естественнонаучного профиля) необходимую информацию о методах построения и анализа нелинейных математических моделей, а с другой стороны, дать практические рекомендации по анализу поведения этих моделей с помощью ЭВМ.

Помимо рассмотрения большого числа практических примеров математических моделей различных нелинейных систем (химических, физических, гидродинамических и биологических), в книге освещаются основные понятия и методы математической теории динамических систем. Для некоторых читателей терминология и подходы, используемые в этой части книги, могут оказаться новыми и непривычными. Мы попытались дать

такому читателю (по возможности наглядное) введение в указанную проблематику, тем самым облегчив ему понимание оригинальной, в основном математической литературы по этой тематике. Основную часть книги составляют главы, посвященные методам численного анализа нелинейных моделей.

Рекомендации по изучению материала книги и подробное содержание отдельных ее частей приведены во вводной главе 1.

В книге, конечно, нашли отражение научные интересы авторов, а также результаты их оригинальных работ за последние 15 лет. Авторы будут благодарны читателям за любые замечания по поводу содержания книги.

Своей приятной обязанностью авторы считают необходимость выразить благодарность Дане Сухановой, инженеру З. Кубичковой, канд. техн. наук И. Шрайберу, канд. техн. наук К. Шевчиковой, доктору З. Сомру, доктору Ф. Ярошу, инженеру П. Кнедлику, канд. техн. наук Э. Экерту и другим сотрудникам, аспирантам и дипломантам, чья помощь позволила авторам написать эту книгу. Авторы хотели бы также поблагодарить обоих рецензентов и научного редактора книги за ряд ценных замечаний.

Пражский химико-технологический институт
Прага, январь 1985 г.

Глава 1

ВВЕДЕНИЕ

Бурное развитие моделирования разнообразных естественнонаучных и технических задач за последние двадцать лет породило необходимость разработки систематической методики качественного и количественного анализа моделей.

Модель в самом общем понимании может иметь вид словесного описания или физической опытной установки (например, с упрощенным и уменьшенным оборудованием или с меньшим числом протекающих процессов). Далее она может иметь графическую [1.2] или, наконец, математическую форму. Здесь мы ограничимся обсуждением математических моделей, описываемых системами уравнений. Такие модели можно подразделять, например, на детерминистские и вероятностные (стохастические), эмпирические и механистические, дискретные и непрерывные, с сосредоточенными и с распределенными параметрами [1.3—1.10]. В этой книге будет рассматриваться стохастическое поведение детерминистских систем, однако заниматься анализом вероятностных моделей мы не будем. Дискретные модели здесь также подробно не рассматриваются. Наше внимание будет сосредоточено на непрерывных детерминистских моделях, большей частью механистических (основанных на представлениях о механизмах процессов). Будут рассмотрены как модели с сосредоточенными параметрами (независимой переменной в этом случае часто является время), так и модели с распределенными параметрами (здесь обычно независимые переменные — время и одна или несколько пространственных координат).

Математическая механистическая модель исследуемого процесса представляется обычно системой соотношений, описывающих отдельные элементарные явления, из которых складывается рассматриваемый процесс. Типичный подход к построению и анализу модели можно представить в виде следующих этапов:

— анализ процесса, определение элементарных явлений; создание физической модели на основе описания элементарных явлений [1];

— представление физической модели в виде математической модели;

— преобразование математической модели к удобному (например, безразмерному) виду;

— анализ и исследование математической модели;

— интерпретация решения в терминах физической модели;

— сравнение результатов (в терминах физической модели) с исследуемым процессом.

Для линейных моделей указанная методика разработана практически полностью (см., например, [1.1]). Иначе обстоит дело в случае нелинейных моделей. Это объясняется прежде всего рядом новых явлений, с которыми мы здесь встречаемся. Так, нелинейные модели часто имеют не одно, а несколько стационарных решений; далее, для них возможно существование колебательных решений типа предельного цикла, появление хаотических решений и, наконец, критическое поведение решения в зависимости от параметров. Характерными признаками нелинейных задач являются: богатый набор различных типов поведения; специфичность определенного типа поведения для определенной задачи (модели) или в определенном диапазоне изменения параметров; необходимость применения численных подходов для нахождения характеристик решения.

В настоящее время уже существует целый ряд методов, которые мы можем в более или менее стандартной форме использовать при анализе динамического поведения нелинейных моделей. Подробное изложение этих общих подходов, которые рассчитаны главным образом на численные методы, реализуемые на ЭВМ, и является предметом данной книги. Это подробное изложение дополняется как простыми примерами, так и результатами анализа типичных нелинейных моделей более сложных физических, химических и технических задач.

В данной книге используются термины «системы с сосредоточенными параметрами» (англ. lumped parameter systems) и «системы с распределенными параметрами» (англ. distributed parameter systems). **Системы с сосредоточенными параметрами** описываются с помощью конечного числа обыкновенных дифференциальных уравнений для зависящих от времени переменных состояния; пространство состояний имеет здесь конечную размерность. В противоположность этому под **системами с распре-**

---

[1] Здесь подразумевается теоретическое описание в физических терминах. — *Прим. ред.*

деленными параметрами в этой книге мы будем понимать системы, описываемые конечным числом дифференциальных уравнений в частных производных (чаще всего параболического типа). Здесь переменные состояния в каждый момент времени суть функции одной или нескольких (пространственных) переменных. Пространство состояний имеет в этом случае бесконечную размерность.

Рассмотрим теперь вкратце содержание отдельных глав книги.

В первой, вводной главе читатель найдет краткую характеристику отдельных глав и рекомендации, каким образом изучать отдельные части книги.

При этом предполагается, что читатель прослушал стандартный вузовский курс дифференциальных уравнений. В частности, предполагаются известными понятия траектории, состояния равновесия, фазового портрета, устойчивости и классификации состояний равновесия (например, седло, узел, фокус).

Во второй главе описываются основные типы бифуркаций положений равновесия и замкнутых траекторий (стационарных и периодических решений) систем обыкновенных дифференциальных уравнений (§§ 2.1—2.3). Кроме того, в § 2.3 приведены математические сведения, необходимые для численного анализа устойчивости периодических решений. Параграф 2.4 посвящен специальным типам траекторий и их предельным множествам. Описание инвариантных множеств и поведения общих траекторий, характеризуемых показателями Ляпунова, содержится в § 2.5. Там же описывается явление Фейгенбаума, представляющее собой один из механизмов, приводящих к возникновению хаотических аттракторов. В § 2.6 показано, как некоторые методы, используемые для анализа обыкновенных дифференциальных уравнений, можно перенести на случай уравнений в частных производных параболического типа.

Третья глава должна облегчить читателю изучение последующих частей книги. Здесь вводится ряд понятий, используемых в дальнейшем. Это касается в особенности диаграмм стационарных и периодических решений (отражающих зависимости этих решений от параметра). Здесь же обсуждается ветвление решений на указанной диаграмме как для простых, так и для более сложных ситуаций. Далее разъясняются понятия точки бифуркации, предельной точки (точки поворота), ветви решений и т. п. В заключительной части этой главы описывается способ определения направлений ветвей решений, выходящих из точки бифуркации. Материал второй и третьей глав дополняется рядом иллюстраций, которые помогают читателю усвоить вводимые понятия.

Четвертая глава посвящена описанию математических моделей ряда технических задач, которые используются в двух последующих главах для иллюстрации применения тех или иных численных подходов. Во введении к этой главе описание моделей проводится с помощью обобщенных переменных состояния и параметров. В последующих параграфах от этого общего уровня описания мы переходим к конкретным переменным состояния и параметрам задачи (температура, концентрация и т. д.). Обычно для каждой конкретной задачи мы стараемся придерживаться обозначений переменных состояния и параметров, которые согласуются с обозначениями, используемыми в специальной технической литературе. Смысл такого согласования заключается в том, чтобы читатель, который уже сталкивался с какой-либо из приведенных задач (или собирается работать с литературой, указанной в ссылках), не терял бы время на переписывание задачи в других обозначениях.

В § 4.2 анализируется группа задач, которые можно рассматривать как системы с сосредоточенными параметрами. Подробно обсуждается модель реактора проточного типа с перемешиванием, методы приведения этой модели к безразмерному виду, а также описываются свойства решений в случае протекания экзотермической реакции первого порядка. Аналогичным образом формулируются модели реактора с перемешиванием для случая кинетических соотношений различного вида, модель реактора каскадного типа и реактора с взаимным массообменом, модель биологического реактора (математическая модель анаэробного брожения), а также предложенная Лоренцом модель конвекции Бенара. Далее (в § 4.3) исследуются задачи с распределенными параметрами. Рассмотрены модели «реакция — диффузия», описывающие перенос и превращение реагирующих компонентов в одномерных системах (с одной пространственной координатой). Такого рода модели применяются, с одной стороны, для описания реакций и процессов переноса (тепла, массы и т. д.) внутри частицы пористого катализатора, а с другой — для описания диффузии морфогена в модели морфогенеза Гирера—Мейнхардта и классической модели возникновения и развития диссипативных структур — кинетической модели «брюсселятора». При этом используются граничные условия 1, 2 и 3 рода, сокращенно обозначаемые как ГУ1, ГУ2, ГУ3. Рассмотрена также модель, описывающая продольный перенос тепла и массы в трубчатом контактном аппарате, а также гидродинамическая задача о течении жидкости между двумя бесконечными соосными вращающимися дисками. В дальнейшем изучаемые модели обозначаются словом *«задача»* с соответ-

ствующим номером — именно так мы ссылаемся на них в гл. 5 и 6.

Наибольший интерес у большинства читателей, несомненно, вызовут пятая и шестая главы книги. Обе эти главы посвящены описанию численных методов и алгоритмов, используемых для анализа нелинейных систем. При этом в пятой главе исследуются системы с сосредоточенными параметрами, а в шестой — системы с распределенными параметрами. Рассмотренные в этих главах численные подходы иллюстрируются на конкретных примерах — «*задачах*» из гл. 4: для главы 5 — это *задачи* 1—10, а для гл. 6 — *задачи* 11—17.

Мы предполагаем, что читатель знаком с основными сведениями из области численных методов (линейная алгебра, системы нелинейных уравнений, задача Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений и т. д.). Кроме того, желательно наличие у читателя определенных навыков алгоритмизации задач и программирования.

В пятой главе сначала описываются методы анализа стационарных решений для автономных систем обыкновенных дифференциальных уравнений — их отыскание и построение зависимости от параметров (построение диаграммы решений). Здесь же обсуждаются методы определения устойчивости, нахождения точек ветвления решений (вещественных и комплексных бифуркаций), а также методы построения бифуркационных диаграмм. Далее рассматриваются способы вычисления и определения устойчивости периодических решений, построение зависимостей периодических решений от параметра; проанализированы также механизмы ветвления периодических решений. Заключительная часть главы посвящена исследованию хаотических аттракторов, построению эволюционных диаграмм и методам нахождения периодических решений неавтономных систем. Здесь же кратко описаны стандартные численные методы моделирования[1] динамических систем.

Шестая глава книги посвящена описанию методов решения нелинейных краевых задач — разностных методов и метода стрельбы. Далее читатель найдет здесь способы построения зависимостей стационарных решений от параметров и методы определения точек ветвления (вещественных и комплексных бифуркаций). Заключительная часть главы посвящена методам динамического моделирования (см. прим. 1) уравнений с частными производными параболического типа, исследованию

---

[1] Имеются в виду методы численного решения задачи Коши. — *Прим. ред.*

периодических решений, решений волнового характера и построению эволюционных диаграмм.

В этой книге мы часто используем термины «бифуркация», «точка бифуркации» и «бифуркационная диаграмма». Вместо этих терминов (общепринятых в научной литературе на английском и русском языках) во многих случаях мы можем подставить соответствующие эквивалентные термины «ветвление», «разветвление», «ответвление» и т. д.[1] Аналогичное терминологическое замечание можно сделать и для понятия особой точки векторного поля или особой точки системы дифференциальных уравнений. В литературе часто используются термины «положение равновесия» или «стационарное решение». В гл. 2 и 3 мы будем употреблять преимущественно словосочетание «положение равновесия», а в гл. 5 и 6, где речь идет уже о динамических системах и зависимости их решений от времени, мы чаще будем пользоваться термином «стационарное решение». Термин «особая (сингулярная) точка» будет применяться нами для обозначения другого понятия. В гл. 5 и 6 мы будем использовать термин «проварьированное уравнение» (а также «проварьированная переменная») для обозначения линейного дифференциального уравнения, характеризующего изменения переменных состояний при малом изменении начальных условий или параметров (вместо термина «уравнение в вариациях», который используется обычно в качественной теории дифференциальных уравнений). Систему нелинейных уравнений в $\mathbb{R}^n$ мы иногда будем называть «системой нелинейных алгебраических уравнений», с тем чтобы отличить эти уравнения от уравнений дифференциальных, хотя, конечно, речь будет идти не только о полиномиальных уравнениях.

В конце книги помещен перечень использованных математических терминов (со ссылками на место первого применения или определения). При выборе типа шрифта для отдельных переменных или параметров авторы стремились облегчить читателю понимание текста. Так, матрицы ($\mathbf{A}$, $\mathbf{B}$, $\mathbf{C}$ ...), векторы ($\mathbf{x}$, $\mathbf{y}$, $\mathbf{z}$, $\boldsymbol{\omega}$, ...), операторы ($\mathbf{A}$, $\mathbf{B}$, $\mathbf{C}$, ...) и т. д. обозначаются полужирным шрифтом. Там, где необходимо, векторы могут представлять собой вектор-столбцы, а для операции транспонирования применяется символ ^{T}. При использовании представления вектора через отдельные составляющие, например, $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_n)$, символ операции транспонирования в отдельных случаях опускается.

---

[1] Ни одно из этих слов не заменяет, конечно, термина «бифуркационная диаграмма» (означающего совокупность бифуркационных линий на плоскости двух параметров). — *Прим. перев.*

Книга разделена на главы, параграфы и пункты. Так, например, 5.7.1.1 представляет собой один из пунктов параграфа 5.7 главы 5. Формулы в каждом параграфе нумеруются отдельно; при этом номер формулы состоит из трех чисел: первое из них указывает номер главы, второе — номер параграфа, а третье — порядковый номер формулы в пределах данного параграфа. Так, например, формула (6.1.37) представляет собой формулу 37 параграфа 1 главы 6.

Данная книга задумана прежде всего как справочное пособие. Поэтому читатель не обязан стремиться изучить ее систематически от первой страницы до последней. Нам представляется, что если читатель хочет лишь использовать конкретные подходы для анализа данной конкретной задачи, то он может пропустить при чтении некоторые главы или параграфы (или просто просмотреть их). Исходя из этого, некоторые основные определения мы повторяем в разных главах книги. Так сделано, например, при формулировке условий существования точки комплексной бифуркации (бифуркации Андронова—Хопфа), и при изучении гл. 5 не нужно отыскивать эти условия в гл. 2. Из-за ограниченности объема книги полностью соблюсти это правило не удалось, и потому ряд понятий и терминов в тексте приводится со ссылками на соответствующую главу, где это понятие вводится. В принципе каждую главу книги можно прорабатывать независимо от других. Для того чтобы читатель мог лучше ориентироваться, на рис. 1.1 представлена схема, на которой перечислены основные методы, описываемые в данной книге, с указанием номеров параграфов и пунктов, в которых эти методы рассматриваются (и зависимостей между ними). Для проверки усвоения некоторых методов, описываемых в гл. 5 и 6, в конце этих глав приведены задачи.

В заключение мы хотим привести краткие советы по изучению материала книги для основных групп читателей.

Для читателя с инженерным образованием, интересующегося проблемами математического моделирования и численного анализа полученных моделей, мы порекомендовали бы следующую схемы чтения книги: он может пропустить гл. 2, 3 и 4 и приступить прямо к изучению гл. 5 или 6. При чтении этих глав встретится ряд понятий, которые он сможет найти в гл. 2 и 3.

Иначе должен отнестись к книге читатель, интересующийся математической стороной дела. Он должен изучить главы 2 и 3 (чтение этих глав может побудить его обратиться к специальной литературе), затем пропустить гл. 4 и перейти к гл. 5 и 6. В этих главах он обнаружит много решенных *задач* из гл. 4. В случае необходимости он сможет обращаться к гл. 4,

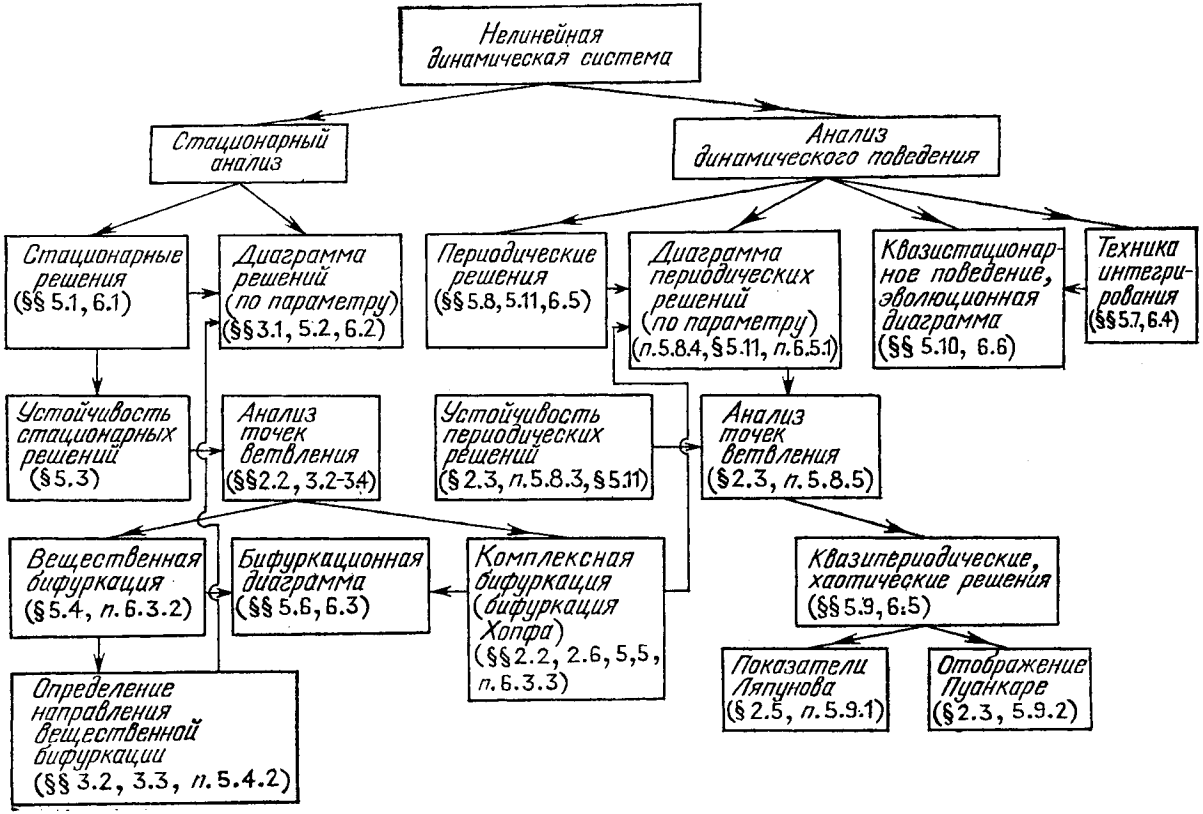


Рис. 1.1. Исследование поведения нелинейных динамических систем.

например по поводу конкретного вида уравнений, переменных состояния и параметров.

Еще одну группу читателей могут составить лица, заинтересованные в решении какой-либо из *задач* гл. 4 (а при случае и своей конкретной задачи). Им, очевидно, следует начать с изучения соответствующих параграфов гл. 4, а затем, используя предметный указатель, найти подходящие параграфы в гл. 5 или 6, где данная *задача* используется для иллюстрации численных подходов. Хотя, конечно, в гл. 5 и 6 не содержится полного анализа всех *задач*, представленных в гл. 4. Такой анализ можно провести, используя подходы, изложенные в этих главах. Аналогично должен поступить читатель, который хочет проанализировать какую-нибудь другую свою задачу. Задачи, которые разобраны в главах 5 и 6, несомненно, послужат ему достаточным ориентиром для проведения расчетов.

ЛИТЕРАТУРА

[1.1] Casti Y. L.: Dynamical Systems and Their Applications. Linear Theory, Academic Press, New York, 1977.
[1.2] Abraham R. H., Shaw Ch. D.: Dynamics — The Geometry of Behavior, Part I, Periodic Behavior. Aerial Press, Inc., Santa Cruz, 1983.
[1.3] Smith C. L., Pike R. W., Murrill P. W.: Formulation and Optimization of Mathematical Models. International Textbook Company, New York, 1970.
[1.4] Launder B. E., Spalding D. B.: Mathematical Models of Turbulence. Academic Press, New York, 1972.
[1.5] Himmelblau D. M., Bischoff K. B.: Process Analysis and Simulation. John Wiley, New York, 1968.
[1.6] Slattery J. C.: Momentum, Energy and Mass Transfer in Continua. McGraw—Hill, New York, 1972. [Имеется перевод: Слеттери Д. С. Теория переноса импульса, энергии и массы в сплошных средах. — М.: Энергия, 1978. — 448 с.]
[1.7] Astarita G.: An Introduction to Non-Linear Continuum Thermodynamics. Societa Editrice de Chimica, Milano, 1975.
[1.8] Braun M., Coleman C. S., Drew O. A., eds.: Models in Applied Mathematics; Vol. I., Differential Equation Models. Springer. Berlin, 1982.
Brams S. J., Lucas W. F., Straffin P. O. Jr., eds.: ibid, Vol. 2, Political and Related Models. Springer, Berlin, 1982.
Lucas W. F., Roberts F. S., Thrall R. M.: ibid, Vol. 3., Discrete and System Models. Springer, Berlin, 1983.
Marcus—Roberts H., Thompson, M.: ibid, Vol. 4, Life Science Models. Springer, Berlin, 1983.
[1.9] Freudenthal H., ed.: The Concept and the Role of the Model in Mathematics and Natural and Social Sciences. Reidel Publ. Co., Dordrecht, 1961.
[1.10] Lin C. C., Segel L. A.; Mathematics Applied to Deterministic Problems in the Natural Sciences, Macmillan, New York, 1975.

Глава 2

БИФУРКАЦИИ В НЕЛИНЕЙНЫХ ДИНАМИЧЕСКИХ СИСТЕМАХ

2.1. ВВЕДЕНИЕ

Систему n обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ)

$$\begin{aligned} \dot{x}_1 &= f_1(x_1, x_2, \ldots, x_n), \\ \dot{x}_2 &= f_2(x_1, x_2, \ldots, x_n), \\ &\cdots\cdots\cdots\cdots \\ \dot{x}_n &= f_n(x_1, x_2, \ldots, x_n) \end{aligned} \tag{2.1.1}$$

мы будем записывать также в векторной форме как

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(\mathbf{x}). \tag{2.1.2}$$

Векторное поле в правой части равенства (2.1.2) определено на пространстве R^n или на его части. Независимую переменную, которой обычно является время, будем обозначать буквой t; кроме того, выше использованы обозначения $\dot{x}_i = dx_i/dt$, $i = 1, 2, \ldots, n$. (Эти обозначения будут использоваться и далее.) Решением системы (2.1.1) является совокупность функций

$$\varphi_1(t), \ \varphi_2(t), \ \ldots, \ \varphi_n(t), \tag{2.1.3}$$

которые удовлетворяют исходным уравнениям. Для простоты в дальнейшем будем предполагать, что решение определено для всех $t \in \mathsf{R}$ (это условие не всегда выполняется в приводимых ниже примерах. — *Ред.*) и что функции, стоящие в правых частях уравнений (2.1.1), достаточно гладкие.

Решение (2.1.3) можно записать также в векторной форме

$$\varphi(t) = (\varphi_1(t), \ \varphi_2(t), \ \ldots, \ \varphi_n(t)). \tag{2.1.4}$$

Уравнения $x_1 = \varphi_1(t)$, $x_2 = \varphi_2(t)$, $\ldots$, $x_n = \varphi_n(t)$, $t \in \mathsf{R}$ представляют собой параметрические уравнения кривой в R^n. Эту кривую мы называем траекторией системы ОДУ; в случае $n =$

$=1, 2, 3$ траектория дает наглядное представление о поведении соответствующего решения.

Множество всех траекторий системы (2.1.1) образует в R^n фазовый портрет системы.[1] При этом пространство R^n мы называем фазовым пространством системы.

С помощью дифференциальных уравнений можно описывать реальные системы и их изменение во времени. С помощью совокупности ОДУ можно описывать эволюцию во времени такой системы, состояние которой в каждый момент определяется набором из n вещественных чисел, т. е. такой, что ее состояние можно отождествить с некоторой точкой $\mathbf{x} \in \mathsf{R}^n$. [1)] В этом контексте можно говорить о пространстве R^n как о пространстве состояний (множестве всех возможных состояний данной реальной системы). При этом векторное поле в (2.1.2) понимается как «сила», определяющая «направление» эволюции системы.

Решение $\varphi(t)$ системы (2.1.2) определяет собой эволюцию исследуемой системы во времени. Эта эволюция изображается движением фазовой точки по соответствующей траектории.

Состояние системы в момент t зависит не только от указанного момента, но и от исходного состояния системы, т. е. состояния, в котором система находилась в момент времени $t=0$:

$$\mathbf{x}_0 = \varphi(0). \tag{2.1.5}$$

Соотношение (2.1.5) мы называем начальным условием для решения системы (2.1.2), а решение, которое удовлетворяет этому условию, будем обозначать как

$$\varphi(t, \mathbf{x}_0) \quad \text{или} \quad \varphi_{\mathbf{x}_0}(t). \tag{2.1.6}$$

Таким образом, решение (2.1.6) удовлетворяет соотношению $\varphi(0, \mathbf{x}_0) = \mathbf{x}_0$ или, соответственно, $\varphi_{\mathbf{x}_0}(0) = \mathbf{x}_0$. Функция $\varphi(t, \mathbf{x})$, рассматриваемая как функция двух переменных $t \in \mathsf{R}$ и $\mathbf{x} \in \mathsf{R}^n$, называется *фазовым потоком* системы (2.1.1).

2.1.1. Качественная теория ОДУ

Большинство нелинейных систем дифференциальных уравнений мы «не в состоянии решить», т. е. мы не можем найти общее решение

$$\varphi(t, \mathbf{x}) = (\varphi_1(t, \mathbf{x}), \varphi_2(t, \mathbf{x}), \ldots, \varphi_n(t, \mathbf{x})), \tag{2.1.7}$$

в котором функции $\varphi_i(t, \mathbf{x})$ заданы явными аналитическими выражениями.

[1)] Предполагается, что поведение системы при $t > t_*$ зависит лишь от ее состояния при $t = t_*$. — *Прим. ред.*

Станем, однако, на точку зрения «потребителя» математики (физика, химика, биолога и т. п.), который построил данную совокупность ОДУ в качестве математической модели своей реальной системы. Как правило, математическая модель реальной системы не описывает ее точно. Поэтому если бы даже нам было известно решение вида (2.1.7), нет оснований предполагать, что значения $\varphi(t, \mathbf{x}_0)$ (при известном $\mathbf{x}_0$) будут точно соответствовать измеренным значениям. От математической модели разумно ожидать прежде всего качественного совпадения с поведением реальной системы; в частности, разумно требовать, чтобы обе системы обладали одним и тем же числом состояний равновесия, периодических решений и т. п.

Для этой цели нам достаточно знать фазовый портрет соответствующей математической модели, который находится обычно с помощью численных методов (см. § 5.7) [1].

Приведем теперь несколько типичных примеров фазовых портретов для случаев $n = 1$ и $n = 2$.

Рассмотрим одно дифференциальное уравнение

$$\dot{x} = f(x), \tag{2.1.8}$$

где $x \in \mathsf{R}$. Фазовое пространство этого уравнения представляет собой прямую. Траекториями уравнения (2.1.8) могут быть:

a) положения равновесия, т. е. одноточечные траектории (состоящие из одной точки);

b) отрезки [2], концевые точки которых представляют собой положения равновесия;

c) полупрямые, «ограниченные» состоянием равновесия с одной стороны и «точкой» $+\infty$ или $-\infty$ с другой.

Направление прохождения траектории определяется знаком функции f следующим образом:

Если $f(x) > 0$, то фазовая точка пробегает траекторию слева направо, если же $f(x) < 0$, то справа налево.

Пример 2.1. Фазовые портреты дифференциальных уравнений

$$\dot{x} = x^2 \quad \text{и} \quad \dot{x} = x^3$$

изображены на рис. 2.1 и 2.2 вместе с графиками правых частей [3].

---

[1] Это слишком сильное утверждение (например, всегда интересны периоды периодических решений). — *Прим. ред.*

[2] Точнее, интервалы.

[3] Стрелки на всех рисунках показывают направление движения фазовой точки при возрастании t. — *Прим. ред.*

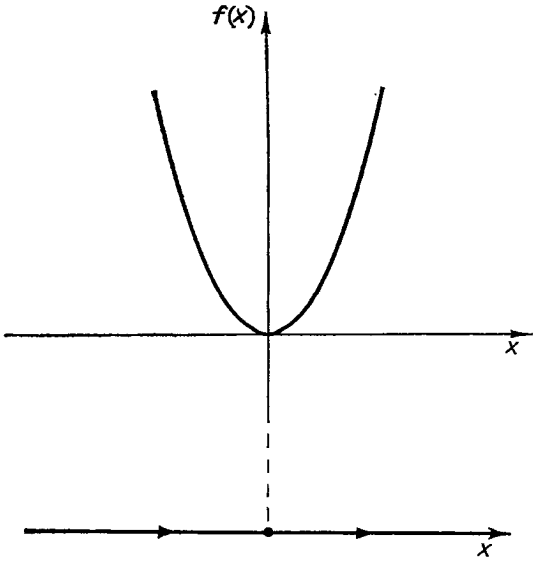


Рис. 2.1. Фазовый портрет уравнения $\dot{x} = x^2$.

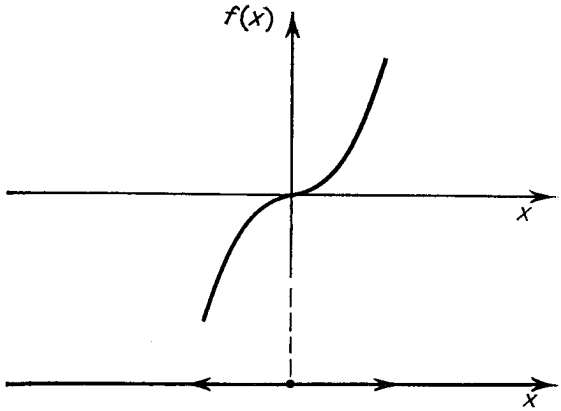


Рис. 2.2. Фазовый портрет уравнения $\dot{x} = x^3$.

Пример 2.2. Фазовый портрет дифференциального уравнения

$$\dot{x} = \frac{1}{2}(x^2 - 1) \tag{2.1.9}$$

представлен на рис. 2.3. Положения равновесия уравнения

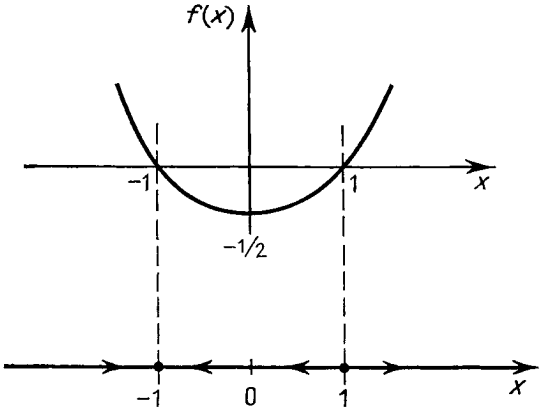


Рис. 2.3. Фазовый портрет уравнения (2.1.9).

(2.1.9) суть корни алгебраического уравнения $x^2 - 1 = 0$, т. е. точки $x^{(1)} = -1$, $x^{(2)} = +1$.

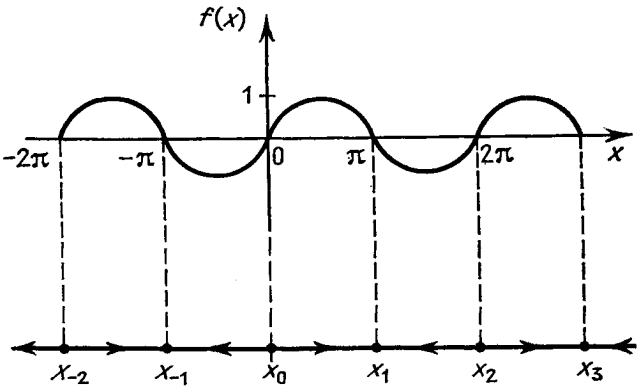


Рис. 2.4. Фазовый портрет уравнения (2.1.10).

Из рисунка видно, что состояние равновесия $x^{(1)}$ является устойчивым, а состояние равновесия $x^{(2)}$ — неустойчивым.

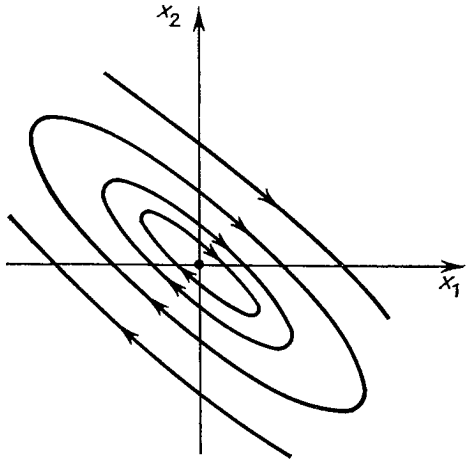


Рис. 2.5. $\dot{x}_1 = 3x_1 + 4x_2$, $\dot{x}_2 = -3x_1 - 3x_2$.

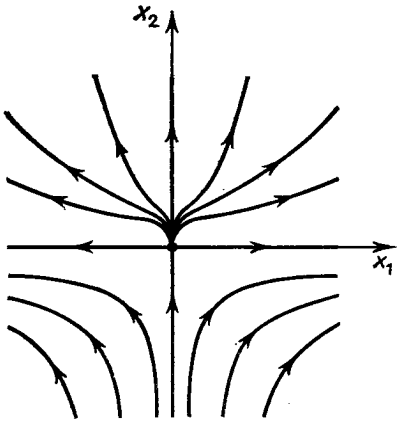


Рис. 2.6. $\dot{x}_1 = x_1$, $\dot{x}_2 = x_2^2$.

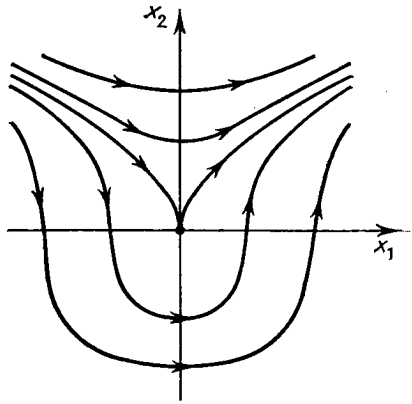


Рис. 2.7. $\dot{x}_1 = x_2^2$, $\dot{x}_2 = x_1$.

Пример 2.3. Фазовый портрет уравнения

$$\dot{x} = \sin x \tag{2.1.10}$$

вместе с графиком функции $\sin x$ представлен на рис. 2.4.

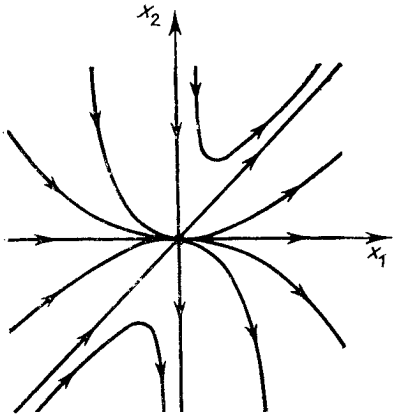


Рис. 2.8. $\dot{x}_1 = x_1^2$, $\dot{x}_2 = x_2(2x_1 - x_2)$.

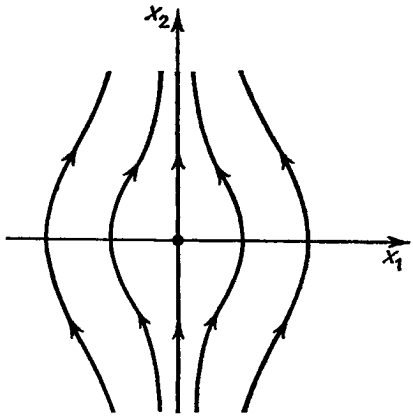


Рис. 2.9. $\dot{x}_1 = -x_1x_2$, $\dot{x}_2 = x_1^2 + x_2^2$.

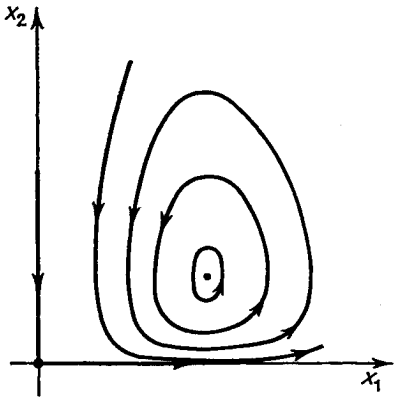


Рис. 2.10. $\dot{x}_1 = x_1(1 - x_2)$, $\dot{x}_2 = -x_2(2 - x_1)$.

Пример 2.4. На рис. 2.5.—2.10 изображены фазовые портреты различных двумерных (линейных и нелинейных) систем ОДУ.

2.1.2. Структурная устойчивость и бифуркация

Еще одна важная особенность анализа математических моделей реальных систем заключается в следующем. Исследуемый реальный процесс протекает обычно при определенных внешних условиях, которые в общем случае можно характеризовать определенными значениями параметров системы. Эти параметры входят также и в соответствующую систему дифференциальных уравнений. Таким образом, математическая модель принимает вид

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\alpha}), \tag{2.1.11}$$

где $\mathbf{x} = (x_1, \ldots, x_n) \in \mathsf{R}^n$ — вектор переменных состояния (фазовых переменных) и $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1, \ldots, \alpha_k) \in \mathsf{R}^k$ — вектор параметров системы.

Параметры системы в ходе процесса изменяются в некотором, обычно очень малом диапазоне, с тем чтобы не вызвать качественных изменений поведения исследуемой системы. (Здесь имеются в виду искусственно управляемые процессы. — *Ред.*) По отношению к этим малым изменениям (возмущениям) система является устойчивой.

Точно так же должна быть устойчивой относительно малых изменений параметров и соответствующая система ОДУ (2.1.11). Поясним теперь более подробно, что мы понимаем под устойчивостью, точнее под структурной устойчивостью дифференциального уравнения.

Если в уравнении (2.1.11) немного изменить параметр α, то немного изменится и векторное поле $\mathbf{f}$. Если это малое изменение правой части не оказывает существенного влияния на фазовый портрет дифференциального уравнения (2.1.11) (новый фазовый портрет качественно не отличается от исходного), то мы говорим, что данное дифференциальное уравнение структурно устойчиво.

Два фазовых портрета мы называем *качественно одинаковыми*, если существует взаимно однозначное отображение одного фазового портрета (ф. п.) на другой, которое переводит траектории первого фазового портрета в траектории второго фазового портрета при сохранении направления их обхода.

В частности, одноточечным траекториям первого ф. п. соответствуют одноточечные траектории второго ф. п., замкнутым траекториям соответствуют замкнутые траектории, гомоклиническим — гомоклинические и т. д.

Относительно дифференциальных уравнений, которые обладают качественно одинаковыми фазовыми портретами, мы говорим, что они качественно эквивалентны [1].

Обратимся вновь к уравнению (2.1.11). Если изменять параметр $\boldsymbol{\alpha}$ в большом диапазоне, может случиться, что произойдет качественное изменение соответствующего фазового портрета. Такое качественное изменение мы называем бифуркацией фазового портрета.

Значение параметра $\boldsymbol{\alpha} = \boldsymbol{\alpha}_0$, при котором происходит бифуркация, мы называем *бифуркационным значением параметра* (иногда также точкой бифуркации).

Замечание 2.1. При бифуркационном значении параметра $\boldsymbol{\alpha} = \boldsymbol{\alpha}_0$ дифференциальное уравнение

$$\dot{\mathbf{x}} = f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\alpha}_0)$$

не является структурно устойчивым.

Пример 2.5. Фазовые портреты дифференциального уравнения

$$\dot{x} = \alpha x \quad (x, \alpha \in \mathrm{R}) \tag{2.1.12}$$

изображены на рис. 2.11. При любом $\alpha \neq 0$ уравнение (2.1.12) имеет одно состояние равновесия $x = 0$; при $\alpha < 0$ это состояние устойчиво, а при $\alpha > 0$ — неустойчиво.

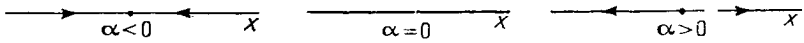


Рис. 2.11. Фазовые портреты уравнения (2.1.12).

При $\alpha = 0$ всякая точка $x \in \mathrm{R}$ является состоянием равновесия уравнения $\dot{x} = 0$. Значение $\alpha = 0$ представляет собой бифуркационное значение параметра для уравнения (2.1.12).

Замечание 2.2. Дифференциальные уравнения типа (2.1.11), правые части которых зависят от k параметров $\alpha_1, \ldots, \alpha_k$, мы будем кратко называть k-параметрической системой дифференциальных уравнений. В дальнейшем нам чаще всего будут встречаться 1-параметрические и 2-параметрические системы.

Пример 2.6. На рис. 2.12 изображена бифуркация фазового портрета 1-параметрической системы двух дифференциальных уравнений

$$\begin{cases} \dot{x}_1 = \alpha x_1, \\ \dot{x}_2 = -x_2. \end{cases} \tag{2.1.13}$$

[1] Более точное определение этого понятия (топологической орбитальной эквивалентности) может быть найдено в [2.9]. — *Прим. ред.*

При $\alpha < 0$ эта система имеет одно состояние равновесия $\mathbf{x} = (x_1, x_2) = (0, 0)$, которое представляет собой устойчивый узел. При $\alpha = 0$ каждая точка оси x_1 является состоянием равновесия системы (2.1.13). При $\alpha > 0$ система (2.1.13) вновь

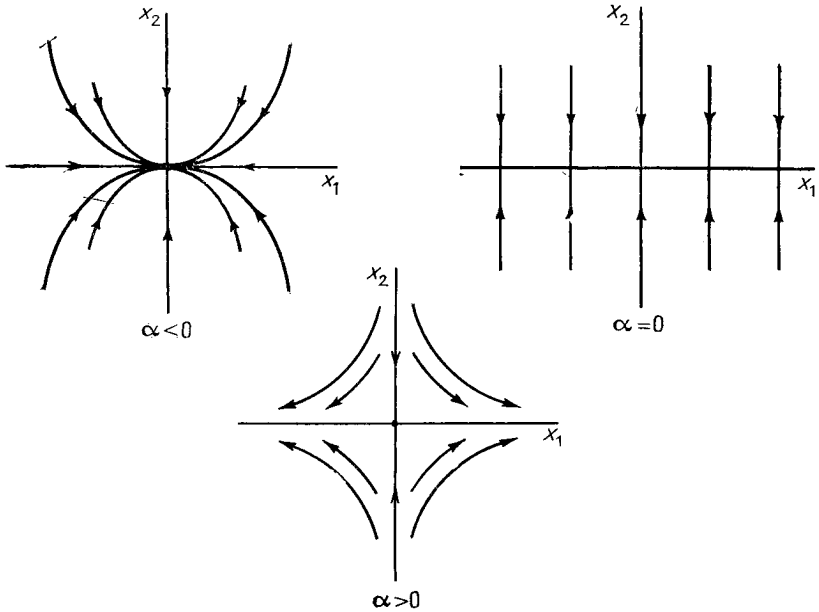


Рис. 2.12. Фазовые портреты системы (2.1.13).

имеет одно состояние равновесия $\mathbf{x} = (0, 0)$, которое теперь представляет собой седло. При переходе параметра α через нуль происходит бифуркация фазового портрета.

2.1.3. Глобальные и локальные задачи

В случае одномерного или двумерного фазового пространства построение глобального фазового портрета и исследование его бифуркаций, в общем, осуществляется достаточно легко. С увеличением размерности фазового пространства построение глобального фазового портрета, а тем самым и его бифуркаций, становится все более сложной задачей.

Исходя из этого, мы часто исследуем фазовый портрет только в определенной части фазового пространства, например, в окрестности состояния равновесия или вблизи замкнутой

траектории. Такие задачи мы называем локальными — они оказываются гораздо более легкими, нежели глобальные задачи. Главы 5 и 6 посвящены именно локальным задачам.

2.2. БИФУРКАЦИИ ПОЛОЖЕНИЙ РАВНОВЕСИЯ

В этом параграфе мы рассмотрим три основных типа бифуркаций фазовых портретов в окрестности положений равновесия. Ими являются:
(1) Бифуркация типа седло—узел,
(2) Бифуркация Андронова—Хопфа,
(3) Бифуркация с потерей симметрии.

2.2.1. Бифуркации типа седло — узел [1]

Начнем с простого примера. Рассмотрим 1-параметрическое дифференциальное уравнение

$$\dot{x} = x^2 + \alpha, \quad x \in \mathbb{R}, \quad \alpha \in \mathbb{R}. \tag{2.2.1}$$

Фазовые портреты уравнения (2.2.1) представлены на рис. 2.13.

Из рисунка видно, что уравнение (2.2.1) при $\alpha < 0$ имеет два положения равновесия $x^{(1)}(\alpha) = -\sqrt{|\alpha|}$, $x^{(2)}(\alpha) = +\sqrt{|\alpha|}$, одно из которых, а именно $x^{(1)}$, является устойчивым, а другое, $x^{(2)}$, — неустойчивым. При $\alpha = 0$ существует одно положение

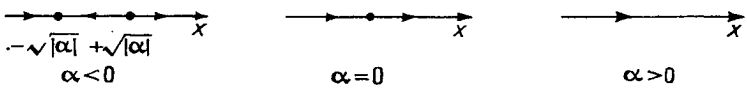


Рис. 2.13. Фазовые портреты уравнения (2.2.1).

равновесия $x_0 = 0$, а при $\alpha > 0$ положения равновесия отсутствуют. Таким образом, значение $\alpha = 0$ является бифуркационным значением параметра.

Когда параметр α возрастает, приближаясь к 0 слева ($\alpha \to -0$), устойчивое и неустойчивое положения равновесия приближаются друг к другу, при $\alpha = 0$ они сливаются, а при $\alpha > 0$ одновременно исчезают. Можно сказать, что эти положения равновесия при слиянии аннигилируют, взаимно уничтожаются. (Это похоже на процесс аннигиляции позитрона и электрона.)

Более наглядно бифуркацию типа седло—узел можно описать, построив зависимость положений равновесия уравнения (2.2.1) от параметра α. При этом мы получим изображенную

[1] Происхождение этого не слишком удачного термина разъяснено в конце этого пункта. — *Прим. ред.*

на рис. 2.14 диаграмму, которую будем называть *диаграммой (стационарных) решений* уравнения (2.2.1). Точки параболы $\alpha = -x^2$ изображают состояния равновесия уравнения (2.2.1). Верхняя ветвь параболы представляет собой ветвь неустойчивых положений равновесия, нижняя ветвь — устойчивых.

В случае реальной системы, описываемой уравнением (2.2.1), система стабилизируется в устойчивом состоянии равновесия, так что о существовании другого, неустойчивого состояния равновесия мы, как правило, ничего не знаем. При переходе

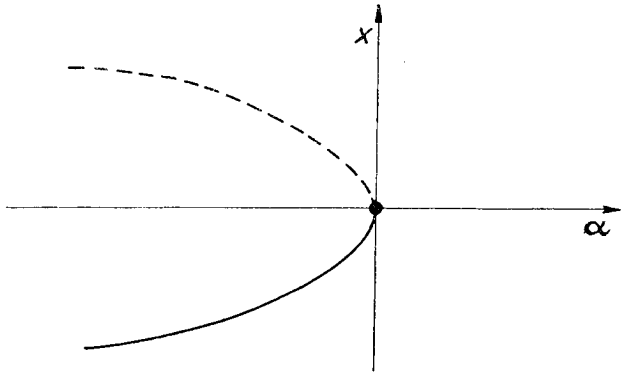


Рис. 2.14. Диаграмма стационарных решений уравнения (2.2.1).

параметра α через бифуркационное значение $\alpha = 0$ слева направо это устойчивое состояние равновесия внезапно исчезает. Наоборот, если параметр α переходит через бифуркационное значение $\alpha = 0$ справа налево, то в этом случае у нас внезапно появляется одно устойчивое состояние равновесия системы.

Замечание 2.3. Линеаризуя уравнение (2.2.1) в окрестности положений равновесия $x_1(\alpha) = -\sqrt{|\alpha|}$ и $x_2(\alpha) = +\sqrt{|\alpha|}$, получаем

$$\dot{z} = -2\sqrt{|\alpha|}z \quad \text{и} \quad \dot{z} = 2\sqrt{|\alpha|}z. \tag{2.2.2}$$

Поскольку уравнение (2.2.1) является одномерным, обе матрицы линеаризации имеют порядок 1 и их собственные числа равны соответственно $\lambda_1(\alpha) = -2\sqrt{|\alpha|}$ и $\lambda_2(\alpha) = 2\sqrt{|\alpha|}$, причем

$$\lim_{\alpha \to -0} \lambda_1(\alpha) = \lim_{\alpha \to -0} \lambda_2(\alpha) = 0. \tag{2.2.3}$$

Матрица линеаризации в состоянии равновесия $x = 0$ (соответствующем бифуркационному значению параметра $\alpha = 0$) имеет нулевое собственное число.

В общем, n-мерном случае, если для некоторого положения равновесия матрица линеаризации имеет одно собственное число, равное нулю, бифуркация происходит аналогично: при изменении параметра положение равновесия либо исчезает, либо расщепляется на два новых положения равновесия. Можно доказать, что это утверждение справедливо для «почти всех» 1-параметрических систем дифференциальных уравнений с n-мерным фазовым пространством.

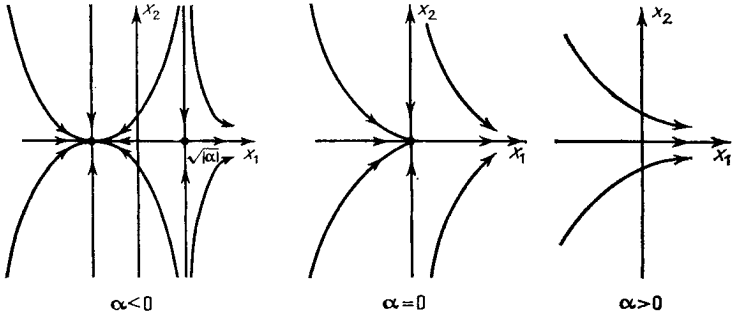


Рис. 2.15. Бифуркация типа «седло — узел» для 1-параметрической системы

$$\dot{x}_1 = x_1^2 + \alpha, \quad \dot{x}_2 = -x_2.$$

На рис. 2.15 изображена бифуркация типа «седло—узел» для двумерного случая. Из рис. 2.15 видно, что при $\alpha < 0$ система имеет два положения равновесия, одно из которых есть седло, а другое — узел. Эти точки при $\alpha \to -0$ приближаются друг к другу и при $\alpha = 0$ сливаются вместе в так называемое «седло—узел». Отсюда и возникло название «бифуркация типа седло—узел».

2.2.2. Бифуркации Андронова — Хопфа

Начнем снова с простейшего примера — рассмотрим бифуркацию положения равновесия для следующей 1-параметрической системы двух дифференциальных уравнений:

$$\begin{aligned} \dot{x}_1 &= \alpha x_1 - x_2 - x_1(x_1^2 + x_2^2), \qquad \dot{} = \frac{d}{dt}, \\ \dot{x}_2 &= x_1 + \alpha x_2 - x_2(x_1^2 + x_2^2). \end{aligned} \tag{2.2.4}$$

Система (2.2.4) имеет положение равновесия $x = (0, 0)$ при любых значениях параметра α. Исследуем его устойчивость при различных значениях $\alpha \in \mathbb{R}$.

Матрица линеаризованной системы в точке $\mathbf{x} = (0, 0)$ имеет вид

$$\begin{bmatrix} \alpha, & -1 \\ 1, & \alpha \end{bmatrix}; \tag{2.2.5}$$

она имеет комплексные собственные числа

$$\lambda_{1,2}(\alpha) = \alpha \pm i. \tag{2.2.6}$$

Следовательно, при $\alpha < 0$ состояние равновесия $\mathbf{x} = (0, 0)$ представляет собой устойчивый фокус, а при $\alpha > 0$ — неустойчивый фокус. При $\alpha = 0$ собственные числа располагаются на мнимой оси, и об устойчивости состояния равновесия нельзя судить по линеаризованной системе.

Для исследования фазового портрета системы (2.2.4) удобно преобразовать ее к полярным координатам. Положим

$$x_1 = r\cos\varphi, \quad x_2 = r\sin\varphi \tag{2.2.7}$$

и продифференцируем левые и правые части соотношений (2.2.7) по времени, считая переменные r и φ функциями t. Мы получим

$$\begin{aligned} \dot{x}_1 &= \dot{r}\cos\varphi - r\dot{\varphi}\sin\varphi, \\ \dot{x}_2 &= \dot{r}\sin\varphi + r\dot{\varphi}\cos\varphi. \end{aligned} \tag{2.2.8}$$

После подстановки в уравнения (2.2.4) и простых преобразований получаем систему

$$\begin{cases} \dot{r} = r(\alpha - r^2), & (2.2.9) \\ \dot{\varphi} = 1. & (2.2.10) \end{cases}$$

Из второго уравнения следует, что переменная φ играет роль времени ($\varphi = t + t_0$) и что наиболее существенная информация о структуре траекторий содержится в уравнении (2.2.9).

Положения равновесия уравнения (2.2.9) суть решения уравнения

$$r(\alpha - r^2) = 0; \quad r \geqslant 0. \tag{2.2.11}$$

Таким образом, одно положение равновесия $r_1 = 0$ существует при любых значениях параметра α. При $\alpha \leqslant 0$ других положений равновесия нет.

При $\alpha > 0$ уравнение (2.2.9) имеет еще одно состояние равновесия $r_2 = \sqrt{\alpha}$, которое является устойчивым.

Положение равновесия $r_1 = 0$ уравнения (2.2.9) отвечает положению равновесия $\mathbf{x} = (0, 0)$ системы (2.2.4), тогда как положение равновесия $r_2 = \sqrt{\alpha}$ соответствует устойчивой замкну-

той траектории системы (2.2.4), а именно окружности радиуса $\sqrt{\alpha}$.

Таким образом, при переходе параметра α через нуль слева направо устойчивый фокус становится неустойчивым, и от него отделяется замкнутая траектория, диаметр которой растет пропорционально величине $\sqrt{\alpha}$.

Такое явление называется *бифуркацией Андронова—Хопфа* (или бифуркацией рождения цикла); схема его изображена на рис. 2.16.

Бифуркация Андронова—Хопфа устанавливает связь между потерей устойчивости положений равновесия и возникновением периодических решений в системах дифференциальных уравнений.

В реальных системах бифуркация Андронова—Хопфа возникает довольно часто. В приложениях удобно наглядно представлять бифуркацию Андронова—Хопфа, изображая графически зависимость отдельных фазовых переменных от времени (см. рис. 2.17, который соответствует рис. 2.16). В экспериментах при значениях параметра, близких к критическому, возникающее периодическое решение мало отличается от стационарного решения, поскольку его амплитуда очень мала и может теряться в экспериментальном шуме.

Пример 2.7. Процесс бифуркации для 1-параметрической системы дифференциальных уравнений вида

$$\begin{aligned} \dot{x}_1 &= \alpha x_1 - x_2 + x_1(x_1^2 + x_2^2), \\ \dot{x}_2 &= x_1 + \alpha x_2 + x_2(x_1^2 + x_2^2) \end{aligned} \tag{2.2.12}$$

изображен на рис. 2.18. Возникающая здесь замкнутая траектория является неустойчивой.

Про бифуркацию Андронова—Хопфа, происходящую по сценарию рис. 2.16, говорят, что в этом случае происходит *мягкая потеря* устойчивости положения равновесия. Здесь система под действием постоянно присутствующих малых возмущений переходит сначала из неустойчивого состояния равновесия на «малую» устойчивую периодическую траекторию, так что изменение поведения системы оказывается постепенным, «мягким». Другая возможность изображена на рис. 2.18. Здесь с возрастанием параметра область притяжения устойчивого фокуса (и амплитуда неустойчивого периодического решения) уменьшается, и при исчезновении периодической траектории положение равновесия становится неустойчивым. Из него система под действием малого возмущения переходит в некоторый более отдаленный стационарный режим (часто — периодический) и, следовательно,

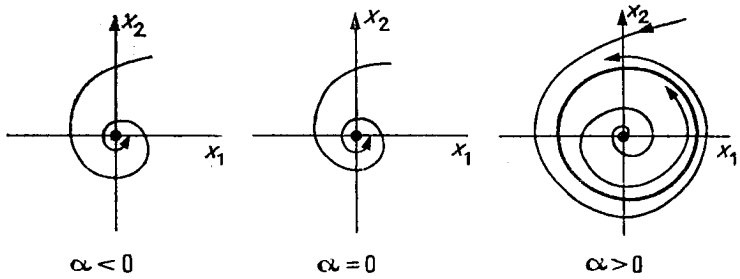


Рис. 2.16. Бифуркация Андронова—Хопфа (случай мягкой потери устойчивости).

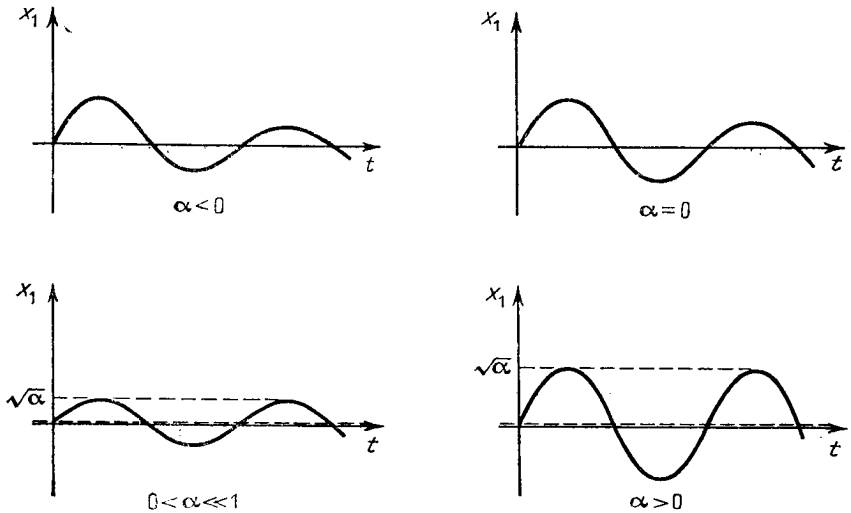


Рис. 2.17. Бифуркация Андронова—Хопфа: временная зависимость для одной из переменных.

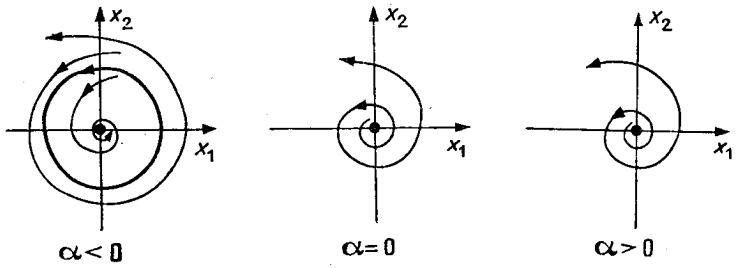


Рис. 2.18. Бифуркация Андронова—Хопфа (случай жесткой потери устойчивости).

при малом изменении параметра (в окрестности его бифуркационного значения) происходит сильное изменение состояния системы. Это явление называется *жесткой потерей устойчивости.*

Достаточные условия возникновения бифуркации Андронова—Хопфа в 1-параметрической n-мерной системе дифференциальных уравнений даются следующей теоремой.

Теорема (Хопфа). Пусть система

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(\mathbf{x}, \alpha), \quad \mathbf{x} \in \mathbf{R}^n, \quad \alpha \in \mathbf{R}^1 \tag{2.2.13}$$

имеет положение равновесия $\mathbf{x} = \mathbf{0}$ при любых значениях параметра α. Далее, пусть матрица линеаризации при значениях α в некоторой окрестности α_0 имеет пару комплексно сопряженных собственных чисел $\lambda_{1,2}(\alpha) = \xi(\alpha) \pm i\omega(\alpha)$, причем

$$\xi(\alpha_0) = 0, \quad \omega(\alpha_0) = \omega_0 > 0, \quad \frac{d\xi}{d\alpha}(\alpha_0) \neq 0.$$

Кроме того, предположим, что остальные $n-2$ собственных чисел имеют ненулевые вещественные части.

Тогда при $\alpha = \alpha_0$ от нулевого положения равновесия ответвляется однопараметрическая система замкнутых траекторий, отвечающих периодическим решениям периода $T(\alpha) \approx 2\pi/\omega_0$, ($T(\alpha) \to 2\pi/\omega_0$ при $\alpha \to \alpha_0$. — *Ред.*). Замкнутые траектории могут ответвляться либо при $\alpha < \alpha_0$, либо при $\alpha > \alpha_0$.

2.2.3. Бифуркации при наличии симметрии

Если дифференциальные уравнения описывают реальный процесс, обладающий некой симметрией, то эта симметрия проявится в дифференциальных уравнениях и тем самым окажет влияние на бифуркации.

Пример 2.8. Рассмотрим 1-параметрическое дифференциальное уравнение

$$\dot{x} = f(x, \alpha), \quad x \in \mathbf{R},$$

правая часть которого удовлетворяет соотношению $f(-x, \alpha) = -f(x, \alpha)$, т. е. функция f является нечетной по переменной x. Чтобы понять, что дает такой вид симметрии, выберем простейший вид f, $f(x, \alpha) = \alpha x - x^3$, и исследуем бифуркационные явления в полученном уравнении

$$\dot{x} = \alpha x - x^3. \tag{2.2.14}$$

Положение равновесия найдем, решая уравнение

$$\alpha x - x^3 = 0,$$

т. е. $x^{(1)} = 0$ — состояние равновесия при любых $\alpha \in \mathbf{R}$ и $x^{2,3} = \pm\sqrt{\alpha}$ при $\alpha > 0$. Таким образом, уравнение (2.2.14) при $\alpha \leqslant 0$ имеет одно устойчивое положение равновесия $x_1 = 0$. При $\alpha > 0$ это состояние равновесия становится неустойчивым, и от него ответвляются два устойчивых состояния равновесия $x^{(2)} = \sqrt{\alpha}$, $x^{(3)} = -\sqrt{\alpha}$. Соответствующие портреты показаны на

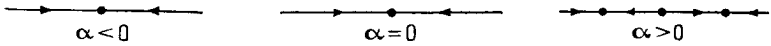


Рис. 2.19. Фазовые портреты уравнения (2.2.14).

рис. 2.19, а диаграмма стационарных решений уравнения (2.2.14) представлена на рис. 2.20. Учитывая форму этой диаграммы, описанную бифуркацию называют иногда *бифуркацией типа вилки*. Случай, описанный в примере 2.8, можно

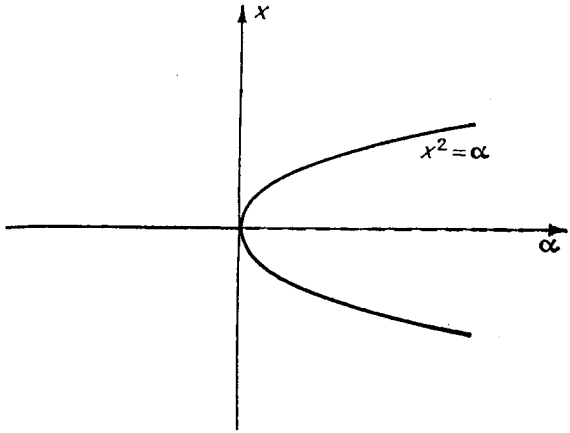


Рис. 2.20. Диаграмма стационарных решений — бифуркация типа «вилка».

включить в более общее рассмотрение дифференциальных уравнений с симметрией. Дадим формальное определение.

Рассмотрим векторное дифференциальное уравнение (систему)

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \mathbf{R}^n \tag{2.2.15}$$

и пусть $\varphi(t, \mathbf{x})$ — его фазовый поток. Если существует диффеоморфизм $\mathbf{g} : \mathbf{R}^n \to \mathbf{R}^n$, такой, что для всех $\mathbf{x} \in \mathbf{R}^n$ имеет место соотношение

$$\mathbf{f}(\mathbf{g}(\mathbf{x})) = \frac{d\mathbf{g}(\mathbf{x})}{d\mathbf{x}} \mathbf{f}(\mathbf{x}), \tag{2.2.16}$$

то мы говорим, что дифференциальное уравнение (2.2.15) инвариантно по отношению к диффеоморфизму $\mathbf{g}$ или, кратко, $\mathbf{g}$-инвариантно. Диффеоморфизм $\mathbf{g}$ мы называем *симметрией* уравнения (2.2.15), а о самом дифференциальном уравнении говорим как о дифференциальном уравнении с симметрией [1].

Если теперь мы имеем k-параметрическую систему дифференциальных уравнений

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\alpha}), \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \quad \boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{R}^k, \tag{2.2.17}$$

$\mathbf{g}$-инвариантную для каждого α, то мы говорим, что система (2.2.17) представляет собой k-параметрическую систему дифференциальных уравнений с симметрией g.

Пример 2.9. Рассмотрим 1-параметрическую систему (2.2.17) при $n = 1$ и положим $g(x) = -x$. Формула (2.2.16) в этом случае принимает вид $f(-x, \alpha) = -f(x, \alpha)$. Уравнение $\dot{x} = f(x, \alpha)$ g-инвариантно, если функция $f(x, \alpha)$ нечетна по переменной x (ср. с примером 2.8).

Для фазового потока φ уравнения (2.2.15) с симметрией $\mathbf{g}$ при любых $t \in \mathbb{R}$ и $x \in \mathbb{R}^n$ имеет место соотношение

$$\varphi(t, \mathbf{g}(\mathbf{x})) = \mathbf{g}(\varphi(t, \mathbf{x})). \tag{2.2.18}$$

Следствие из формулы (2.2.18):

Если γ есть траектория уравнения (2.2.15), *то* $\mathbf{g}(\gamma)$ *также является траекторией уравнения* (2.2.15).

В частности, это утверждение справедливо и для положений равновесия. В этом, собственно, и заключается сущность бифуркации типа вилки, описанной в примере 2.8: с отщеплением состояния равновесия $x = \sqrt{\alpha}$ от нулевого состояния равновесия появляется также симметричное ему положение равновесия $g(\sqrt{\alpha}) = -\sqrt{\alpha}$.

Решение $\mathbf{g}$-инвариантного дифференциального уравнения, траектория которого γ удовлетворяет соотношению

$$\mathbf{g}(\gamma) = \gamma,$$

называется *симметричным решением.*

В примере 2.8 симметричным решением является стационарное решение, соответствующее нулевому положению равновесия ($x(t) \equiv 0$).

Обратимся вновь к рис. 2.20. Если двигаться в направлении возрастания параметра α, то в точке $\alpha = 0$ происходит каче-

---

[1] Менее формальное определение. Уравнение $\mathbf{x} = \mathbf{f}(\mathbf{x})$ $\mathbf{g}$-инвариантно, если при замене переменных $\mathbf{y} = \mathbf{g}(\mathbf{x})$ оно не изменяется (т. е. получается $\dot{\mathbf{y}} = \mathbf{f}(\mathbf{y})$). В частности, если $\mathbf{x} = \varphi(t)$ — решение, то $\mathbf{x} = \mathbf{g}(\varphi(t))$ — тоже решение. — *Прим. ред.*

ственное изменение характера симметрии стационарных решений. При $\alpha < 0$ устойчивое стационарное решение является g-симметричным, в то время как при $\alpha > 0$ соответствующее *устойчивое* стационарное решение этим свойством уже не обладает.

Таким образом, речь здесь идет о потере симметрии устойчивых решений при бифуркации (английский термин «symmetry breaking»). Это явление возникает, к примеру, в хорошо известной модели Лоренца (см. *задачу* 10).

Уравнения Лоренца

$$\begin{cases} \dot{x} = \sigma(y - x), \\ \dot{y} = -y + rx - xz, \\ \dot{z} = -bz + xy \end{cases}$$

как легко проверить, инвариантны по отношению к линейному отображению [2]

$$\mathbf{g}(x, y, z) = (-x, -y, z).$$

2.3. БИФУРКАЦИИ ПЕРИОДИЧЕСКИХ РЕШЕНИЙ

В этом параграфе мы познакомимся с основными типами бифуркаций периодических решений систем дифференциальных уравнений; траектории этих решений — замкнутые кривые.

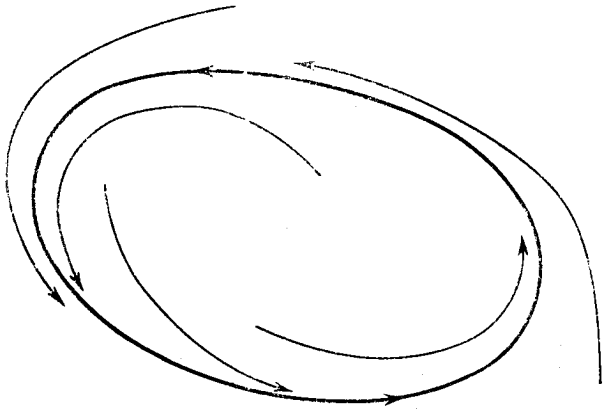


Рис. 2.21. Орбитальная устойчивость замкнутой траектории.

Изложение будет вестись последовательно на трех уровнях. В п. 2.3.1 мы на иллюстративном материале познакомимся с отдельными видами бифуркаций. В п. 2.3.2 для описания этих

бифуркаций мы используем отображение Пуанкаре, которое будет применяться также во многих случаях в главах 5 и 6. Наконец, в п. 2.3.3 и в последующих пунктах мы рассмотрим теоретическую аргументацию, на которой основаны численные методы исследования устойчивости периодических решений.

Замечание. Как и в случае положений равновесия, изменение характера устойчивости замкнутой траектории сопровождается бифуркацией. Строгое определение (орбитальной) устойчивости замкнутой траектории будет приведено в п. 2.3.3.

Пока же достаточно понимать, что замкнутая траектория γ является устойчивой, если все траектории, достаточно близкие к траектории γ, с возрастанием времени неограниченно приближаются к ней (см. рис. 2.21).

2.3.1. Основные типы бифуркаций периодических решений [3]

Рассмотрим 1-параметрическую систему дифференциальных уравнений

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(\mathbf{x}, \alpha), \quad \alpha \in \mathrm{R}, \quad \mathbf{x} \in \mathrm{R}^n, \tag{2.3.1}$$

которая при определенных значениях параметра α имеет замкнутую траекторию γ_1. В общем случае изменение значений параметра может послужить причиной одной из следующих бифуркаций.

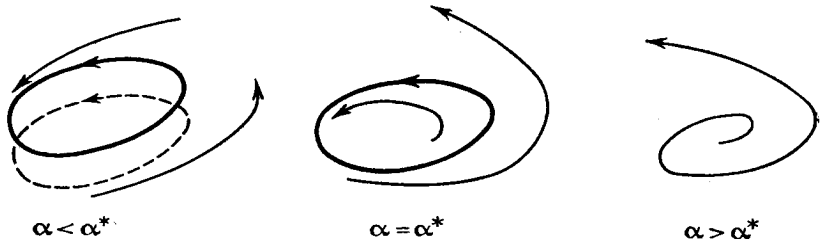


Рис. 2.22. Бифуркация рождения—исчезновения пары замкнутых траекторий.

(I). В фазовом пространстве системы (2.3.1) существует пара замкнутых траекторий γ_1, γ_2, которые при изменении (например, при возрастании) параметра α сближаются друг с другом, при бифуркационном значении параметра $\alpha = \alpha^*$ сливаются вместе, а при дальнейшем изменении параметра исчезают (см. рис. 2.22). Если двигаться по рис. 2.22 справа налево, т. е. в направлении убывания параметра, то описываемая бифуркация представляется нам так, что при $\alpha = \alpha^*$ возникает

замкнутая траектория, которая при $\alpha < \alpha^*$ расщепляется на две замкнутые траектории. Поскольку при этой бифуркации возникает или исчезает пара замкнутых траекторий, ее называют иногда *бифуркацией возникновения или исчезновения пары замкнутых траекторий.*

(II). *Бифуркация удвоения периода.*

Этот тип бифуркации изображен на рис. 2.23. Здесь существует «первоначальная» замкнутая траектория при значениях

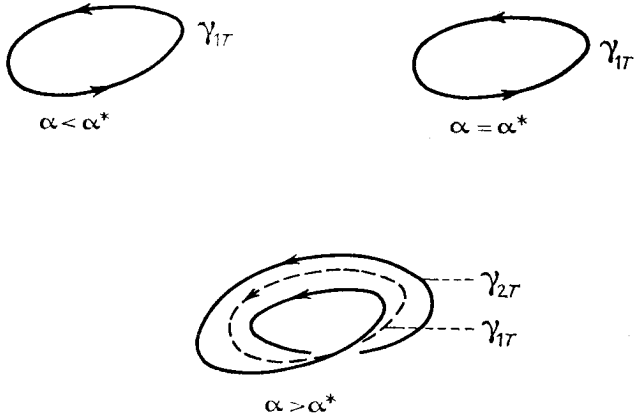


Рис. 2.23. Бифуркация удвоения периода.

параметра α, располагающихся по обе стороны бифуркационного значения α^*. На рис. 2.23 схематически изображена ситуация, когда первоначально устойчивая замкнутая траектория γ_{1T} при переходе α через α^* становится неустойчивой и от нее ответвляется замкнутая траектория γ_{2T}, которая замыкается после двойного обхода вокруг траектории γ_{1T}. Новая траектория имеет почти такую же «амплитуду», но приблизительно двойной период (асимптотически, при $\alpha \to \alpha^*$, точно двойной период) — отсюда и название бифуркации.

(III). *Возникновение инвариантного тора*

Ход событий для этой бифуркации изображен на рис. 2.24. В данном случае от замкнутой траектории, которая становится неустойчивой при изменении параметра, отделяется тор, заполненный траекториями системы (2.3.1). Дальнейшее «разбухание» тора можно сравнить с накачкой автомобильной камеры.

(IV). *Бифуркации с потерей симметрии*

Предположим, что система (2.3.1) обладает некоторой симметрией $\mathbf{g}$ (см. п. 2.2.3), например $\mathbf{g}$ представляет собой симметрию относительно плоскости ρ. Предположим, далее, что

существует замкнутая траектория γ_0, лежащая в плоскости ρ $(g(\gamma_0) = \gamma_0)$. Такая траектория при изменении α обычно пре-

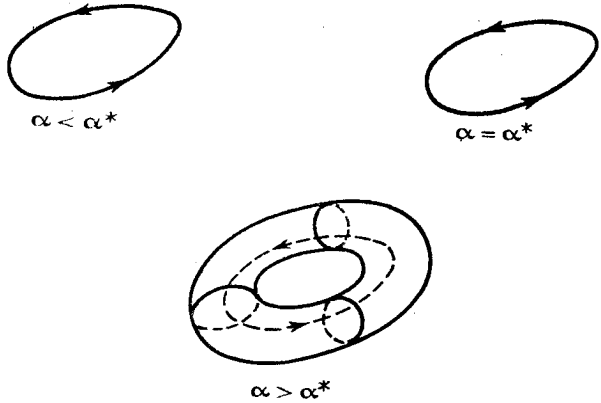


Рис. 2.24. Возникновение инвариантного тора.

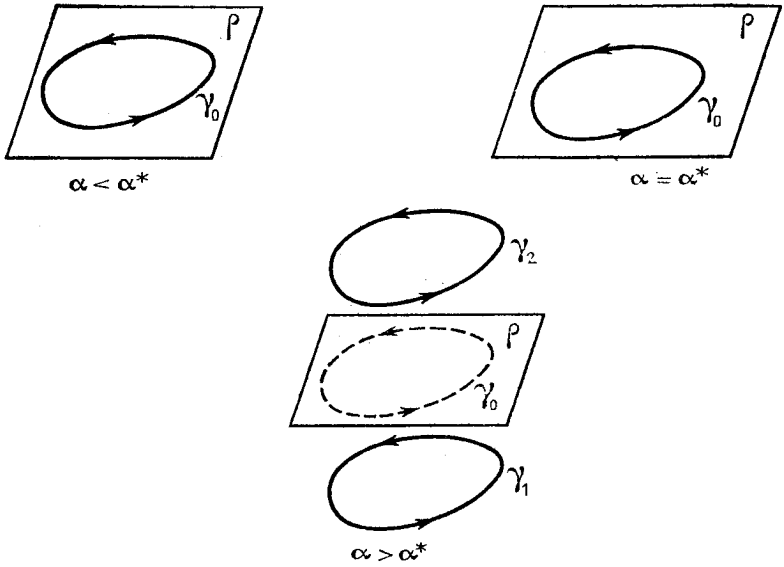


Рис. 2.25. Бифуркация с потерей симметрии.

терпевает следующую бифуркацию. Одновременно с потерей устойчивости от нее ответвляются две устойчивые траектории γ_1 и γ_2, взаимно симметричные относительно плоскости ρ (см. рис. 2.25). Возникшие устойчивые траектории уже не яв-

ляются g-симметричными (т. е. $g(\gamma_i) \neq \gamma_i$, $i = 1, 2$); тем самым при изменении α имеет место потеря симметрии устойчивых траекторий — отсюда и название бифуркации. [4]

2.3.2. Отображение Пуанкаре

Пусть γ — замкнутая траектория системы

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \mathbf{R}^n. \tag{2.3.2}$$

Выберем точку $\mathbf{x}_0 \in \gamma$ и проведем через нее сечение, представляющее собой достаточно малую часть гиперплоскости, которая

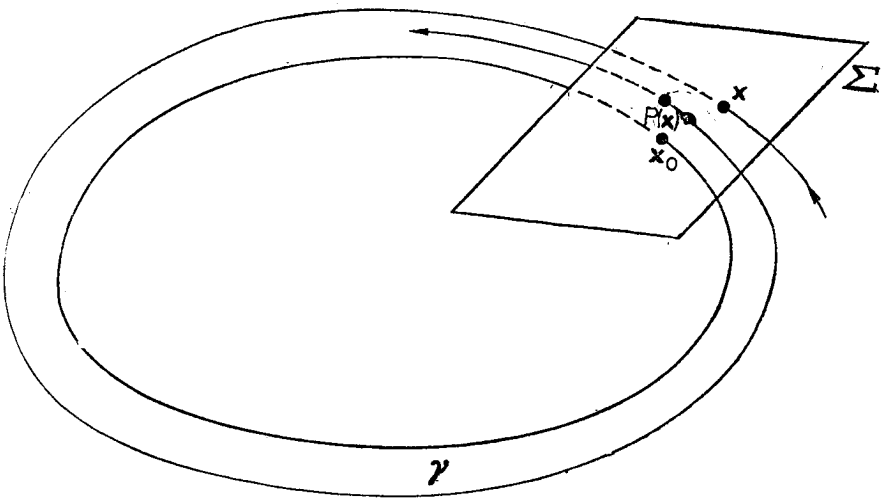


Рис. 2.26. Отображение Пуанкаре.

трансверсально (под ненулевым углом) пересекает траекторию γ в точке $\mathbf{x}_0$ (см. рис. 2.26).

Траектории системы (2.3.2), близкие к замкнутой траектории γ, задают отображение P сечения Σ на себя следующим образом. Возьмем точку $\mathbf{x} \in \Sigma$. Через эту точку проходит траектория $\gamma(\mathbf{x})$. Обозначим через $P(\mathbf{x})$ первую точку пересечения траектории $\gamma(\mathbf{x})$ с сечением Σ, которая следует после $\mathbf{x}$. Тем самым мы определили отображение

$$P : \Sigma \to \Sigma,$$

которое называется отображением Пуанкаре, соответствующим замкнутой траектории γ.

Свойства введенного таким способом отображения P качественно определяют поведение траектории системы (2.3.2) вблизи замкнутой траектории γ. В частности:

1) Пусть точка $\mathbf{x}_0$ является неподвижной точкой отображения P, т. е. $P(\mathbf{x}_0)=\mathbf{x}_0$. Тогда траектория $\gamma(\mathbf{x}_0)$ замкнута. Итак: неподвижным точкам отображения P соответствуют замкнутые траектории системы (2.3.2) (лежащие вблизи траектории γ).

2) Пусть $\mathbf{x}_1 \in \Sigma$. С помощью отображения P определим последовательность точек $\{\mathbf{x}_k\}_{k=1}^{\infty}$, $\mathbf{x}_k \in \sum$ следующим образом:

$$\mathbf{x}_2 = P(\mathbf{x}_1), \quad \mathbf{x}_3 = P(\mathbf{x}_2) = P(P(\mathbf{x}_1)) = P^2(\mathbf{x}_1), \quad \mathbf{x}_{k+1} = P^k(\mathbf{x}_1),$$

где символом $P^k(\mathbf{x})$ обозначается k-я итерация отображения P, т. е.

$$P^k = \underbrace{P \circ P \circ \ldots \circ P}_{k \text{ раз}}.$$

Если теперь для всякой точки $\mathbf{x} \in \Sigma$, достаточно близкой к неподвижной точке $\mathbf{x}_0$, имеет место формула

$$\lim_{k\to\infty} P^k(\mathbf{x}) = \lim_{k\to\infty} \mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_0,$$

то $\mathbf{x}_0$ есть *устойчивая* неподвижная точка отображения P, а замкнутая траектория γ, которая соответствует точке $\mathbf{x}_0$, является устойчивой траекторией. (Это утверждение нуждается в некоторых уточнениях. — *Ред.*)

Устойчивость неподвижной точки $\mathbf{x}_0$ отображения P определяется собственными числами матрицы Якоби $P'(\mathbf{x}_0)$[1], если абсолютные значения всех собственных чисел этой матрицы меньше 1, то $\mathbf{x}_0$ — устойчивая неподвижная точка. При этом собственные числа оказываются равными мультипликаторам соответствующего периодического решения (см. п. 2.3.5).

3) Пусть существует точка $\mathbf{y}_1 \in \Sigma$, такая что

$$P(\mathbf{y}_1) = \mathbf{y}_2 \quad \text{и} \quad P(\mathbf{y}_2) = \mathbf{y}_1$$

и, следовательно,

$$P^2(\mathbf{y}_1) = \mathbf{y}_1 \quad \text{и} \quad P^2(\mathbf{y}_2) = \mathbf{y}_2.$$

Тогда траектория $\tilde{\gamma} = \gamma(y_1)$ замыкается лишь после двух «обходов» вокруг γ (см. рис. 2.27).

Итак, неподвижным точкам второй (k-й) итерации отображения Пуанкаре соответствуют замкнутые траектории системы (2.3.2), которые замыкаются после двух (соответственно, после k) обходов вокруг траектории γ.

---

[1] Матрица возникает после выбора на Σ некоторых координат. Ее собственные числа, конечно, не зависят от этого выбора. — *Прим. ред.*

4) Если вокруг замкнутой траектории γ существует инвариантный тор (см. рис. 2.28), то сечение Σ пересекает этот тор по некоторой замкнутой кривой — «окружности» K. Эта кривая K переводится в себя отображением Пуанкаре P: для всякой точки $\mathbf{x} \in K$ мы имеем $P(\mathbf{x}) \in K$, или же $P(K) = K$. Итак, инвариантной «окружности» отображения Пуанкаре соответствует инвариантный тор системы (2.3.2).

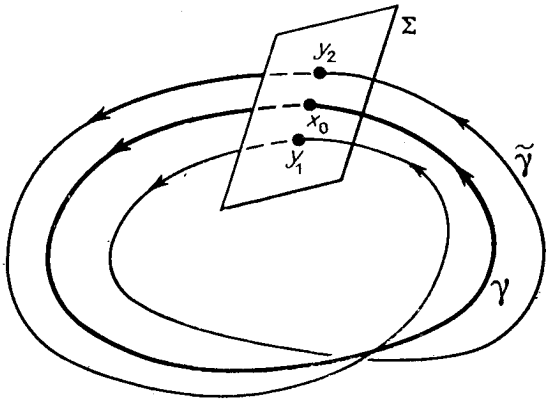


Рис. 2.27. Замкнутая «двухобходная» траектория.

С помощью отображения Пуанкаре проблему бифуркации замкнутой траектории системы можно свести к проблеме бифуркации неподвижной точки этого отображения.

Сравнивая п.п. 2.3.1 и 2.3.2, получаем:

1. Рождению или исчезновению пары замкнутых траекторий соответствует рождение или исчезновение пары неподвижных точек отображения Пуанкаре.

2. Бифуркации удвоения периода соответствует бифуркация неподвижной точки $\mathbf{x}_0$ отображения P, при которой от $\mathbf{x}_0$ ответвляется пара неподвижных точек $\mathbf{y}_1$, $\mathbf{y}_2$ второй итерации отображения P. Заметим, что $\mathbf{x}_0$ — также неподвижная точка отображения P^2.

3. Возникновению инвариантного тора T^2 около замкнутой траектории γ соответствует бифуркация неподвижной точки $\mathbf{x}_0$ отображения P, при которой от точки $\mathbf{x}_0$ ответвляется инвариантная «окружность» (замкнутая инвариантная кривая) отображения P.

4. Бифуркации с потерей симметрии соответствует бифуркация неподвижной точки отображения Пуанкаре, при которой от этой точки ответвляются две другие неподвижные точки отображения Пуанкаре.

Замечание. До сих пор мы определили отображение Пуанкаре на сечении Σ, которое было достаточно мало[1], т. е. мы рассматривали траектории системы, близкие к исследуемой замкнутой траектории. Отображение Пуанкаре можно строить

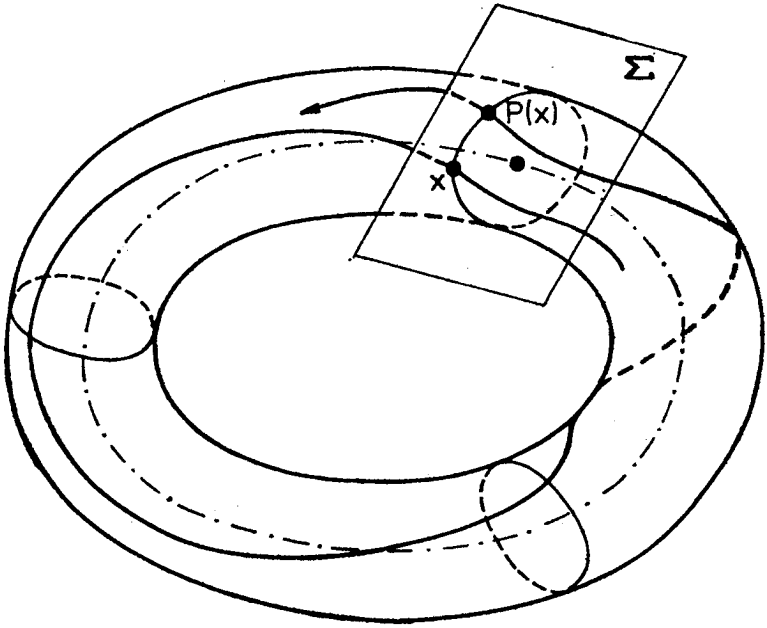


Рис. 2.28. Инвариантный тор T^2.

и в более общей ситуации, когда исследуется глобальное поведение системы. В этом случае в качестве сечения Σ мы выбираем обычно всю гиперплоскость или ее часть, находящуюся в изучаемой области фазового пространства (см. п. 5.9.2).

2.3.3. Орбитальная устойчивость решения

Понятие устойчивости решения имеет в теории бифуркаций основополагающее значение. Существует множество разных определений устойчивости, наиболее известными среди которых являются устойчивость по Ляпунову и орбитальная устойчивость. Для стационарных решений устойчивость по Ляпунову и орбитальная устойчивость означают одно и то же. Для нас важно более подробно познакомиться с понятием орбитальной

[1] В частности, предполагалось, что изучаемая траектория γ пересекает Σ только в одной точке. — *Прим. ред.*

устойчивости решений, и в частности, орбитальной устойчивости периодических решений.

Рассмотрим систему дифференциальных уравнений

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \mathbf{R}^n \tag{2.3.3}$$

и пусть $\varphi_{\mathbf{x}}(t)$ — ее фазовый поток. Пусть $\mathbf{x}(t) = \varphi_{\mathbf{x}_0}(t)$ — решение уравнения (2.3.3), а $\gamma(\mathbf{x}_0)$ — траектория этого решения. Прежде чем давать определения, введем некоторые обозначения.

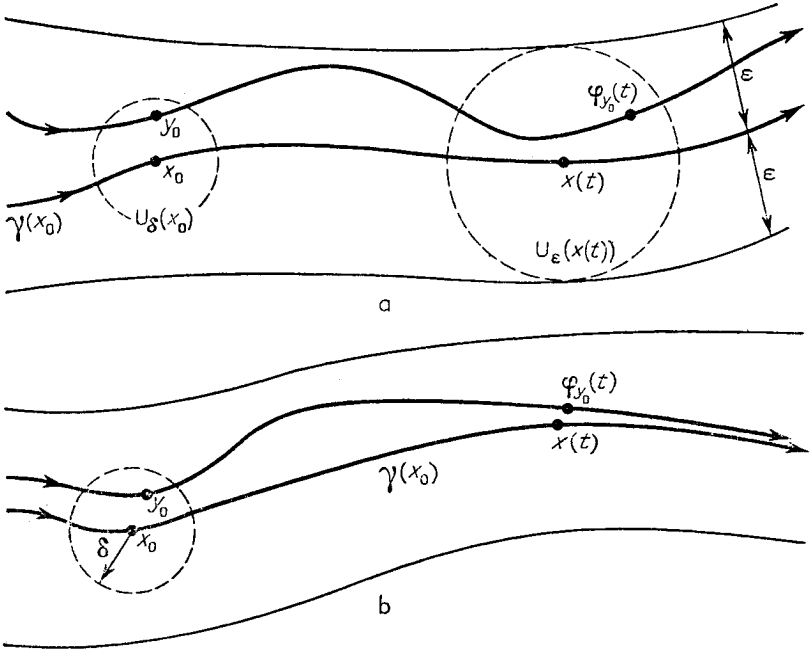


Рис. 2.29. *a*) Орбитальная устойчивость. *b*) Асимптотическая орбитальная устойчивость.

Расстояние между точками $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbf{R}^n$ будем обозначать $\rho(\mathbf{x}, \mathbf{y})$. Если $M \subset \mathbf{R}^n$ — некоторое подмножество и $\mathbf{a} \in \mathbf{R}^n$, то расстояние точки $\mathbf{a}$ от множества M определяется формулой

$$\rho(\mathbf{a}, M) = \inf_{\mathbf{x} \in M} \rho(\mathbf{a}, \mathbf{x}).$$

Решение $\mathbf{x}(t) = \varphi_{\mathbf{x}_0}(t)$ системы (2.3.3) мы называем *орбитально устойчивым*, если для всякого $\varepsilon > 0$ существует $\delta > 0$, такое что верно следующее утверждение: если $\rho(\gamma(\mathbf{x}_0), \mathbf{y}_0) < \delta$,

то $\rho(\gamma(\mathbf{x}_0), \varphi_{\mathbf{y}_0}(t)) < \varepsilon$ при всех $t > 0$. Или, более наглядно: траектории, которые начинаются вблизи траектории $\gamma(\mathbf{x}_0)$, не слишком отдаляются от нее при любых $t > 0$ (см. рис. 2.29*a*).

Решение $\varphi_{\mathbf{x}_0}(t)$ называется *асимптотически орбитально устойчивым*, если оно орбитально устойчиво и, кроме того, выполняется соотношение

$$\lim_{t \to +\infty} \rho(\gamma(\mathbf{x}_0), \quad \varphi_{\mathbf{y}_0}(t)) = 0.$$

Мы будем говорить также об орбитальной устойчивости траекторий.

Итак, если решение $\varphi_{\mathbf{x}_0}(t)$ асимптотически орбитально устойчиво, то всякая траектория системы (2.3.3), начальная точка которой лежит достаточно близко к траектории $\gamma(\mathbf{x}_0)$, неограниченно приближается к этой траектории при $t \to +\infty$ (см. рис. 2.29*b*).

Замечание. Замкнутую асимптотически орбитально устойчивую траекторию мы называем *устойчивым предельным циклом.*

2.3.4. Элементы теории Флоке

Напомним теперь некоторые факты, касающиеся линейных неавтономных систем с периодической правой частью (с периодическими коэффициентами).

Итак, рассмотрим систему

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{A}(t)\mathbf{x}, \quad \mathbf{x} \in \mathbf{R}^n, \tag{2.3.4}$$

где матрица $\mathbf{A}(t)$ есть непрерывная периодическая функция переменной t, т. е. для нее выполнено соотношение

$$\mathbf{A}(t+T) = \mathbf{A}(t), \tag{2.3.5}$$

где $T > 0$ — период.

По определению регулярная (невырожденная) матрица $\mathbf{U}(t)$ представляет собой *фундаментальную матрицу* системы дифференциальных уравнений (2.3.4), если выполнено условие

$$\dot{\mathbf{U}}(t) = \mathbf{A}(t)\mathbf{U}(t).$$

В дальнейшем мы будем рассматривать только стандартные фундаментальные матрицы, для которых $\mathbf{U}(0) = \mathbf{I}$.

Теорема Флоке утверждает следующее.

Стандартная фундаментальная матрица системы (2.3.4) имеет вид

$$\mathbf{U}(t) = \mathbf{P}(t)e^{t\mathbf{R}}, \tag{2.3.6}$$

где $\mathbf{R}$ — постоянная матрица и $\mathbf{P}(t)$ — регулярная периодическая матрица с периодом T, для которой выполняется условие $\mathbf{P}(0) = \mathbf{I}$, и следовательно, $\mathbf{P}(kT) = \mathbf{I}$ при $k \in \mathbf{Z}$.

С помощью фундаментальной матрицы (2.3.6) общее решение системы (2.3.4) можно представить в виде

$$\psi(t, \mathbf{x}) = \mathbf{P}(t) e^{t\mathbf{R}} \cdot \mathbf{x}, \tag{2.3.7}$$

где, очевидно,

$$\psi(0, \mathbf{x}) = \mathbf{x}.$$

Матрица

$$\mathbf{U}(T) = \mathbf{P}(T) e^{T\mathbf{R}} = e^{T\mathbf{R}} \tag{2.3.8}$$

называется *матрицей монодромии*. Собственные числа матрицы монодромии называются *мультипликаторами* системы (2.3.4).

Если система $\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{A}(t)\mathbf{x}$ имеет периодическое решение $\psi(t, \mathbf{x}_0)$ с периодом T, то

$$\psi(T, \mathbf{x}_0) = \mathbf{x}_0, \quad \text{т. е.} \quad \mathbf{U}(T)\mathbf{x}_0 = \mathbf{x}_0. \tag{2.3.9}$$

Из формулы (2.3.9) вытекает, что матрица монодромии имеет в этом случае собственное число, равное $+1$.

Система (2.3.4) *обладает периодическим решением с периодом T в том* (*и только в том*) *случае, если матрица монодромии имеет собственное число, равное* $+1$.

Обратимся теперь к вопросу об устойчивости нулевого решения системы (2.3.4). Критерий его устойчивости формулируется с помощью мультипликаторов.

Критерий устойчивости нулевого решения

Пусть $\rho_1, \rho_2, \ldots, \rho_n$ — мультипликаторы системы (2.3.4). Если $|\rho_i| \leqslant 1$, $i = 1, 2, \ldots, n$, то нулевое решение системы (2.3.4) является устойчивым по Ляпунову[1]. Если же $|\rho_i| < 1$, $i = 1, 2, \ldots, n$, то нулевое решение данной системы является асимптотически устойчивым, т. е. для любого решения $\mathbf{x}(t)$ имеет место соотношение

$$\lim_{t \to \infty} \mathbf{x}(t) = 0.$$

2.3.5. Уравнения в вариациях

Рассмотрим снова автономную систему

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \mathbf{R}^n. \tag{2.3.10}$$

[1] Это верно, если среди чисел ρ_j нет совпадающих. — *Прим. ред.*

Пусть $\mathbf{p}(t)$ — решение уравнения (2.3.10), т. е.

$$\dot{\mathbf{p}}(t) = \mathbf{f}(\mathbf{p}(t)).$$

Обозначим через $\mathbf{x}(t)$ близкое к $\mathbf{p}(t)$ решение уравнения (2.3.10). Положим $\mathbf{x}(t) = \mathbf{p}(t) + \mathbf{z}(t)$ и напишем

$$\dot{\mathbf{z}}(t) = \mathbf{f}(\mathbf{p}(t) + \mathbf{z}(t)) - \mathbf{f}(\mathbf{p}(t)). \tag{2.3.11}$$

Оставив в правой части (2.3.11) лишь первый (линейный) член формулы Тейлора, мы получаем для функции $\mathbf{z}(t)$ линейное дифференциальное (неавтономное) уравнение вида

$$\dot{\mathbf{z}}(t) = \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{x}}(\mathbf{p}(t)) \cdot \mathbf{z}(t). \tag{2.3.12}$$

Это уравнение называется уравнением в вариациях для решения $\mathbf{p}(t)$ *системы* (2.3.10) или линеаризацией системы (2.3.10) на решении $\mathbf{p}(t)$.

Замечание. Если $\mathbf{p}(t)$ является стационарным решением (т. е. его траектория $\gamma_p = \{\mathbf{x}_0\}$ представляет собой положение равновесия), то уравнение в вариациях имеет вид

$$\dot{\mathbf{z}}(t) = \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{x}}(\mathbf{x}_0) \cdot \mathbf{z}(t),$$

т. е. представляет собой систему с постоянными коэффициентами.

Важным для нас является случай, когда $\mathbf{p}(t)$ есть периодическое решение системы (2.3.10). Тогда соответствующее уравнение в вариациях (2.3.12) имеет периодическую матрицу $\mathbf{A}(t) = \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{x}}(\mathbf{p}(t))$, и к нему можно применить теорему Флоке.

Мультипликаторы уравнения в вариациях мы называем *мультипликаторами периодического решения* $\mathbf{p}(t)$.

Отметим следующий важный факт: один из мультипликаторов периодического решения всегда равен $+1$. (При этом остальные мультипликаторы отвечают за орбитальную устойчивость решения $\mathbf{p}(t)$.)

Чтобы это доказать, необходимо, в соответствии с п. 2.3.4, установить, что при периодическом $\mathbf{p}(t)$ уравнение в вариациях (2.3.12) всегда имеет периодическое решение.

Итак, пусть

$$\dot{\mathbf{p}}(t) = \mathbf{f}(\mathbf{p}(t))$$

и $\mathbf{p}(t+T) = \mathbf{p}(t)$. Дифференцируя обе части этого тождества, мы приходим к соотношению

$$\frac{d\dot{\mathbf{p}}(t)}{dt} = \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{x}}(\mathbf{p}(t)) \cdot \dot{\mathbf{p}}(t),$$

из которого видно, что функция

$$\mathbf{z}_1(t) = \dot{\mathbf{p}}(t)$$

есть периодическое решение уравнения в вариациях.

Критерий орбитальной устойчивости периодического решения

Пусть $\mathbf{p}(t)$ есть периодическое решение системы (2.3.10) и $\rho_1 = 1, \rho_2, \ldots, \rho_n$ — его мультипликаторы. Если $|\rho_j| < 1$ при $j = 2, \ldots, n$, то решение $\mathbf{p}(t)$ является асимптотически орбитально устойчивым.[5]

Замечание. Из того факта, что мультипликатор $\rho_1 = 1$, и из критерия устойчивости, приведенного в конце п. 2.3.4, следует, что периодическое решение не может быть асимптотически устойчивым по Ляпунову[1]. Поэтому для периодических решений имеет смысл говорить лишь об орбитальной устойчивости.

2.3.6. Заключительные замечания

1. На практике нахождение мультипликаторов периодического решения проводится с помощью численных методов (см. п. 5.8.3).

2. Если мы исследуем периодическое решение 1-параметрической системы дифференциальных уравнений

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(\mathbf{x}, \alpha), \quad \mathbf{x} \in \mathbf{R}^n, \tag{2.3.13}$$

то его мультипликаторы будут функциями параметра α. Предположим, что при $\alpha < \alpha_0$ мультипликаторы $\rho_2(\alpha), \ldots, \rho_n(\alpha)$ лежат внутри единичного круга ($\rho_1(\alpha) \equiv 1$). Это означает, что периодическое решение является орбитально устойчивым.

При изменении параметра потеря устойчивости происходит в том случае, если один из мультипликаторов «покидает» единичный круг. В общем случае это может произойти одним из трех способов:

(1) Один из мультипликаторов «пересекает» единичную окружность в точке $+1$.

(2) Один из мультипликаторов «пересекает» единичную окружность в точке -1.

---

[1] Невозможность асимптотической устойчивости периодического решения $\mathbf{p}(t)$ автономной системы очевидна: малое возмущение, состоящее в замене $\mathbf{p}(0)$ на $\mathbf{p}(\delta)$, приводит к незатухающему эффекту ($\mathbf{p}(t+\delta) - \mathbf{p}(t)$ не стремится к 0). — *Прим. ред.*

(3) Пара комплексно-сопряженных мультипликаторов «пересекает» единичную окружность в точках $e^{\pm i\omega}$, $\omega \neq 2\pi/n$, $n = 1, 2, 3, 4$.

Все эти три возможности изображены на рис. 2.30.

Можно доказать, что в случае (1) происходит бифуркация рождения или исчезновения пары периодических решений

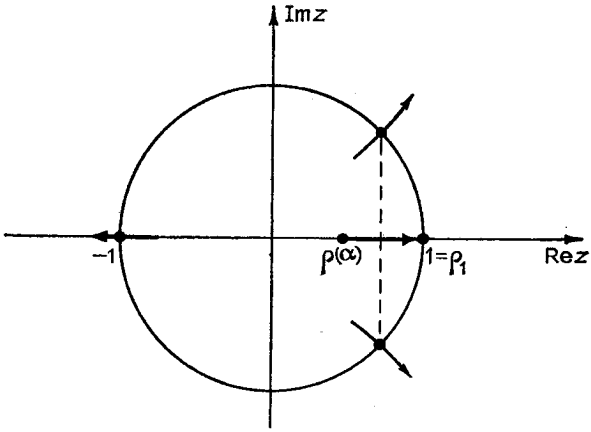


Рис. 2.30. Мультипликаторы в комплексной плоскости как функции параметров.

(см. рис. 2.22). В случае (2) имеет место бифуркация удвоения периода (см. рис. 2.23), а в случае (3) возникает инвариантный тор (см. рис. 2.24).

Замечание. В случае, когда система (2.3.13) обладает некоторой симметрией $\mathbf{g}$ и мы следим за $\mathbf{g}$-симметричным решением, при условии типа (1) может произойти бифуркация с потерей симметрии (см. рис. 2.25).

2.4. ПРЕДЕЛЬНЫЕ МНОЖЕСТВА ТРАЕКТОРИЙ

2.4.1. Гетероклинические и гомоклинические траектории

Под гетероклинической траекторией системы $\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(\mathbf{x})$ мы понимаем траекторию, которая «выходит» из одного состояния равновесия $\mathbf{x}_0$ и «входит» в другое состояние равновесия системы $\mathbf{x}_1$ (см. рис. 2.31). Точнее говоря, если существует точка $\mathbf{z} \in \mathbf{R}^n$, такая, что для решения $\varphi_z(t)$ системы $\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(\mathbf{x})$ имеют

место соотношения

$$\lim_{t\to-\infty} \varphi_z(t) = \mathbf{x}_0 \quad \text{и} \quad \lim_{t\to\infty} \varphi_z(t) = \mathbf{x}_1, \tag{2.4.1}$$

то траектория этого решения называется гетероклинической.

Замечание. На рис. 2.31 изображены три траектории: $\gamma(\mathbf{x}_0) = \{\mathbf{x}_0\}$ — одноточечная, $\gamma(\mathbf{x}_1) = \{\mathbf{x}_1\}$ — также одноточечная и $\gamma(\mathbf{z})$ — гетероклиническая.

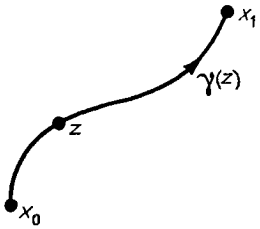


Рис. 2.31. Гетероклиническая траектория.

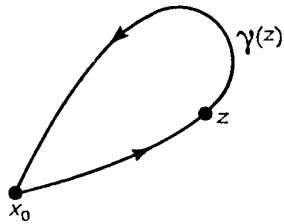


Рис. 2.32. Гомоклиническая траектория.

Гомоклиническая траектория представляет собой траекторию, которая «выходит» и «входит» в одно и то же состояние равновесия $\mathbf{x}_0$ (рис. 2.32). Если $\varphi_z(t)$ — решение, соответствующее этой траектории, то

$$\lim_{t\to-\infty} \varphi_z(t) = \lim_{t\to+\infty} \varphi_z(t) = \mathbf{x}_0. \tag{2.4.2}$$

Объединение гомоклинической траектории $\gamma(\mathbf{z})$ и одноточечной траектории $\{\mathbf{x}_0\}$ дает нам замкнутую кривую, которая называется *гомоклинной петлей.*

2.4.2. Общие траектории

Для описания поведения общей траектории при $t \to \pm\infty$ удобно ввести понятия α- и ω-предельного множества данной траектории.

Определение 2.6. Пусть φ — фазовый поток уравнения $\dot{\mathbf{x}} = f(\mathbf{x})$ и $\gamma(\mathbf{x}_0)$ — его траектория.

(а) Точку $\mathbf{z} \in \mathbf{R}^n$ мы называем ω-предельной точкой траектории $\gamma(\mathbf{x}_0)$, если существует последовательность вещественных чисел $\{t_k\}_{k=1}^{\infty}$, для которой

$$\lim_{k\to+\infty} t_k = +\infty$$

и выполняется соотношение

$$\lim_{k\to+\infty} \varphi(t_k, \mathbf{x}_0) = \mathbf{z}. \tag{2.4.3}$$

Множество всех ω-предельных точек данной траектории γ обозначают $\omega(\gamma)$ и называют *ω-предельным множеством* траектории γ.

(b) Точку $\mathbf{a} \in \mathbf{R}^n$ мы называем α-предельной точкой траектории $\gamma(\mathbf{x}_0)$, если существует последовательность вещественных чисел $\{t_k\}_{k=1}^{\infty}$, для которой

$$\lim_{k\to+\infty} t_k = -\infty$$

и выполняется соотношение

$$\lim_{k\to+\infty} \varphi(t_k, \mathbf{x}_0) = \mathbf{a}. \tag{2.4.4}$$

Множество всех α-предельных точек данной траектории γ мы называем α-предельным множеством траектории γ и обозначаем $\alpha(\gamma)$.

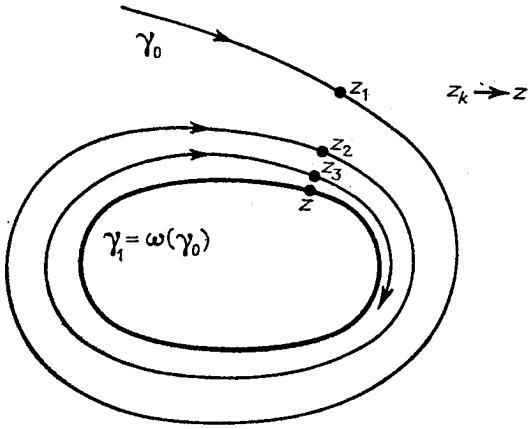


Рис. 2.33.

Замечание. С помощью введенных понятий гетероклиническую траекторию можно определить следующим образом: траектория γ гетероклиническая, если $\alpha(\gamma) = \{\mathbf{x}_0\}$ и $\omega(\gamma) = \{\mathbf{x}_1\}$, где $\mathbf{x}_0$, $\mathbf{x}_1$ $(\mathbf{x}_0 \neq \mathbf{x}_1)$ — положения равновесия системы. Аналогично, траектория γ является гомоклинической, если $\alpha(\gamma) = \omega(\gamma) = \{\mathbf{x}_0\}$.

С помощью α- и ω-предельных множеств можно «визуализировать» асимптотическое поведение решений дифференциальных уравнений (рис. 2.33). Так, например, на рис. 2.33 ω-пре-

дельным множеством траектории γ_0 является замкнутая траектория γ_1, т. е.

$$\omega(\gamma_0) = \gamma_1.$$

2.4.3. Возникновение гомоклинной петли

Механизм возникновения петли можно наблюдать в 1-параметрической двумерной системе дифференциальных уравнений

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(\mathbf{x}, \alpha), \quad \mathbf{x} \in \mathbf{R}^2, \quad \alpha \in [0, \ 1]. \tag{2.4.5}$$

Пусть при $\alpha \in (0, 1]$ система (2.4.5) имеет периодическое решение $\mathbf{p}_\alpha(t)$, траектория которого γ_α при $\alpha \to +0$ «приближается» к состоянию равновесия $\mathbf{x}_0$, представляющему собой седло

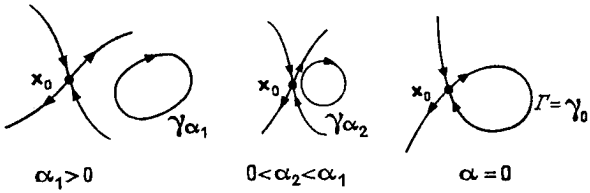


Рис. 2.34. Возникновение гомоклинической петли Г.

(см. рис. 2.34). При $\alpha = 0$ периодическая траектория «превращается» в гомоклинную петлю. Если теперь двигаться по рис. 2.34 справа налево (т. е. увеличивать α от 0), то мы увидим возникновение периодической траектории из гомоклинной петли. Механизм возникновения гомоклинной петли может быть и иным; например, состояние равновесия может возникнуть на замкнутой траектории.

Замечание. В окрестности гомоклинных петель в трехмерном или многомерном фазовом пространстве обычно существуют хаотические инвариантные множества (см. п. 2.5.2).

2.5. ПОКАЗАТЕЛИ ЛЯПУНОВА

Поведение траекторий в окрестности состояния равновесия для уравнения

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \mathbf{R}^n \tag{2.5.1}$$

мы описываем с помощью собственных чисел матрицы линеаризации. Для описания поведения траекторий в окрестности замкнутой траектории служат ее мультипликаторы. Для исследования поведения траекторий в окрестности произвольной

траектории удобно использовать показатели Ляпунова, которые представляют собой аналоги мультипликаторов периодических траекторий.

2.5.1. Основные свойства показателей Ляпунова

Пусть $\Gamma(\mathbf{x}_0)$ — траектория уравнения (2.5.1), соответствующая решению $\mathbf{p}(t) = \varphi_{\mathbf{x}_0}(t)$. Асимптотическое поведение траекторий, лежащих вблизи $\gamma(\mathbf{x}_0)$, определяется поведением фундаментальной матрицы $\mathbf{U}_{\mathbf{x}_0}(t)$ уравнения в вариациях для решения $\mathbf{p}(t)$. Показатели Ляпунова являются инструментом, служащим для описания асимптотического поведения матрицы $\mathbf{U}_{\mathbf{x}_0}(t)$.

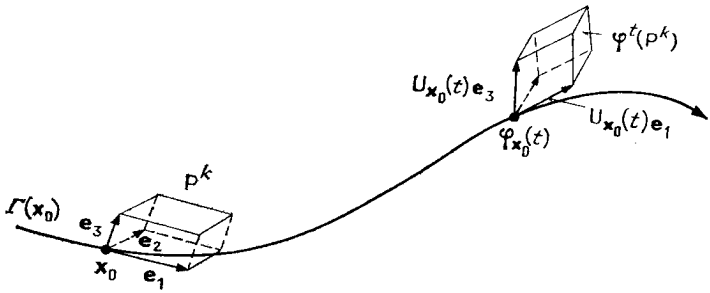


Рис. 2.35. Деформация параллелепипеда P^k при движении вдоль траектории.

Рассмотрим n линейно независимых векторов $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \ldots, \mathbf{b}_n$, выходящих из точки $\mathbf{x}_0$. Выберем из них k векторов ($1 \leqslant k \leqslant n$), которые обозначим как $\mathbf{e}_1 = \mathbf{b}_{i_1}, \mathbf{e}_2 = \mathbf{b}_{i_2}, \ldots, \mathbf{e}_k = \mathbf{b}_{i_k}$. Векторы $\mathbf{e}_1, \ldots, \mathbf{e}_k$ задают в фазовом пространстве $\mathbf{R}^n$ некоторый k-мерный параллелепипед P^k (см. рис. 2.35, где $k = 3$) и определяют натянутое на них k-мерное подпространство $\mathbf{e}^{(k)}$.

Фазовый поток перемещает точку $\mathbf{x}_0$ за время t в точку $\varphi_{\mathbf{x}_0}(t)$; при этом векторы $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \ldots, \mathbf{e}_k$ отображаются на векторы $\mathbf{U}_{\mathbf{x}_0}(t)\mathbf{e}_1, \ldots, \mathbf{U}_{\mathbf{x}_0}(t)\mathbf{e}_k$ [1], которые в свою очередь образуют параллелепипед $\varphi^t(P^k)$. Нас будет интересовать изменение объема параллелепипеда P^k, точнее, отношение объемов $\varphi^t(P^k)$ и P^k. Обозначим объем параллелепипеда P^k через $\|\mathbf{e}_1 \wedge \mathbf{e}_2 \wedge \ldots \wedge \mathbf{e}_k\|$. Этот объем вычисляется следующим образом.

[1] Здесь введено (стандартное) *определение* того, как действует (при каждом t) преобразование φ^t сдвига по траекториям $\mathbf{x} \to \varphi_{\mathbf{x}}(t)$ на векторы, «прикрепленные» в точке $\mathbf{x}_0$. — *Прим. ред.*

Обозначим через $(\mathbf{e}_i, \mathbf{e}_j)$ скалярное произведение векторов $\mathbf{e}_i$ и $\mathbf{e}_j$, $i, j = 1, 2, \ldots, k$. Тогда

$$\|\mathbf{e}_1 \wedge \ldots \wedge \mathbf{e}_k\| = [\det \mathbf{A}]^{1/2},$$

где матрица $\mathbf{A} = (a_{ij})$, $a_{ij} = (\mathbf{e}_i, \mathbf{e}_j)$, $i, j = 1, \ldots, k$. Выражение $\|\mathbf{U}_{\mathbf{x}_0}(t)\,\mathbf{e}_1 \wedge \ldots \wedge \mathbf{U}_{\mathbf{x}_0}(t)\,\mathbf{e}_k\|$ обозначает объем параллелепипеда $\Phi^t(P^k)$.

Определение. Предел (если он существует)

$$\lambda(\mathbf{x}_0, \mathbf{e}^{(k)}) = \lim_{t \to +\infty} \frac{1}{t} \ln \frac{\|\mathbf{U}_{\mathbf{x}_0}(t)\,\mathbf{e}_1 \wedge \ldots \wedge \mathbf{U}_{\mathbf{x}_0}(t)\,\mathbf{e}_k\|}{\|\mathbf{e}_1 \wedge \ldots \wedge \mathbf{e}_k\|} \tag{2.5.2}$$

называется k-мерным показателем Ляпунова траектории $\Gamma(\mathbf{x}_0)$. Этот показатель представляет собой «меру» скорости изменения объема параллелепипеда P^k при его перемещении вдоль траектории $\Gamma(\mathbf{x}_0)$.

Условиями существования предела (2.5.2) мы здесь заниматься не будем [1]. Нетрудно показать, что $\lambda(\mathbf{x}_0, \mathbf{e}^{(k)})$ зависит лишь от подпространства $\mathbf{e}^{(k)}$, а не от конкретного выбора векторов базиса. Наиболее важная информация, касающаяся показателей Ляпунова, содержится в следующей теореме.

Теорема.

1. Одномерные показатели Ляпунова могут иметь не более n различных значений $\lambda_1 \geqslant \lambda_2 \geqslant \lambda_3 \geqslant \ldots \geqslant \lambda_n$.
2. k-мерные показатели Ляпунова могут иметь $\binom{n}{k}$ различных значений, причем каждый из них представляет собой сумму k одномерных показателей Ляпунова.
3. Если линейно независимые векторы $\mathbf{b}_1, \ldots, \mathbf{b}_n$ выбраны случайным образом, то выражение в правой части формулы (2.5.2) с вероятностью 1 сходится [2] к максимальному k-мерному показателю Ляпунова $\lambda_{\max}^{(k)}$.

Замечания

1. Рассмотрим понятие одномерного показателя Ляпунова несколько подробнее. Пусть $\mathbf{e} \in \mathbf{R}^n$. Формула (2.5.2) при $k=1$ принимает вид

$$\lambda(\mathbf{x}_0, \mathbf{e}) = \lim_{t \to \infty} \frac{1}{t} \ln \frac{\|\mathbf{U}_{\mathbf{x}_0}(t)\,\mathbf{e}\|}{\|\mathbf{e}\|}. \tag{2.5.3}$$

---

[1] В исходном определении (А. М. Ляпунова) берется *верхний* предел. — *Прим. ред.*

[2] Это утверждение приобретает точный смысл после разъяснения того, что означает здесь «с вероятностью 1». — *Прим. ред.*

Показатель Ляпунова $\lambda(\mathbf{x}_0, \mathbf{e})$ описывает поведение траекторий, проходящих через точки $\mathbf{x}_0 + \varepsilon\mathbf{e}$, $|\varepsilon| \ll 1$, по отношению к траектории $\Gamma(\mathbf{x}_0)$ (см. рис. 2.36).

Если $\lambda(\mathbf{x}_0, \mathbf{e}) < 0$, то это означает, что указанные траектории приближаются к $\Gamma(\mathbf{x}_0)$ при $t \to +\infty$, а если $\lambda(\mathbf{x}_0, \mathbf{e}) > 0$, то удаляются.[6]

Если в этом случае изменить начальное состояние $\mathbf{x}_0$ на $\mathbf{x}_0 + \varepsilon\mathbf{e}$, $\varepsilon \ll 1$, то разность $\varphi_{\mathbf{x}_0+\varepsilon\mathbf{e}}(t) - \varphi_{\mathbf{x}_0}(t)$ будет расти со временем с экспоненциальной скоростью: поведение динамической системы очень чувствительно к изменению начальных условий.

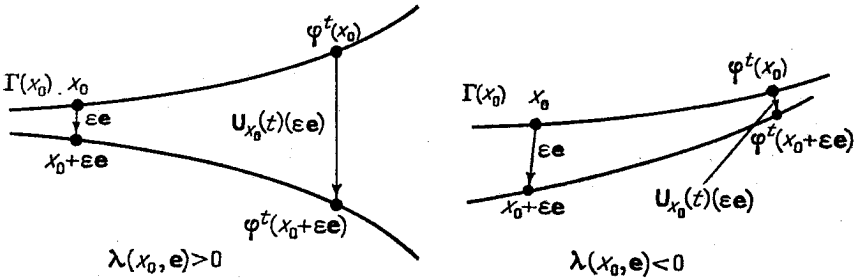


Рис. 2.36. Поведение близких траекторий.

2. Если в формуле (2.5.3) положить $\mathbf{e} = \mathbf{f}(\mathbf{x}_0)$, т. е. выбрать вектор, касательный к $\Gamma(\mathbf{x}_0)$, то вектор $\mathbf{U}_{\mathbf{x}_0}(t)\mathbf{e}$ будет касательным все время: имеет место соотношение $\mathbf{U}_{\mathbf{x}_0}(t)\mathbf{f}(\mathbf{x}_0) = \mathbf{f}(\varphi_{\mathbf{x}_0}(t))$. Если векторное поле $\mathbf{f}(\mathbf{x})$ ограничено ($\|\mathbf{f}(\mathbf{x})\| < K$ для всех $\mathbf{x} \in \mathbf{R}^n$), то из (2.5.3) вытекает, что $\lambda(\mathbf{x}_0, \mathbf{f}(\mathbf{x}_0)) = 0$. (Для того чтобы один одномерный показатель Ляпунова траектории $\Gamma(\mathbf{x}_0)$ был равен нулю, достаточно, чтобы функция $\mathbf{f}(\mathbf{x})$ была ограничена в некоторой окрестности ее ω-предельного множества[1].)

3. Второе утверждение теоремы мы проиллюстрируем на примере траектории в $\mathbf{R}^3$. Согласно п. 1 этой теоремы, существует три одномерных показателя Ляпунова. Согласно п. 2 этой же теоремы, число двумерных показателей Ляпунова равно $\binom{3}{2} = 3$ и их можно найти с помощью одномерных показателей Ляпунова:

$$\lambda_1^{(2)} = \lambda_1 + \lambda_2, \quad \lambda_2^{(2)} = \lambda_1 + \lambda_3, \quad \lambda_3^{(2)} = \lambda_2 + \lambda_3;$$

трехмерный показатель Ляпунова будет всего один:

$$\lambda_1^{(3)} = \lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3.$$

---

[1] Если это множество не состоит из одной точки. — *Прим. ред.*

4. Третий пункт теоремы указывает на возможность вычисления всех одномерных показателей Ляпунова следующим способом. Выберем случайным образом базис $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \ldots, \mathbf{b}_n$ и затем с помощью ЭВМ найдем максимальные k-мерные показатели Ляпунова, $k = 1, 2, \ldots, n$; обозначим их $\lambda_{\max}^{(1)}, \lambda_{\max}^{(2)}, \ldots, \lambda_{\max}^{(n)}$. Тогда все одномерные показатели Ляпунова можно определить с помощью следующих соотношений:

$$\begin{aligned}
\lambda_1 &= \lambda_{\max}^{(1)}, \\
\lambda_2 &= \lambda_{\max}^{(2)} - \lambda_{\max}^{(1)}, \\
\lambda_3 &= \lambda_{\max}^{(3)} - \lambda_{\max}^{(2)}, \\
&\cdots\cdots\cdots \\
\lambda_n &= \lambda_{\max}^{(n)} - \lambda_{\max}^{(n-1)}.
\end{aligned}$$

5. Одномерные показатели Ляпунова $\lambda_j^{(1)}$ для стационарного решения $(\mathbf{p}(t) \equiv \mathbf{x}_0)$ связаны с собственными значениями μ_j матрицы Якоби $\mathbf{J} = \mathbf{f}'(\mathbf{x}_0)$ соотношениями: $\lambda_j = \operatorname{Re} \mu_j$. Показатели $\lambda_j^{(1)}$ для периодического решения $\mathbf{p}(t)$ периода T выражаются через его мультипликаторы μ_j:

$$\lambda_j^{(1)} = \frac{1}{T} \ln |\mu_j|.$$

2.5.2. Инвариантные множества

Множество $\mathbf{M} \subset \mathbf{R}^n$ мы называем инвариантным множеством дифференциального уравнения $\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(\mathbf{x})$, $\mathbf{x} \in \mathbf{R}^n$, если любая его траектория, имеющая хотя бы одну общую точку с множеством $\mathbf{M}$, целиком лежит в множестве $\mathbf{M}$.

С простейшими инвариантными множествами потока $\varphi(t, \mathbf{x})$ мы уже встречались в § 2.1 — это были положения равновесия и замкнутые траектории.

Изучение свойств замкнутых инвариантных множеств проводится с помощью специальных методов, описание которых выходит за рамки данной книги. Ниже мы лишь кратко коснемся этой темы.

Определения

1. Замкнутое инвариантное множество $\mathbf{M}$ потока φ называется устойчивым (по Ляпунову), если для любого $\varepsilon > 0$ существует такое $\delta \in (0, \varepsilon]$, что если $\rho(\mathbf{x}, \mathbf{M}) \leqslant \delta$, то $\rho(\varphi_{\mathbf{x}}(t), \mathbf{M}) \leqslant \varepsilon$ для всех $t \geqslant 0$.

2. Замкнутое инвариантное множество $\mathcal{A}$ мы называем *аттрактором*, если существует открытое множество $\mathbf{U} \supset \mathcal{A}$,

такое, что для всякой точки $\mathbf{x} \in \mathsf{U}$ выполняется требование

$$\rho(\varphi_{\mathbf{x}}(t), \mathscr{A}) \xrightarrow[t \to +\infty]{} 0.$$

При этом множество U называется областью притяжения аттрактора $\mathscr{A}$.

Некоторые авторы требуют дополнительно, чтобы в аттракторе $\mathscr{A}$ существовала траектория γ, которая его плотно заполняет [1]. Простейшими примерами аттракторов могут служить (асимптотически) устойчивые положения равновесия и устойчивые замкнутые траектории. У инвариантных множеств обычно изучают их зависимость от параметров, а также их внутреннюю структуру.

Инвариантное множество M называется *внутренне неустойчивым* (или *хаотическим*), если любая траектория, которая лежит в M, является неустойчивой по Ляпунову и имеет по крайней мере один положительный одномерный показатель Ляпунова, так что траектории, лежащие в M, разбегаются друг от друга с экспоненциальной скоростью. Мы будем требовать, кроме того, чтобы хаотическое множество плотно заполняла бы какая-нибудь траектория системы.

Определенную информацию на интуитивном уровне о ω-предельном множестве данной ограниченной траектории γ дают ее показатели Ляпунова. Так, если все показатели Ляпунова оказываются отрицательными, то можно ожидать, что $\mathsf{M} = \omega(\gamma)$ состоит из одной точки — устойчивого положения равновесия. Размерность такого множества M равна нулю. Если один показатель Ляпунова равен нулю, а остальные отрицательны, то это указывает на наличие одномерного аттрактора, например устойчивого предельного цикла. Существование одного положительного показателя Ляпунова означает наличие двумерного аттрактора, и т. д. [2]

2.5.3. Явление Фейгенбаума

В этом пункте мы опишем один из возможных механизмов возникновения хаотического множества в фазовом пространстве.

Пусть у нас имеется однопараметрическая система дифференциальных уравнений

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(\mathbf{x}, \alpha), \quad \mathbf{x} \in \mathsf{R}^n, \ \alpha \in \mathsf{R}^1. \tag{2.5.4}$$

---

[1] Математики говорят «траектория γ всюду плотна в $\mathscr{A}$».

[2] При наличии положительных показателей размерность M обычно оказывается дробной (см. [8*], [12*]). — *Прим. ред.*

Фейгенбаум впервые отметил следующее явление (см. замечание в конце этого пункта). Пусть при $\alpha < \alpha_1$ система (2.5.4) имеет устойчивое периодическое решение с траекторией γ_α. При $\alpha = \alpha_1$ происходит бифуркация удвоения периода, причем траектория γ_α при $\alpha > \alpha_1$ теряет устойчивость и от нее (при $\alpha > \alpha_1$) ответвляется траектория $\gamma_\alpha^{(2)}$ с двойным периодом. Далее, при $\alpha = \alpha_2$ происходит бифуркация удвоения периода для

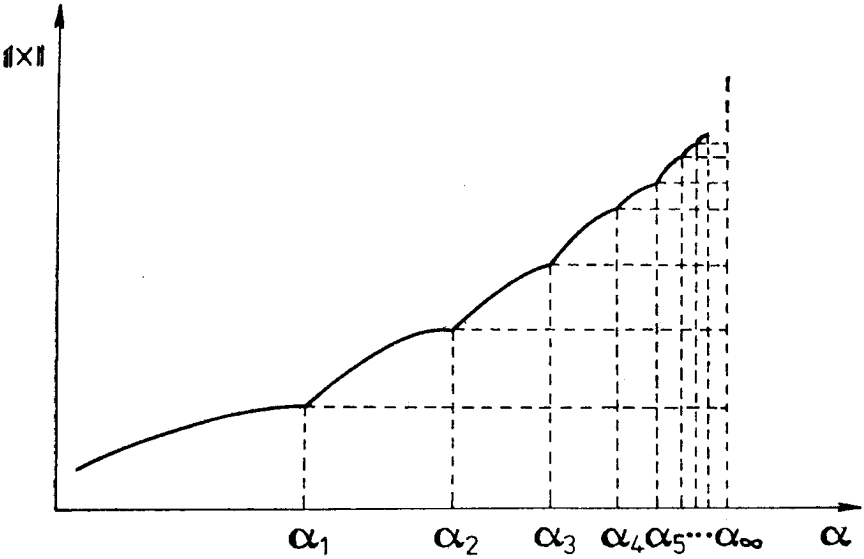


Рис. 2.37. Последовательность бифуркаций удвоения периода.

траектории $\gamma_\alpha^{(2)}$. Затем этот процесс продолжается, и мы получаем бесконечную последовательность значений параметра $\alpha_1, \alpha_2, \ldots$, при которых происходят бифуркации удвоения периода (рис. 2.37).

Фейгенбаум показал, что для последовательности $\{\alpha_j\}_{j=1}^{\infty}$ имеет место соотношение

$$\lim_{j\to\infty} \frac{\alpha_{j+1}-\alpha_j}{\alpha_{j+2}-\alpha_{j+1}} = 4{,}6692016\ldots. \qquad (2.5.5)$$

Число в правой части формулы (2.5.5) представляет собой универсальную постоянную, одинаковую для всех уравнений вида (2.5.4), у которых при увеличении параметра возникает вышеописанный каскад бифуркаций удвоения периода и которые удовлетворяют еще некоторым дополнительным условиям. Из

формулы (2.5.5) вытекает существование конечного предела вида

$$\lim_{j\to\infty} \alpha_j = \alpha_\infty. \tag{2.5.6}$$

В результате описанного каскада бифуркаций возникает хаотическое множество, поскольку при $\alpha \to \alpha_\infty$ в некоторой области фазового пространства возникает бесконечно много неустойчивых периодических траекторий. Между этими траекториями «блуждают» остальные траектории, которые вместе с первыми образуют хаотическое инвариантное множество системы (2.5.4).

Замечание. Строго говоря, описанное явление было обнаружено Фейгенбаумом при исследовании поведения неподвижных точек итераций f_α^n одномерного отображения f_α: $[0, 1] \to [0, 1]$ (например, $f_\alpha(x) = \alpha x(1-x)$) в зависимости от изменения параметра α.

С помощью отображения Пуанкаре бифуркационные процессы для отображения $\mathbf{f}_\alpha$ можно переформулировать для уравнения (2.5.4). При этом отображение $\mathbf{f}_\alpha$ можно рассматривать как проекцию отображения Пуанкаре на некоторую координатную ось в сечении Σ.

Указанный переход от описания явлений бифуркации для неподвижных точек итераций $\mathbf{f}^n$ к описанию бифуркационных процессов для фазового потока в окрестности замкнутой траектории с математической точки зрения не является строгим; скорее речь идет здесь об эвристических рассуждениях. С другой стороны, имеется много численных экспериментов, которые указывают на существование описанного выше каскада бифуркаций удвоения периода и определенную закономерность в поведении последовательности α_j (см. § 5.8).

2.6. ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ С ЧАСТНЫМИ ПРОИЗВОДНЫМИ

В гл. 6 будут описаны численные методы, используемые для нахождения точек бифуркации стационарных решений дифференциальных уравнений с частными производными (УЧП) параболического типа и, в частности, уравнений типа «реакция — диффузия».

Последующее изложение призвано облегчить понимание этих бифуркационных явлений. Мы покажем, как можно перенести некоторые методы теории ОДУ на уравнения с частными производными параболического типа. Ради простоты мы огра-

ничимся рассмотрением одного уравнения вида

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D\frac{\partial^2 u}{\partial z^2} + f(u), \tag{2.6.1}$$

где $u = u(z, t)$ есть функция времени t и одной пространственной переменной z.

Рассмотрим, в частности, трубчатый (цилиндрический) реактор, учитывая из его размеров только длину (т. е. пренебрегая зависимостью всех величин от радиальной координаты r и угловой θ. — *Ред.*). Если уравнение (2.6.1) описывает процессы в таком реакторе, то функцию $u(z, t)$ можно интерпретировать как концентрацию некого вещества в момент t в сечении с координатой z (рис. 2.38).

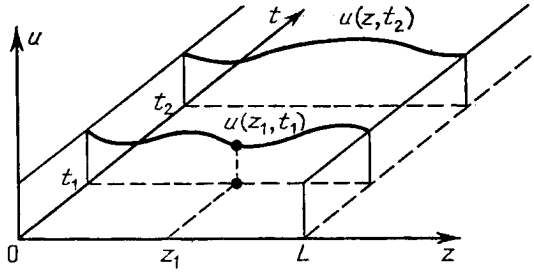


Рис. 2.38. Профили концентрации.

Пусть общая длина реактора равна L. Тогда при фиксированном t функция $u(z, t)$ представляет собой функцию переменной z, определенную на промежутке $[0, L]$. График этой функции мы называем профилем концентрации в момент t. Изменение профилей концентрации в зависимости от времени описывает временну́ю эволюцию данной системы.

Обычно для уравнения (2.6.1) задаются граничные и начальные условия. Начальное условие имеет вид

$$u(z, 0) = \varphi(z), \quad z \in [0, L]; \tag{2.6.2}$$

оно задает распределение концентрации в момент времени $t = 0$. Граничные условия для уравнения (2.6.1) будут рассмотрены в следующем пункте.

2.6.1. Фазовое пространство уравнения (2.6.1)

В первых пяти параграфах этой главы мы рассматривали системы, состояние которых в данный момент времени t можно описать с помощью набора n чисел $\mathbf{x}(t) = (x_1(t), \ldots$

..., $x_n(t)$). Фазовым пространством такой системы является пространство $\mathbf{R}^n$ или его часть, а эволюцию системы во времени можно описать движением фазовой точки по соответствующей траектории.

В случае упомянутого выше трубчатого реактора состояние системы в момент времени t описывается функцией, заданной на промежутке $[0, L]$.

Следовательно, фазовым пространством уравнения (2.6.1) является пространство функций, определенных на промежутке $[0, L]$, или его часть. «Точки» этого фазового пространства суть функции.

Функцию $u(z, t)$ двух переменных z, t можно рассматривать как отображение, которое каждому $t \geqslant 0$ ставит в соответствие функцию $u^t(\cdot) = u(\cdot, t)$ переменной z. Тем самым мы получаем некоторую кривую в подходящем образом выбранном пространстве функций. Эту кривую можно назвать траекторией уравнения (2.6.1). Введенное выше пространство функций в дальнейшем мы будем обозначать символом E. При этом правую часть уравнения (2.6.1) можно рассматривать как оператор на пространстве E, т. е. отображение $\mathbf{F}\colon \mathsf{E} \to \mathsf{E}$.

Пример. Положим в уравнении (2.6.1) $f(u) = u(1 - u^2)$, $D = 1$. Тогда правая часть (2.6.1) ставит в соответствие, например, функции $u(z) = \sin \pi z$ функцию

$$\mathbf{F}(u(z)) = (\sin \pi z)'' + \sin \pi z (1 - \sin^2 \pi z) = \\ = -\pi^2 \sin \pi z + \sin \pi z \cdot \cos^2 \pi z.$$

Если рассматривать функцию $u(z, t)$ как кривую в пространстве E, т. е. как отображение $t \to u^t$ $(u^t(z) = u(z, t))$, то частную производную $\frac{\partial u}{\partial t}(z, t)$ можно представить следующим образом:

$$\frac{\partial u}{\partial t}(z, t) = \lim_{h \to 0} \frac{u(z, t+h) - u(z, t)}{h} = \\ = \lim_{h \to 0} \frac{u^{t+h}(z) - u^t(z)}{h} = \frac{du^t(z)}{dt},$$

т. е. как вектор, касательный к кривой $t \to u^t$.

Уравнение с частными производными (2.6.2) можно теперь записать в виде обыкновенного дифференциального уравнения

$$\frac{du^t}{dt} = \mathbf{F}(u^t), \tag{2.6.3}$$

фазовым пространством которого является бесконечномерное функциональное пространство E.

Для уравнения (2.6.3) (а тем самым и для уравнения (2.6.1)) можно использовать большинство результатов, представленных в §§ 2.1—2.5.

Если к уравнению (2.6.1) добавлены граничные условия, например условия вида

$$u(0,\ t)=u(L,\ t)=0 \tag{2.6.4}$$

для любых $t \geqslant 0$, то вместо пространства E мы должны взять подпространство

$$\mathsf{D}_0^L=\{u \in \mathsf{E},\quad u(0)=u(L)=0\}.$$

Это подпространство будет фазовым пространством уравнения (2.6.3), т. е. уравнения (2.6.1) при условиях (2.6.4).

2.6.2. Устойчивость стационарного решения

Если решение $u=u(z, t)$ уравнения (2.6.1) не зависит от времени, то мы называем его *стационарным решением*. Профили концентрации стационарного решения не зависят от времени.

Стационарному решению $u_0(z)$ уравнения (2.6.1) отвечает состояние равновесия уравнения (2.6.3): для него выполняется условие

$$\mathbf{F}(u_0)=0. \tag{2.6.5}$$

Соотношение (2.6.5) представляет собой обыкновенное дифференциальное уравнение $Du_0''+f(u_0)=0$.

Пример 2.10. Рассмотрим дифференциальное уравнение

$$\frac{\partial u}{\partial t}=\frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \tag{2.6.6}$$

с граничными условиями вида

$$u(0,\ t)=u(\pi,\ t)=0. \tag{2.6.7}$$

Стационарными решениями уравнения (2.6.6) являются решения обыкновенного дифференциального уравнения

$$u''(z)=0, \tag{2.6.8}$$

т. е. функции вида $u(z)=az+b$, где a, b суть произвольные постоянные. Из этих функций мы должны выбрать те, которые удовлетворяют граничным условиям (2.6.7), т. е. условиям $u(0)=u(\pi)=0$. Отсюда $a=b=0$: единственным стационарным решением уравнения (2.6.6), которое удовлетворяет условиям (2.6.7), является функция $u(z) \equiv 0$.

Обратимся теперь к вопросу *устойчивости стационарных решений дифференциальных уравнений в частных производных.* В абстрактной записи (2.6.3) речь идет об устойчивости положений равновесия уравнения (2.6.3). Это означает, что стационарное решение $u_0(z)$ уравнения (2.6.1) является устойчивым лишь в том случае, если для всякого решения $u(z, t)$ уравнения (2.6.1) с начальным условием $u(z, 0) = \varphi(z)$, где функция $\varphi(z)$ достаточно близка к функции $u_0(z)$ в пространстве D_0^L, оказывается выполненным соотношение

$$\lim_{t \to \infty} u(z, t) = u_0(z) \tag{2.6.9}$$

для любых $z \in [0, L]$ [1].

Иными словами, профили концентрации решения $u(z, t)$ «сходятся» при $t \to +\infty$ к графику стационарного решения $u_0(z)$.

Устойчивость положений равновесия уравнения (2.6.3) можно определять так же, как и для обыкновенных дифференциальных уравнений. Именно, мы находим собственные числа линеаризованного уравнения, и если эти собственные числа располагаются слева от мнимой оси, то соответствующее состояние равновесия устойчиво. Этот подход продемонстрируем на примере.

Пример 2.10 (*продолжение*). Оператор $\mathbf{F}(u) = d^2u/dz^2$ в правой части уравнения (2.6.6) является линейным и можно непосредственно найти его собственные числа. Напомним, что число $\lambda \in \mathbf{C}$ является собственным числом линейного оператора $\mathbf{F}$, если существует *не равная нулю* функция $u \in \mathbf{D}_0^\pi$, для которой выполняется соотношение $\mathbf{F}(u) = \lambda u$, т. е. функция $u(z)$ представляет собой решение обыкновенного дифференциального уравнения

$$u'' - \lambda u = 0 \tag{2.6.10}$$

с граничными условиями вида

$$u(0) = u(\pi) = 0.$$

Оператор $\mathbf{F}$ имеет в данном случае только вещественные собственные числа. При $\lambda \geqslant 0$ решение уравнения (2.6.10) записывается в виде

$$u(z) = c_1 e^{\sqrt{\lambda} z} + c_2 e^{-\sqrt{\lambda} z}, \quad c_1, c_2 \in \mathbf{R}.$$

---

[1] После уточнения смысла предельного перехода в (2.6.9) (введения нормы или расстояния в пространство $\mathbf{D}_0^L$) сказанное близко к определению асимптотической устойчивости (см., например, [2.8]). — *Прим. ред.*

Поскольку должны выполняться условия $u(0)=u(\pi)=0$, то $c_1=c_2=0$ и, следовательно, функция тождественно равна нулю. Таким образом, оператор $\mathbf{F}(u)=d^2u/dz^2$ на пространстве $\mathbf{D}_0^\pi$ не имеет неотрицательных собственных чисел.

При $\lambda<0$ решением уравнения (2.6.10) является функция

$$u(z)=c_1\cos\sqrt{|\lambda|}\,z+c_2\sin\sqrt{|\lambda|}\,z.$$

Из условий $u(0)=u(\pi)=0$ следует, что $\sqrt{|\lambda|}=k$, т. е. что значения

$$\lambda_k=-k^2,\quad k=1,\ 2,\ \ldots$$

суть собственные числа нашего оператора.

Итак, все собственные числа располагаются слева от мнимой оси, и, следовательно, стационарное решение $u(z)\equiv 0$ уравнения (2.6.6) устойчиво.

2.6.3. Периодические решения уравнения (2.6.1). Бифуркация Андронова — Хопфа для уравнений с частными производными

Решение $u(z,t)$ уравнения с частными производными (2.6.1), удовлетворяющее условию

$$u(z,\ t+T)=u(z,\ t) \tag{2.6.11}$$

при любом $t\geqslant 0$ и $z\in[0,L]$, мы называем периодическим; число $T>0$ есть период этого решения. Периодическому решению уравнения (2.6.1) отвечает замкнутая траектория уравнения (2.6.3) в фазовом пространстве $\mathbf{D}_0^L$ (см. п. 2.6.1).

Положения равновесия уравнения (2.6.3) могут претерпевать бифуркации точно так же, как и положения равновесия обыкновенных дифференциальных уравнений. В частности, в случае бифуркации Андронова—Хопфа от положения равновесия уравнения (2.6.3) ответвляется замкнутая траектория; это означает, что от стационарного решения уравнения (2.6.1) ответвляется периодическое решение этого уравнения. Условия возникновения бифуркации Андронова — Хопфа для уравнений с частными производными аналогичны соответствующим условиям для ОДУ (см. § 2.3).

Рассмотрим однопараметрическое уравнение типа (2.6.3), которое мы запишем в виде

$$\frac{du^t}{dt}=\mathbf{F}(u^t,\ \alpha).$$

Если взаимно сопряженные комплексные собственные числа оператора[1] $\mathbf{A} = d\mathbf{F}(u_0, \alpha)$ пересекают мнимую ось в точках $\pm i\omega$, то в этом случае от стационарного решения u_0 соответствующего уравнения с частными производными ответвляется периодическое решение, причем период этого решения асимптотически (при приближении α к критическому значению α^*) равен $T = 2\pi/\omega$.

2.6.4. Волновые решения уравнений с частными производными

Попытаемся выяснить принципиальные особенности волновых решений на том же примере одного дифференциального уравнения

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D\frac{\partial^2 u}{\partial z^2} + f(u) \tag{2.6.12}$$

без граничных условий (рассматривая его при $t \geqslant 0$ и $z \in \in (-\infty, +\infty)$).

Решение $u(z, t)$ будем искать в виде

$$u(z, t) = \varphi(z - ct) = \varphi(\xi). \tag{2.6.13}$$

Подставляя выражение (2.6.13) в уравнение (2.6.12), мы получаем для $\varphi(\xi)$ обыкновенное дифференциальное уравнение 2-го порядка

$$-c\varphi' = D\varphi'' + f(\varphi), \quad ' = \frac{d}{d\xi}. \tag{2.6.14}$$

Перепишем уравнение (2.6.14) в виде системы двух уравнений, положив $x_1 = \varphi$, $x_2 = \varphi'$:

$$\begin{cases} x_1' = x_2, \\ x_2' = -\dfrac{c}{D}x_2 - f(x_1). \end{cases} \tag{2.6.15}$$

Фазовым пространством системы (2.6.15) является плоскость x_1, x_2.

---

[1] Здесь $dv^t/dt = \mathbf{A}v^t$ — линеаризованное уравнение.

А) Волновое решение типа импульса

Предположим, что система (2.6.15) при некотором значении параметра c обладает гомоклинической траекторией, «выходящей» из точки (0, 0) (рис. 2.39) [1].

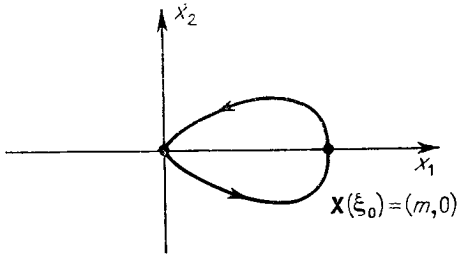


Рис. 2.39. Гомоклиническая траектория системы (2.6.15).

Решение $\mathbf{x}(\xi)=(x_1(\xi),\ x_2(\xi))$, соответствующее этой траектории, удовлетворяет условию

$$\lim_{\xi\to\pm\infty} \mathbf{x}(\xi)=\mathbf{0}. \tag{2.6.16}$$

График функции $x_1(\xi)=\varphi(\xi)$ представлен на рис. 2.40. График функции $u(z,t)=\varphi(\xi)=\varphi(z-ct)$ как функции переменной z

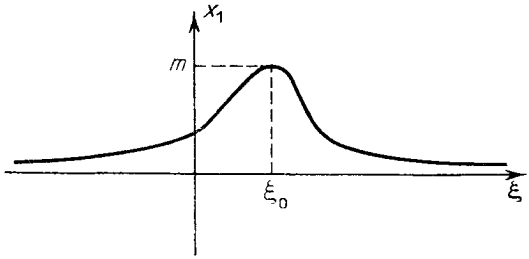


Рис. 2.40. Решение $x_1(\xi)$, соответствующее гомоклинической траектории.

перемещается со скоростью c вдоль оси z, причем при $c>0$ он движется вправо, а при $c<0$ влево (рис. 2.41). Решение уравнения с частными производными (2.6.12) с таким поведением называется волновым решением *типа импульса*, или бегущей волной типа импульса.

---

[1] Для этого необходимо, чтобы точка (0, 0) была положением равновесия, т. е. чтобы $f(0)=0$. Для исходного уравнения (2.6.12) это означает: $u(z,t)\equiv 0$ есть решение. Точка (0, 0) для системы (2.6.15) будет (невырожденным) седлом, если $f'(0)<0$. Для исходного уравнения (2.6.12) это означает: «состояние покоя» устойчиво. — *Прим. ред.*

В) Волновое решение типа фронта

Если система (2.6.15) при некотором c обладает гетероклинической траекторией (рис. 2.42), выходящей из состояния рав-

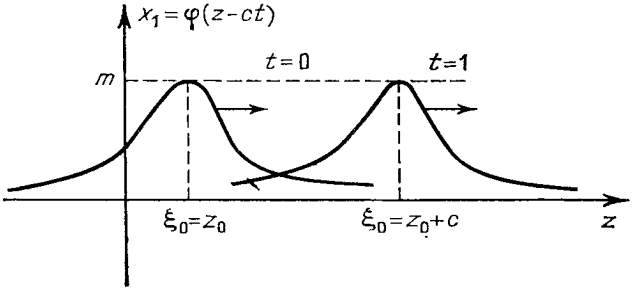


Рис. 2.41. Волновое решение типа импульса.

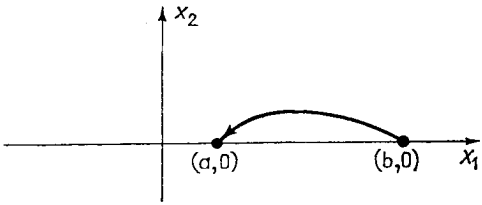


Рис. 2.42. Гетероклиническая траектория системы (2.6.15).

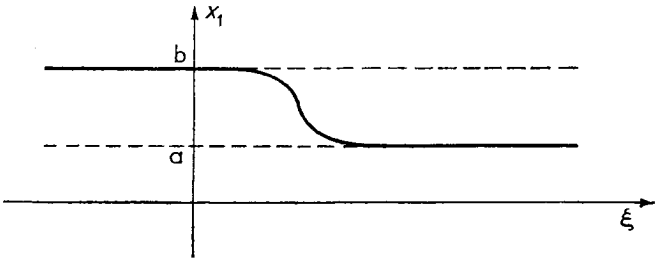


Рис. 2.43. Решение $x_1(\xi)$, соответствующее гетероклинической траектории

новесия $\mathbf{x}^{(0)}=(b,0)$ и заканчивающейся в состоянии равновесия $\mathbf{x}^{(1)}=(a,0)$, то решение $\mathbf{x}(\xi)=(x_1(\xi),x_2(\xi))$, отвечающее этой траектории, удовлетворяет соотношениям

$$\lim_{\xi\to-\infty}\mathbf{x}(\xi)=\mathbf{x}^{(0)},\quad \lim_{\xi\to+\infty}\mathbf{x}(\xi)=\mathbf{x}^{(1)}.$$

Таким образом, для функции $x_1=\varphi(\xi)$ будут выполняться следующие условия:

$$\lim_{\xi\to-\infty}\varphi(\xi)=b,\quad \lim_{\xi\to+\infty}\varphi(\xi)=a. \tag{2.6.17}$$

График функции $x_1 = \varphi(\xi)$ имеет вид, изображенный на рис. 2.43. Положив $u = \varphi(z - ct)$, мы получаем бегущую волну «*типа фронта*», перемещающуюся вдоль оси z со скоростью c [1].

ЛИТЕРАТУРА

[2.1] Nagy J.: Soustavy obyčejných differenciálnich rovnic, SNTL, Praha, 1980.

[2.2] Степанов В. В. Курс дифференциальных уравнений. — М.: Гостехиздат, 1953. — 468 с.

[2.3] Матвеев Н. М. Дифференциальные уравнения. — Минск: Высшая школа, 1968.

[2.4] Понтрягин Л. С. Обыкновенные дифференциальные уравнения. — М.: Наука, 1974.

[2.5] Kurzweil J.: Obyčejné differenciální rovnice, SNTL, Praha, 1978.

[2.6] Hartman P.: Ordinary Differential Equations. J. Wiley, New York, 1964.

[2.7] Coddington E. A., Levinson N.: Theory of Ordinary Differential Equations, McGraw—Hill, New York, 1955. Имеется перевод: Коддингтон Э., Левинсон Н. Теория обыкновенных дифференциальных уравнений. — М.: ИЛ, 1958.

[2.8] Арнольд В. И. Обыкновенные дифференциальные уравнения. — М.: Наука, 1975.

[2.9] Арнольд В. И. Дополнительные главы теории обыкновенных дифференциальных уравнений. — М.: Наука, 1979.

[2.10] Brunovský P.: Pokroky mat. fyz. astr. 18 (1973), 271.

[2.11] Brunovský P., Medveď M.: Pokroky mat. fyz. astr. 27 (1982) 74.

[2.12] Irwin M. C.: Smooth Dynamical Systems. Academic Press, London, 1980.

[2.13] Borůvka O.: Základy teorie matic. Academia, Praha, 1971.

[2.14] Schmidtmayer J.: Maticový počet a jeho použití v technice. SNTL, Traha, 1967.

[2.15] Гантмахер Ф. Р. Теория матриц. — М.: Наука, 1966.

[2.16] Carr J.: Applications of Centre Manifold Theory. Springer, New York, 1981.

[2.17] Marsden J. E., McCracken M.: The Hopf Bifurcation and its Applications. Springer, New York, 1976. Имеется перевод: Марсден Дж., Мак-Кракен М. Бифуркация рождения цикла и ее приложения. — М.: Мир, 1980.

[2.18] Шошитайшвили А. Н. Труды семинара им. И. Г. Петровского *1* (1975).

[2.19] Abraham R., Robbin J.: Transversal Mappings and Flows. W. A. Benjamin, Inc., New York, 1967.

[2.20] Арнольд В. И. Успехи мат. наук 28, 5 (1972), с. 119.

[2.21] Богданов Р. И. Труды семинара им. И. Г. Петровского, *2* (1976), с. 23—37.

[2.22] Gottschalk W., Hedlund G. A.: Topological Dynamics, AMS Colloquium publications, V. 36, Providence, R. I. 1955.

[2.23] Iooss G.: Bifurcation of Maps and Applications. North-Holland Publ. Comp., Amsterdam, 1979.

[2.24] Nitecki Z.: Differentiable Dynamics, MIT Press, Cambridge, Massachusetts and London, England, 1971. [Имеется перевод: Нитецки З. Введение в дифференциальную динамику. — М.: Мир, 1975.]

[2.25] Brunovský P.: Commun. Math. Univ. Carolinae 11 (1970), 22 (1971).

[1] Здесь $f(a) = f(b) = 0$, т. е. имеются пространственно однородные стационарные состояния $u(z, t) \equiv a$ и $u(z, t) \equiv b$. — *Прим. ред.*

[2.26] Странные аттракторы. Сборник переводов под редакцией Я. Г. Синая и Л. П. Шильникова. — М.: Мир, 1981.
[2.27] Оселедец В. И. Труды Московского математического общества 19 (1968), с. 179.
[2.28] Былов Б. Ф. и др. Теория показателей Ляпунова и ее приложения к вопросам устойчивости. — М.: Наука, 1966.
[2.29] Немыцкий В. В., Степанов В. В. Качественная теория дифференциальных уравнений. — М.: Гостехиздат, 1949.
[2.30] Шильников Л. П. Теория бифуркаций и модель Лоренца. Дополнение II в русском переводе [2.17].
[2.31] Smale S.: Bull. AMS 73 (1967), 747.
[2.32] Henry D.: Geometric Theory of Semilinear Parabolic Equations. Lect. Notes in Math. 840, Springer, Berlin, 1981.
[2.33] Satttinger D. H.: Group Theoretic Methods in Bifurcation Theory. Lect. Notes in Math. 762. Springer, Berlin 1979.
[2.34] Ruelle D.: Arch. Rat. Mech. An. 51 (1973), 136.
[2.35] Sikorski R.: Rachunek rózniczkowy i calkowy. PWN, Warszawa, 1969.
[2.36] Jarník V.: Differenciální počet II. Academia, Praha, 1984.
[2.37] Nirenberg L.: Topics in Nonlinear Functional Analysis, Courant Inst. of Math. Sci., New York, 1973. [Имеется перевод: Ниренберг Л. Лекции по нелинейному функциональному анализу. — М.: Мир, 1977.]
[2.38] Колмогоров А. Н., Фомин С. В. Элементы теории функций и функционального анализа. — М.: Наука, 1968. — 496 с.
[2.39] Kato T.: Perturbed Linear Operators, Springer, Berlin, 1980. [Имеется перевод предыдущего издания: Като Т. Теория возмущений линейных операторов. — М.: Мир, 1972.]
[2.40] Taylor A. E.: Introduction to Functional Analysis. J. Wiley, New York, 1958.
[2.41] Klíč A.: Aplikace matematiky 28 (1983), 335.
[2.42] Guckenheimer J.: Multiple Bifurcation Problems of Codimension Two. Preprint University of California, Santa Cruz, 1979.
[2.43] Collet P., Eckman J. P.: Iterated Maps on the Interval as Dynamical Systems. Birkhauser, Boston, 1980.
[2.44] Nagy J.: Vybrané partie z moderni matematiky. SNTL, Praha, 1976.
[2.45] Спивак М. Математический анализ на многообразиях. — М.: Мир, 1968.
[2.46] Nagy J.: Stabilita řešení obyčejných differenciálních rovnic SNTL, Praha, 1980.
[2.47] Шильников Л. П. Математический сборник, т. 81(123), № 1, с. 92.

Глава 3

ВЕТВЛЕНИЕ СОСТОЯНИЙ РАВНОВЕСИЯ НА ДИАГРАММЕ РЕШЕНИЙ

В предыдущей главе мы сделали попытку познакомить читателя с основными понятиями теории динамических систем, а также со связанными с ними явлениями бифуркаций.

В этой главе мы рассмотрим методы, позволяющие исследовать поведение стационарных решений систем дифференциальных уравнений в зависимости от параметра в окрестности точек ветвления. Такого рода анализ тесно связан с построением так называемой диаграммы решений, которое приходится проводить численно. При этом сами численные алгоритмы рассматриваются в гл. 5. [7]

3.1. ДИАГРАММА СТАЦИОНАРНЫХ РЕШЕНИЙ

Анализ стационарных решений (состояний равновесия) однопараметрических семейств дифференциальных уравнений приводит к необходимости исследования множества решений следующей системы:

$$\begin{aligned} f_1(x_1, x_2, \ldots, x_n, \alpha) &= 0, \\ f_2(x_1, x_2, \ldots, x_n, \alpha) &= 0, \\ \cdots\cdots\cdots\cdots \\ f_n(x_1, x_2, \ldots, x_n, \alpha) &= 0. \end{aligned} \tag{3.1.1}$$

В дальнейшем мы будем предполагать, что функции $f_i(x_1, \ldots, x_n, \alpha)$, $i = 1, 2, \ldots, n$, достаточно гладкие, α — вещественный параметр, а $x_1, x_2, \ldots, x_n$ — неизвестные. Систему (3.1.1) можно кратко записать в виде

$$\begin{gathered} \mathbf{f}(\mathbf{x}, \alpha) = \mathbf{0}, \\ \mathbf{x} \in \mathrm{R}^n, \quad \alpha \in \mathrm{R}^1. \end{gathered} \tag{3.1.2}$$

Множество всех решений системы (3.1.1) обозначим $\mathbf{S}(\mathbf{f})$:

$$\mathbf{S}(\mathbf{f}) = \{(\mathbf{x}, \alpha) \in \mathbf{R}^n \times \mathbf{R}^1, \quad \mathbf{f}(\mathbf{x}, \alpha) = 0\}. \tag{3.1.3}$$

Множество $\mathbf{S}(\mathbf{f})$ обычно представляет собой объединение нескольких кривых в $\mathbf{R}^{n+1}$, хотя может включать в себя и отдельные изолированные точки (рис. 3.1).

При $n > 1$ множество $\mathbf{S}(\mathbf{f})$ удобно изображать на двумерной плоскости. Такое двумерное представление множества $\mathbf{S}(\mathbf{f})$ мы будем называть *диаграммой стационарных решений*. При этом мы обыкновенно проектируем множество $\mathbf{S}(\mathbf{f})$ на выбранную

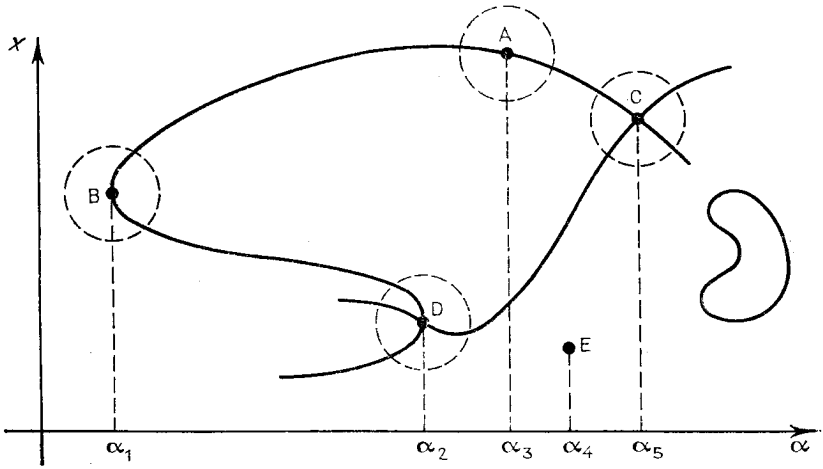


Рис. 3.1. Множество $\mathbf{S}(\mathbf{f})$.

плоскость $x_i - \alpha$. При проектировании может оказаться, что на двумерной картинке имеет место пересечение кривых, хотя на самом деле в $\mathbf{R}^{n+1}$ эти кривые не пересекаются.

Точки фактического и кажущегося пересечения кривых из $\mathbf{S}(\mathbf{f})$ на диаграмме решений мы можем различать способом, показанным на рис. 3.2*a*, *b*. В дальнейшем последовательных различий между множеством $\mathbf{S}(\mathbf{f})$ и диаграммой стационарных решений проводиться не будет; из контекста всегда будет ясно, какой из этих объектов имеется в виду.

Дадим теперь формальную классификацию точек множества $\mathbf{S}(\mathbf{f})$, начав со случая $n = 1$. В этом случае множество решений $\mathbf{S}(f)$ можно изобразить на плоскости $x - \alpha$ (рис. 3.1).

1. Предположим, что $(x_0, \alpha_0) \in \mathbf{S}(f)$ и пусть

$$\frac{\partial f}{\partial x}(x_0, \alpha_0) \neq 0. \tag{3.1.4}$$

Тогда согласно теореме о неявных функциях существуют $\varepsilon > 0$ и единственная функция $g(\alpha)$ $(g(\alpha_0) = x_0)$, такая что $f(g(\alpha), \alpha) = 0$ для всех $\alpha \in (\alpha_0 - \varepsilon, \alpha_0 + \varepsilon)$. При этом множество $S(f)$ в окрестности точки (x_0, α_0) задается графиком функции g.

Точку $(x_0, \alpha_0) \in S(f)$, для которой выполнено условие (3.1.4), мы называем *регулярной точкой*. Как видно из рисунка, «большинство» точек кривой принадлежат именно к этому типу.

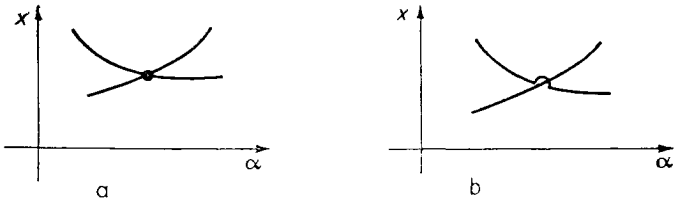


Рис. 3.2. Точки пересечения на диаграмме решений.

2. Пусть теперь в точке $(x_0, \alpha_0) \in S(f)$

$$\frac{\partial f}{\partial x}(x_0, \alpha_0) = 0. \tag{3.1.5}$$

В данном случае мы не можем воспользоваться теоремой о неявных функциях. Однако если

$$\frac{\partial f}{\partial \alpha}(x_0, \alpha_0) \neq 0, \tag{3.1.6}$$

то, поменяв x и α местами, можно построить в окрестности точки (x_0, α_0) функциональную зависимость $\alpha = \alpha(x)$, $\alpha_0 = \alpha_0(x_0)$. Из соотношения (3.1.5) следует, что $\alpha'(x_0) = 0$. На рис. 3.1 такой точкой является точка B.

Точку $(x_0, \alpha_0) \in S(f)$, в которой одновременно выполняются условия (3.1.5) и (3.1.6), а производная $d\alpha/dx$ меняет знак[1], мы называем (простой) *точкой поворота*. [8]

При переходе α через значение α_0 происходит бифуркация: появляется или исчезает пара решений. Значение α_0 мы называем *бифуркационным значением параметра*.

3. Если в точке $(x_0, \alpha_0) \in S(f)$

$$\frac{\partial f}{\partial x}(x_0, \alpha_0) = \frac{\partial f}{\partial \alpha}(x_0, \alpha_0) = 0, \tag{3.1.7}$$

то точка (x_0, α_0) называется *сингулярной точкой множества* $S(f)$. Обозначим через $\sigma(f)$ множество всех точек поворота и

[1] Чтобы производная $\alpha'(x)$ меняла знак в этой точке, достаточно выполнения условия $(\partial^2 f/\partial x^2)(x_0, \alpha_0) \neq 0$.

сингулярных точек множества $S(f)$. Точки множества $\sigma(f)$ мы называем *критическими* точками $S(f)$. Критические точки разбивают множество $S(f)$ на *ветви стационарных решений*[1]. Каждая ветвь состоит из регулярных точек и определяет однозначную зависимость $x(\alpha)$.

Во всякой точке поворота заканчиваются две ветви решения. В особой точке могут оканчиваться несколько ветвей (в точке C на рис. 3.1 — четыре).

Замечание. Множество $S(f)$ в общем случае состоит из нескольких «кусков» — компонент связности (на рис. 3.1 их три).

Может случиться, что какая-либо компонента $\mathscr{P}$ представляет собой замкнутую кривую, не имеющую самопересечений. Такую компоненту множества $S(f)$ мы будем называть *изолой*. Изола состоит из двух (или более) ветвей, разделенных точками поворота.

3.2. ВЕТВЛЕНИЕ В ТОЧКАХ БИФУРКАЦИИ. ОДНОМЕРНЫЙ СЛУЧАЙ

Рассмотрим уравнение

$$f(x, \alpha) = 0, \quad x \in \mathrm{R}^1. \tag{3.2.1}$$

Далее, пусть $(x^*, \alpha^*) \in S(f)$ (т. е. $f(x^*, \alpha^*) = 0$) и

$$\frac{\partial f}{\partial x}(x^*, \alpha^*) = \frac{\partial f}{\partial \alpha}(x^*, \alpha^*) = 0. \tag{3.2.2}$$

Предположим также, что по крайней мере одна частная производная второго порядка от функции f в точке (x^*, α^*) отлична от нуля.

Разложим функцию f с помощью формулы Тейлора в окрестности точки (x^*, α^*). Учитывая, что $f(x^*, \alpha^*) = 0$, а также соотношения (3.2.2), получаем

$$f(x, \alpha) = \frac{1}{2}[A(x - x^*)^2 + 2B(x - x^*)(\alpha - \alpha^*) + \\ + C(\alpha - \alpha^*)^2] + o[(x - x^*)^2 + (\alpha - \alpha^*)^2] = 0, \tag{3.2.3}$$

где

$$A = \frac{\partial^2 f(x^*, \alpha^*)}{\partial x^2}, \quad B = \frac{\partial^2 f(x^*, \alpha^*)}{\partial x \partial \alpha}, \quad C = \frac{\partial^2 f(x^*, \alpha^*)}{\partial \alpha^2}.$$

Разделим соотношение (3.2.3) на $(\alpha - \alpha^*)^2$ или $(x - x^*)^2$ и осуществим предельный переход $(x, \alpha) \to (x^*, \alpha^*)$, $(x, \alpha) \in$

[1] Иначе говоря, ветви — компоненты связности множества $S(f) \setminus \sigma(f)$. — *Прим. ред.*

$\in S(f)$, см. [3.1]. При этом мы получим уравнение

$$A\left(\frac{dx}{d\alpha}\right)^2 + 2B\frac{dx}{d\alpha} + C = 0, \tag{3.2.4}$$

или

$$A + 2B\frac{d\alpha}{dx} + C\left(\frac{d\alpha}{dx}\right)^2 = 0. \tag{3.2.5}$$

Здесь $dx/d\alpha$ — угловой коэффициент касательной к дуге, проходящей через точку (x^*, α^*), если мы рассматриваем x как функцию α, или же $d\alpha/dx$ — угловой коэффициент касательной, если мы считаем α функцией от x.

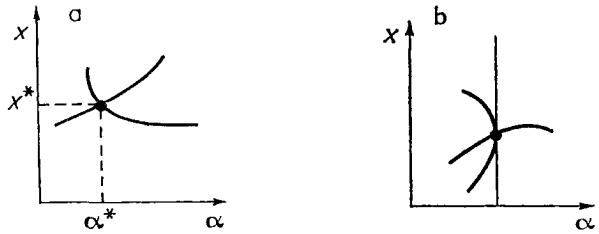


Рис. 3.3. Поведение решений в окрестности критической точки.

Рассмотрим теперь уравнения (3.2.4) и (3.2.5).

Случай I. $A \neq 0$. Тогда решение уравнения (3.2.4) имеет вид

$$\left(\frac{dx}{d\alpha}\right)_{1,2} = \frac{-B \pm \sqrt{B^2 - AC}}{A}. \tag{3.2.6}$$

Обозначим $D = B^2 - AC$. Если $D < 0$, то точка (x^*, α^*) является изолированной точкой множества $S(f)$ (из нее не выходит ни одна кривая). Если же $D > 0$, то в этом случае уравнение (3.2.4) имеет два вещественных решения — это означает, что в окрестности точки (x^*, α^*) множество $S(f)$ состоит из двух пересекающихся дуг. Или: в точке (x^*, α^*) сходятся четыре ветви стационарных решений (см. рис. 3.3а).

Случай II. $A = 0$, $C \neq 0$. Тогда уравнение (3.2.5) имеет два решения

$$\left(\frac{d\alpha}{dx}\right)_1 = 0 \quad \text{и} \quad \left(\frac{d\alpha}{dx}\right)_2 = -\frac{2B}{C}.$$

В этом случае множество $S(f)$ в окрестности точки (x^*, α^*) также состоит из двух пересекающихся дуг (рис. 3.3*b*). Одна из них имеет в этой точке вертикальную касательную: (x^*, α^*) — «точка поворота» для этой ветви. Такой случай отвечает бифуркации типа «вилка» и обычно встречается в системах, обладающих симметрией.

3.3. ВЕТВЛЕНИЕ В ТОЧКАХ БИФУРКАЦИИ. МНОГОМЕРНЫЙ СЛУЧАЙ

В этом параграфе мы вновь обратимся к анализу системы (3.1.1), см. [3.2]. Пусть $(\mathbf{x}^*, \alpha^*) \in \mathbf{S}(\mathbf{f})$, т. е.

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}^*, \alpha^*) = \mathbf{0}. \tag{3.3.1}$$

Введем обозначения

$$\mathbf{J} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1}, & \frac{\partial f_1}{\partial x_2}, & \ldots, & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1}, & \frac{\partial f_2}{\partial x_2}, & \ldots, & \frac{\partial f_2}{\partial x_n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1}, & \frac{\partial f_n}{\partial x_2}, & \ldots, & \frac{\partial f_n}{\partial x_n} \end{bmatrix} \tag{3.3.2}$$

$$\tilde{\mathbf{J}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1}, & \ldots, & \frac{\partial f_1}{\partial x_n}, & \frac{\partial f_1}{\partial \alpha} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1}, & \ldots, & \frac{\partial f_2}{\partial x_n}, & \frac{\partial f_2}{\partial \alpha} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1}, & \ldots, & \frac{\partial f_n}{\partial x_n}, & \frac{\partial f_n}{\partial \alpha} \end{bmatrix} \tag{3.3.3}$$

При этом все частные производные в формулах (3.3.2) и (3.3.3) вычисляются в точке $(\mathbf{x}^*, \alpha^*)$.

Случай 1. $\operatorname{Det} \mathbf{J} \neq 0$. Если $\det \mathbf{J} \neq 0$, то к системе (3.1.1) можно применить теорему о неявных функциях, согласно которой для всех α, взятых в некоторой окрестности $U(\alpha^*)$, существует однозначная зависимость

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}(\alpha),$$

причем

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}(\alpha), \alpha) \equiv \mathbf{0}$$

для всех $\alpha \in U(\alpha^*)$. Таким образом, через точку $(\mathbf{x}^*, \alpha^*)$ проходит только одна ветвь решений системы (3.1.1).

Точку $(\mathbf{x}^*, \alpha^*)$, для которой выполнено условие

$$\det \mathbf{J} \neq 0, \tag{3.3.4}$$

мы будем называть *регулярной точкой*.

Случай II. $\operatorname{Det} \mathbf{J} = 0$ и ранг расширенной матрицы $\tilde{\mathbf{J}}$ равен n: $\operatorname{rank}(\tilde{\mathbf{J}}) = n$. В этом случае, заменив один из столбцов матрицы $\mathbf{J}$ последним столбцом матрицы $\tilde{\mathbf{J}}$, можно добиться того, чтобы полученная матрица имела ранг n.

Для удобства записи предположим, что заменен первый столбец матрицы $\mathbf{J}$ (этого всегда можно добиться с помощью подходящей нумерации столбцов), причем полученная матрица

$$\mathbf{J}_\alpha = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial \alpha}, & \frac{\partial f_1}{\partial x_2}, & \ldots, & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \frac{\partial f_n}{\partial \alpha}, & \frac{\partial f_n}{\partial x_2}, & \ldots, & \frac{\partial f_n}{\partial x_n} \end{bmatrix} \tag{3.3.5}$$

имеет ранг n, т. е. $\det \mathbf{J}_\alpha \neq 0$.

Тогда, аналогично случаю I, к системе (3.1.1) можно вновь применить теорему о неявных функциях, с той лишь разницей, что роль α играет теперь переменная x_1. Таким образом, можно утверждать, что существуют функции $x_j = x_j(x_1)$, $j = 2, \ldots, n$, и $\alpha = \alpha(x_1)$, определенные в некоторой окрестности $\mathsf{U}(x_1^*)$, такие, что

$$x_j(x_1^*) = x_j^*, \quad j = 2, \ldots, n, \quad \alpha(x_1^*) = \alpha^*,$$

$$\mathbf{f}(x_1, x_2(x_1), \ldots, x_n(x_1), \alpha(x_1)) \equiv \mathbf{0}$$

для всех $x_1 \in \mathsf{U}(x_1^*)$.

Можно показать, что

$$\frac{d\alpha}{dx_1}(x_1^*) = 0. \tag{3.3.6}$$

Тогда, если $d^2\alpha/dx_1^2 < 0$, функция $\alpha(x_1)$ имеет в точке x_1^* максимум — это означает, что при $\alpha > \alpha^*$ пара стационарных решений исчезает. Если же $d^2\alpha/dx_1^2 > 0$, то функция $\alpha(x_1)$ в точке x_1^* имеет минимум и, значит, при $\alpha > \alpha^*$ возникает пара стационарных решений. Такую точку (x^*, α^*) мы будем называть *точкой поворота*.

Если ранг матрицы $\tilde{\mathbf{J}}(\mathbf{x}^*, \alpha^*)$ меньше n, то точку $(\mathbf{x}^*, \alpha^*)$ называют *сингулярной точкой* множества $\mathsf{S}(\mathbf{f})$.

Случай III. $\operatorname{rank}(\tilde{\mathbf{J}}(\mathbf{x}^*, \alpha^*)) = n - 1$.

Предположим, что $\operatorname{rank}(\mathbf{J}) = n - 1$ (этим случаем мы и ограничимся). Тогда из матрицы $\mathbf{J}$ можно выбрать матрицу $\mathbf{J}_1$ порядка $n - 1$, определитель которой отличен от нуля. Для упрощения записи будем предполагать, что матрица $\mathbf{J}_1$ получается из матрицы $\mathbf{J}$ вычеркиванием первого столбца и последней строки. Таким образом,

$$\mathbf{J}_1 = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_2}, & \ldots, & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ \frac{\partial f_{n-1}}{\partial x_2}, & \ldots, & \frac{\partial f_{n-1}}{\partial x_n} \end{bmatrix} \tag{3.3.7}$$

и

$$\det \mathbf{J}_1(\mathbf{x}^*, \alpha^*) \neq 0. \tag{3.3.8}$$

Рассмотрим первые $n-1$ уравнений системы (3.1.1). Условие (3.3.8) позволяет применить к этой системе теорему о неявной функции. Из нее следует, что существуют функции

$$x_i = \varphi_i(x_1, \alpha), \quad i = 2, 3, \ldots, n, \tag{3.3.9}$$

определенные в некоторой окрестности U точки (x_1^*, α^*), такие, что для $(x_1, \alpha) \in \mathsf{U}$ имеют место условия

$$x_i^* = \varphi_i(x_1^*, \alpha^*), \quad i = 2, 3, \ldots, n$$

и

$$f_j(x_1, \varphi_2(x_1, \alpha), \ldots, \varphi_n(x_1, \alpha), \alpha) \equiv 0, \tag{3.3.10}$$

где $j = 1, 2, \ldots, n-1$.

Подставим функции (3.3.9) в последнее уравнение системы (3.1.1), введя при этом обозначение

$$F(x_1, \alpha) = f_n(x_1, \varphi_2(x_1, \alpha), \varphi_3(x_1, \alpha), \ldots, \varphi_n(x_1, \alpha), \alpha). \tag{3.3.11a}$$

Мы получим

$$F(x_1, \alpha) = 0. \tag{3.3.11b}$$

Теперь можно исследовать уравнение (3.3.11) с помощью методов, описанных в § 3.2. Таким образом, нам удалось (исходя из заданных предположений о ранге матрицы $\tilde{\mathbf{J}}$) свести $(n+1)$-мерную задачу к двумерной.

Можно убедиться, что в рассматриваемом случае, когда $\operatorname{rank}(\mathbf{J}) = n-1$,

$$\frac{\partial F}{\partial x_1}(x_1^*, \alpha^*) = \frac{\partial F}{\partial \alpha}(x_1^*, \alpha^*) = 0. \tag{3.3.12}$$

Таким образом, сингулярной точке $(\mathbf{x}^*, \alpha^*)$ множества $\mathsf{S}(\mathbf{f})$ в R^{n+1} отвечает сингулярная точка множества $\mathsf{S}(F)$ в R^2.

Из уравнения $F(x_1, \alpha) = 0$ (3.3.11) можно так же, как это сделано в § 3.2, найти угловые коэффициенты касательных к ветвям $\mathsf{S}(F)$ (т. е. вычислить значения $\frac{dx_1}{d\alpha}$ в точке (x_1^*, α^*)). Затем с помощью формулы

$$\frac{dx_j}{d\alpha} = \frac{\partial \varphi_j}{\partial x_1}\frac{dx_1}{d\alpha} + \frac{\partial \varphi_j}{\partial \alpha}, \quad j = 2, 3, \ldots, n \tag{3.3.13}$$

можно найти направление ветвей $\mathsf{S}(f)$, проходящих через точку (x^*, α^*) в R^{n+1}. Это есть итог наших вычислений.

3.4. ЗАКЛЮЧИТЕЛЬНЫЕ ЗАМЕЧАНИЯ

3.4.1. Нахождение касательных векторов

Пусть в критической точке $(\mathbf{x}^*, \alpha^*)$ множества $\mathbf{S}(\mathbf{f})$ пересекаются две дуги этого множества (рис. 3.3а). Наша цель (это потребуется нам в гл. 5) состоит в том, чтобы найти в этой точке касательные векторы к обеим дугам, т. е. определить величины $(dx_i/d\alpha)(\alpha^*)$, $i = 1, 2, \ldots, n$.

Дифференцируя формулу (3.3.9) по α, получаем

$$\frac{dx_i}{d\alpha} = \frac{\partial\varphi_i}{\partial x_1}\frac{dx_1}{d\alpha} + \frac{\partial\varphi_i}{\partial\alpha}, \quad i = 2, 3, \ldots, n. \tag{3.4.1}$$

Значения производных $(\partial\varphi_i/\partial x_1)(x_1^*, \alpha^*)$, $(\partial\varphi_i/\partial\alpha)(x_1^*, \alpha^*)$, $i = 2, \ldots, n$ можно определить следующим образом. Дифференцируя тождества (3.3.10) по x_1, находим

$$\sum_{i=2}^{n} \frac{\partial f_j}{\partial x_i} \cdot \frac{\partial\varphi_i}{\partial x_1} = -\frac{\partial f_j}{\partial x_1}, \quad j = 1, 2, \ldots, n-1, \tag{3.4.2}$$

дифференцирование же по α дает

$$\sum_{i=2}^{n} \frac{\partial f_j}{\partial x_i} \cdot \frac{\partial\varphi_i}{\partial\alpha} = -\frac{\partial f_j}{\partial\alpha}, \quad j = 1, 2, \ldots, n-1. \tag{3.4.3}$$

Положим в равенствах (3.4.2) и (3.4.3) $\mathbf{x} = \mathbf{x}^*$ и $\alpha = \alpha^*$. Мы получим две системы линейных алгебраических уравнений для нахождения искомых величин $\left(\frac{\partial\varphi_i}{\partial x_1}\right.$ и $\left.\frac{\partial\varphi_i}{\partial\alpha}\right)$, имеющие одну и ту же матрицу коэффициентов $\mathbf{J}_1$. По предположению (см. (3.3.8)) матрица $\mathbf{J}_1$ невырожденна и, следовательно, эти системы однозначно разрешимы.

3.4.2. Устойчивость на диаграмме стационарных решений

На диаграмме стационарных решений обычно указывается и характер устойчивости этих решений, при этом сплошной линией мы изображаем ветви устойчивых стационарных решений, а пунктирной линией ветви неустойчивых стационарных решений. Изменение характера устойчивости происходит обыкновенно в точках поворота и в точках ветвления. Изменение характера устойчивости может произойти и в обыкновенной (регулярной) точке диаграммы стационарных решений, например

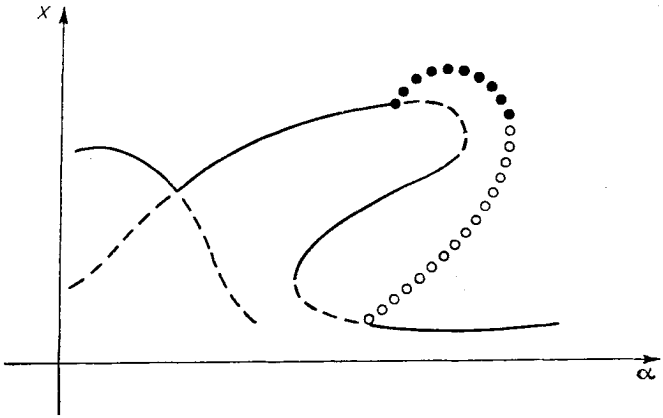


Рис. 3.4. Диаграмма стационарных решений.

в точке, отвечающей бифуркации Андронова—Хопфа. При этом на диаграмме стационарных решений мы символически обозначаем малыми кружками отделившиеся периодические решения (рис. 3.4). Черными кружками обозначаются устойчивые периодические решения, а белыми (незаштрихованными) кружками — неустойчивые.

3.4.3. Диаграмма периодических решений

Диаграмма периодических решений строится аналогично диаграмме стационарных решений: на двумерной картинке отображается зависимость той или иной характеристики периодического решения от параметра. Обычно в качестве такой характеристики мы выбираем период или амплитуду периодического решения. Устойчивые и неустойчивые периодические решения на этих диаграммах мы обозначаем соответственно сплошными и пунктирными линиями.

Изменение характера устойчивости происходит обычно в точках поворота и в точках, где пересекаются две дуги диаграммы. Точки поворота на диаграмме периодических решений соответствуют бифуркациям, при которых с изменением параметра происходит слияние и исчезновение (или соответственно возникновение) пары периодических решений. Точке пересечения двух дуг соответствует обыкновенно бифуркация периодического решения с потерей симметрии. Изменение характера устойчивости происходит и в обыкновенных (регулярных) точках диаграммы периодических решений, а именно в точках, соответствующих бифуркации удвоения периода или бифуркации рождения инва-

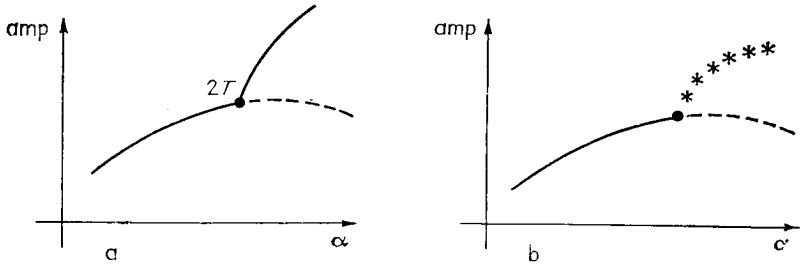


Рис. 3.5. Диаграмма периодических решений: a) удвоение периода; b) рождение инвариантного тора.

риантного тора. Ветвь периодических решений с двойным периодом на диаграмме периодических решений обозначается способом, указанным на рис. 3.5*a*. Ответвление семейства инвариантных торов изображено графически на рис. 3.5*b*.

ЛИТЕРАТУРА

[3.1] Iooss G., Joseph D. D.: Elementary Stability and Bifurcation Theory, Springer — Verlag, New York, 1980. [Имеется перевод: Йосс Ж., Джозеф Д. Элементарная теория устойчивости и бифуркаций. — М.: Мир, 1983.]

[3.2] Kubiček M., Klič A.: Appl. Math. and Comput. 13 (1983), 125.

Глава 4

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ

В начале этой главы (в § 4.1) мы коротко обсудим построение математических моделей. На примере неизотермического проточного реактора мы рассмотрим некоторые методы анализа моделей, включая приведение уравнений к безразмерному виду.

Следующие параграфы содержат набор моделей для систем с сосредоточенными параметрами (§ 4.2) и с распределенными параметрами (§ 4.3). В последующих главах эти модели будут служить для иллюстрации различных численных методов и подходов.

4.1. ПОСТРОЕНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ

4.1.1. Соотношения баланса

Выделим некоторый элемент объема и запишем соотношение баланса для какой-нибудь физической величины (например, для массы одного из компонентов в смеси веществ). Пусть скорость поступления рассматриваемой величины в выделенный элемент объема есть $\mathbf{P}$, скорость ее возникновения $\mathbf{R}$, а ее общее количество в данном объеме $\mathbf{M}$. Тогда $\mathbf{P}$, $\mathbf{R}$ и $\mathbf{M}$ являются функциями времени, связанными между собой соотношениями

$$\mathbf{P} + \mathbf{R} = d\mathbf{M}/dt. \tag{4.1.1}$$

В случае сплошной среды величины $\mathbf{P}$, $\mathbf{R}$ и $\mathbf{M}$ мы должны определить через некоторые плотности. Вектором $\mathbf{p}$ обозначим плотность потока, определенную таким образом, что поток через элемент с поверхностью dS в направлении нормали к ней $\mathbf{n}$ равен $\mathbf{p}\cdot\mathbf{n}dS$. Аналогичным образом скорость возникновения величины $\mathbf{r}$ рассчитывается на единицу объема, так что в элементе объема dV скорость возникновения оказывается равной

$\mathbf{r}\cdot dV$. Наконец, величина $\mathbf{M}$ описывается концентрацией $\mathbf{m}$. Пусть теперь Ω — произвольная область сплошной среды с кусочно-гладкой поверхностью $\partial\Omega$ (внешнюю нормаль к этой поверхности обозначим через $\mathbf{n}$). Тогда имеет место соотношение

$$-\iint\limits_{\partial\Omega} \mathbf{p}\cdot\mathbf{n}\cdot dS + \iiint\limits_{\Omega} \mathbf{r}\cdot dV = \frac{\partial}{\partial t}\iiint\limits_{\Omega} \mathbf{m}\cdot dV. \qquad (4.1.2)$$

Используя формулу Грина и перенося все члены равенства (4.1.2) в одну сторону (область Ω фиксирована, и поэтому можно поменять порядок интегрирования и дифференцирования), мы получаем

$$\iiint\limits_{\Omega} \left[\frac{\partial \mathbf{m}}{\partial t} + \operatorname{div}\mathbf{p} - \mathbf{r}\right] dV = 0. \qquad (4.1.3)$$

В силу произвольности области Ω должно выполняться соотношение

$$-\operatorname{div}\mathbf{p} + \mathbf{r} = \frac{\partial \mathbf{m}}{\partial t}. \qquad (4.1.4)$$

Уравнения балансов могут быть также записаны для движущегося элемента объема (см. [4.8], [4.9]).

4.1.2. Модель реактора проточного типа с перемешиванием

В качестве примера построим математическую модель химического реактора проточного типа с перемешиванием. Рассмотрим цилиндрический сосуд объемом V, снабженный охлаждающим кожухом объемом V_c (см. рис. 4.1а). В реактор подаются в виде растворов компоненты реакционной смеси $A_1, A_2, \ldots, A_k$ с объемными притоками $F_1, F_2, \ldots, F_k$, а из реактора отводятся продукты реакции $A_{k+1}, A_{k+2}, \ldots, A_s$ вместе с непрореагировавшими компонентами реакционной смеси, имеющие суммарный объёмный расход на выходе F (очевидно, что $F = F_1 + F_2 + \ldots + F_k$). В реакторе происходит химическая реакция, описываемая стехиометрическим соотношением

$$\sum_{j=1}^{s} \nu_j \cdot A_j = 0, \qquad (4.1.5)$$

где стехиометрические коэффициенты веществ, вступающих в реакцию $\nu_1, \ldots, \nu_k$, отрицательны, а стехиометрические коэффициенты продуктов реакции $\nu_{k+1}, \ldots, \nu_s$ положительны. В полностью перемешиваемый объем охлаждающей среды V_c

поступает хладагент с объемным расходом F_c и с температурой T_{c0}. Будем предполагать, что выполнены следующие условия:

— перемешивание реакционной смеси и охлаждающей среды является полным, в результате чего молярные концентрации реагирующих компонент c_j, температура реагирующей смеси и температура охлаждающей среды T не зависят от координат и могут быть только функциями времени;

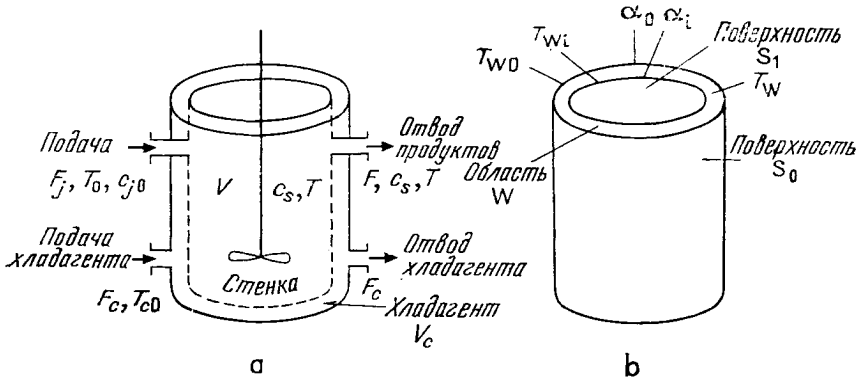


Рис. 4.1. а) Реактор проточного типа с перемешиванием.
б) Температуры в резервуаре.

— объемы V и V_c, притоки F_j, расход на выходе F, расход F_c, температура реакционной смеси на входе T_0 и охлаждающей смеси на входе T_{c0} являются постоянными;

— работа, совершаемая при перемешивании реакционной смеси и охлаждающей среды, с точки зрения баланса энергии пренебрежимо мала;

— скорость реакции представляет собой такую функцию $r(c_1, \ldots, c_s, T)$, что изменение числа молей компоненты реакции A_j на единицу объема равно $\nu_j r$;

— удельная теплоемкость реакционной смеси C_p (на единицу объема) постоянна.

Обозначим температуру внутренней стенки реактора через T_{Wi}, а температуру внешней стенки — через T_{W0}; предположим далее, что в соответствии с законом охлаждения Ньютона тепловой поток на единицу поверхности задается выражениями вида $\alpha_i(T - T_{Wi})$ и $\alpha_0(T_0 - T_c)$, где α_0 и α_i — коэффициенты теплоотдачи на внешней и внутренней поверхностях теплообменной стенки (при этом мы считаем их постоянными).

Используя общее уравнение баланса (4.1.1), где

$$\mathbf{P} = F_j c_{j0} - F c_j, \quad \mathbf{R} = \nu_j V r \quad \text{и} \quad \mathbf{M} = V c_j,$$

находим

$$V\frac{dc_j}{dt}=F_jc_{j0}-Fc_j+\nu_jVr(c_1,\ \ldots,\ c_s,\ T). \qquad (4.1.6)$$

Если обозначить через $h_j(T)$ молярную энтальпию компоненты A_j и пренебречь работой, совершаемой при перемешивании, то, применяя аналогичным образом закон сохранения энергии (см. [4.8], [4.5]), получаем

$$\left(\sum_j=\sum_{j=1}^{s}\right)$$

$$V\frac{d}{dt}\sum_j c_jh_j=\sum F_jc_{j0}h_{j0}-F\sum c_jh_j-S_1\alpha_i(T-\overline{T}_i). \qquad (4.1.7)$$

Здесь h_{j0} обозначает энтальпию компоненты на входе в реактор, S_1 представляет собой суммарную внутреннюю поверхность теплообмена и $\overline{T}_i$ — среднюю температуру внутренней поверхности стенки.

Преобразуем теперь уравнение (4.1.7), вычтя из него сумму уравнений, получаемых из (4.1.6) путем умножения на соответствующую величину h_j. В результате мы получим соотношение вида

$$V\sum_j c_j\frac{dh_j}{dt}=\sum_j F_jc_{j0}(h_{j0}-h_j)-\left(\sum_j\nu_jh_j\right)Vr-S_1\alpha_i(T-\overline{T}_i). \qquad (4.1.8)$$

Здесь $\sum_j \nu_jh_j=\Delta H_r$ — теплота реакции.

Далее можно записать

$$\sum_j c_j\frac{dh_j}{dt}=\sum_j c_jc_{pj}\frac{dT}{dt}=C_p\frac{dT}{dt},$$

где c_{pj} — молярная теплоемкость компоненты A_j, а C_p — теплоемкость реакционной смеси на единицу объема. Считая C_p постоянным и положив

$$\sum_j F_jc_{j0}(h_{j0}-h_j)=FC_p(T_0-T),$$

мы в конечном счете получим

$$VC_p\frac{dT}{dt}=FC_p(T_0-T)+(-\Delta H_r)Vr(c_1,\ \ldots,\ c_sT)-S_1\alpha_i(T-\overline{T}_i). \qquad (4.1.9)$$

Запишем теперь уравнения баланса для процесса теплопередачи через стенку. Предположим, что стенка имеет форму полого цилиндра и что она занимает область W с внутренней и внешней поверхностями S_i и S_0 соответственно (рис. 4.1b). Для температуры материала стенки T_W можно написать уравнение

$$\rho_W c_{pW} \frac{\partial T_W}{\partial t} = \lambda_W \nabla^2 T_W, \tag{4.1.10}$$

где ρ_W, c_{pW}, λ_W — соответственно плотность, удельная теплоемкость (на единицу объема) и коэффициент теплопроводности стенки. Граничные условия для уравнения (4.1.10) можно записать в виде

$$\lambda_W \frac{\partial T_W}{\partial \mathbf{n}} = \alpha_i (T_{Wi} - T) \quad \text{на} \quad S_1, \tag{4.1.11}$$

$$\lambda_W \frac{\partial T_W}{\partial \mathbf{n}} = \alpha_0 (T_c - T_{W0}) \quad \text{на} \quad S_0, \tag{4.1.12}$$

где $\partial/\partial \mathbf{n}$ — производная в направлении нормали к S_1 или S_0.

Уравнение баланса энергии для охлаждающей среды имеет вид

$$V_c C_{pc} \frac{dT_c}{dt} = F_c C_{pc} (T_{c0} - T_c) + S_0 \alpha_0 (\overline{T}_{W0} - T_c). \tag{4.1.13}$$

Здесь C_{pc} — теплоемкость охлаждающей жидкости на единицу объема, а $\overline{T}_{W0}$ — средняя температура наружной стенки реактора.

Уравнения (4.1.6), (4.1.9), (4.1.10), (4.1.13) с граничными условиями (4.1.11), (4.1.12) и соответствующими начальными условиями образуют систему из $s + 2$ обыкновенных дифференциальных уравнений и одного дифференциального уравнения с частными производными.

Описанная модель сравнительно сложна по своей структуре. Ее можно упростить, вводя различного рода упрощающие предположения.

4.1.2.1. Упрощенная модель стационарного режима

Прежде всего предположим, что система находится в стационарном состоянии. Тогда мы получаем уравнение Лапласа для температуры T_W вместе с системой алгебраических уравнений.

Из уравнения Лапласа нетрудно вывести следующее соотношение, означающее равенство потоков тепла:

$$S_1 \alpha_i (T - \overline{T}_{Wi}) = S_0 \alpha_0 (\overline{T}_{W0} - T_c), \tag{4.1.14}$$

где величины, отмеченные черточками, представляют собой соответствующие средние температуры. Комбинируя (4.1.14) и (4.1.13), получим соотношение для скорости отвода тепла $\dot{Q}_c$ в виде

$$\dot{Q}_c = F_c C_{pc} (T_c - T_{c0}) = S_0 \alpha_0 (\overline{T}_{W0} - T_c) = S_1 \alpha_i (T - \overline{T}_{Wi}). \quad (4.1.15)$$

Отсюда находим

$$T - T_{c0} = \dot{Q}_c \left[\frac{1}{F_c C_{pc}} + \frac{1}{\alpha_0 S_0} + \frac{1}{\alpha_i S_1} + \frac{\overline{T}_{Wi} - \overline{T}_{W0}}{\dot{Q}_c} \right].$$

Если толщина стенки равна d_W, а диаметр реактора гораздо больше, чем d_W, то приближенно $S_0 = S_1 = S$ и $\dot{Q}_c = \lambda_W S (\overline{T}_{Wi} - \overline{T}_{W0})/d_W$, откуда

$$\dot{Q}_c = US(T - T_{c0}), \quad U = \left\{ \frac{S}{F_c C_{pc}} + \frac{1}{\alpha_0} + \frac{1}{\alpha_i} + \frac{d_W}{\lambda_W} \right\}^{-1}. \quad (4.1.16)$$

Стационарное состояние реактора описывается теперь уравнением баланса массы (4.1.17) (см. (4.1.6)) и уравнением баланса энтальпии (вытекающим из уравнений (4.1.9) и (4.1.16)).

$$F_j c_{j0} - F c_j + \nu_j V r (c_1, \ldots, c_s, T) = 0, \quad j = 1, \ldots, s, \quad (4.1.17)$$

$$F C_p (T_0 - T) + (-\Delta H_r) V r (c_1, \ldots, c_s, T) - US(T - T_{c0}) = 0. \quad (4.1.18)$$

4.1.2.2. Упрощенные модели нестационарного режима

Будем считать теперь, что температура стенки T_W во всех ее точках приблизительно одинакова и зависит только от времени. Тогда вместо уравнения теплопроводности (4.1.10) можно записать обыкновенное дифференциальное уравнение, имеющее ясный физический смысл (уравнение баланса тепла); его можно получить также предельным переходом $\lambda_W \to \infty$ из (4.1.10):

$$V_W \rho_W C_{pW} \frac{dT_W}{dt} = \alpha_i S_1 (T - T_W) + \alpha_0 S_0 (T_c - T_W). \quad (4.1.19)$$

Таким образом, мы получили модель нестационарного режима работы реактора, представляющую собой систему $s + 3$ обыкновенных дифференциальных уравнений (4.1.6), (4.1.9), (4.1.13) и (4.1.19).

Другую модель мы получим, если λ_W имеет конечное значение, а теплоемкость стенки реактора пренебрежимо мала. Если предположить к тому же, что толщина стенки гораздо меньше,

чем диаметр реактора, то из условия равенства тепловых потоков получим

$$\dot{Q}_c = S\alpha_0(\overline{T}_{W0} - T_c) = S\lambda_W(\overline{T}_{Wi} - \overline{T}_{W0})/d_W =$$
$$= S\alpha_i(T - \overline{T}_{Wi}) = SU_1(T - T_c). \qquad (4.1.20)$$

Здесь U_1 — суммарный коэффициент переноса тепла:

$$U_1 = \left(\frac{1}{\alpha_0} + \frac{d_W}{\lambda_W} + \frac{1}{\alpha_i}\right)^{-1}.$$

В этом случае мы получаем модель нестационарного режима работы реактора, состоящую из $s+2$ обыкновенных дифференциальных уравнений, т. е. s уравнений вида (4.1.6), а также уравнений

$$VC_p\frac{dT}{dt} = FC_p(T_0 - T) + (-\Delta H_r)Vr(c_1, \ldots, c_s, T) - SU_1(T - T_c), \qquad (4.1.21)$$

$$V_cC_{pc}\frac{dT_c}{dt} = F_cC_{pc}(T_{c0} - T_c) + SU_1(T - T_c). \qquad (4.1.22)$$

Из анализа вышеприведенных моделей видно, что характер модели и размерность задачи в значительной степени определяются выбранными предположениями.

4.1.2.3. Приведение модели к безразмерному виду

Существенным шагом в процессе преобразования модели является приведение ее к безразмерному виду. При этом часто достигается уменьшение числа параметров.

Проиллюстрируем этот подход на примере алгебраических уравнений (4.1.17), (4.1.18), описывающих упрощенную модель стационарного режима работы реактора. Предположим, что есть одна необратимая реакция n-го порядка типа $A \to$ продукты реакции с соотношением для скорости реакции вида $r = k \cdot C_A^n$. Здесь константа скорости реакции k задается в форме Аррениуса, т. е.

$$k(T) = k(T_0)\exp\left\{-\frac{E}{R}\left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0}\right)\right\}.$$

Мы получаем следующие два алгебраических уравнения для c_A и T (учтя, что $F_A = F$)

$$Fc_{A0} - Fc_A - k \cdot c_A^n \cdot V = 0, \qquad (4.1.23)$$

$$FC_p(T_0 - T) + (-\Delta H_r)Vkc_A^n - US(T - T_{c0}) = 0. \qquad (4.1.24)$$

Укажем теперь некоторые возможности перевода модели в безразмерную форму. Отнесем все величины (переменные и параметры) к соответствующим характерным значениям. Прежде всего введем характерную температуру [4.10]

$$T_m = \frac{T_0 + aT_{c0}}{1+a}, \quad \text{где} \quad a = \frac{US}{FC_p}.$$

В предельном случае адиабатического режима ($U = 0$) $a = 0$ и $T_m = T_0$. Безразмерные концентрацию (u) и температуру (y) определим так:

$$u = \frac{c_A}{c_{A0}}, \quad y = \frac{T}{T_m}. \tag{4.1.25}$$

Введем безразмерные параметры: тепловыделение β, число Дамкёлера Da, безразмерную энергию активации γ.

$$\beta = \frac{(-\Delta H_r)\, c_{A0}}{C_p T_m (1+a)}, \quad \mathrm{Da} = \frac{V k(T_m) C_{A0}^{n-1}}{F}, \quad \gamma = \frac{E}{RT_m}. \tag{4.1.25a}$$

Уравнения баланса (4.1.23), (4.1.24) после перехода к переменным (4.1.25) принимают вид

$$1 - u - \mathrm{Da}\, u^n \exp\left[\gamma\left(1 - \frac{1}{y}\right)\right] = 0, \tag{4.1.26}$$

$$1 - y + \beta\, \mathrm{Da}\, u^n \exp\left[\gamma\left(1 - \frac{1}{y}\right)\right] = 0. \tag{4.1.27}$$

Умножая уравнение (4.1.26) на β и складывая результат с уравнением (4.1.27), нетрудно найти соотношение между безразмерной концентрацией и температурой:

$$u = (1 + \beta - y)/\beta. \tag{4.1.28}$$

При подстановке этого соотношения в уравнение (4.1.27) мы получаем одно уравнение относительно безразмерной температуры y, описывающее установившийся режим работы реактора:

$$y - 1 = \beta^{1-n}\, \mathrm{Da}\, f(y), \tag{4.1.29}$$

где

$$f(y) = (1 + \beta - y)^n \exp[\gamma(1 - 1/y)].$$

Безразмерное уравнение (4.1.29) описывает также химические системы, отличающиеся по физическим свойствам от рассматриваемой. Например, уравнения баланса массы и энтальпии, описывающие необратимую реакцию n-го порядка в частице пористого катализатора, в случае отсутствия значительных

градиентов концентрации и температуры внутри частицы имеют вид

$$k_c S_x (c_{A0} - c_A) - V_p k(T) c_A^n = 0, \tag{4.1.30}$$

$$hS_x (T_0 - T) + (-\Delta H_r) V_p k(T) c_A^n = 0. \tag{4.1.31}$$

Здесь k_c, h — коэффициенты массо- и теплоотдачи на внешней поверхности частицы, S_x — площадь внешней поверхности частицы, V_p — объем частицы, а c_{A0} и T_0 — концентрация и температура в ядре жидкости, обтекающей частицу (т. е. в невозмущенной жидкости. — *Перев.*). Вводя определения

$$\beta = \frac{k_c c_{A0} (-\Delta H_r)}{hT_0}, \quad \mathrm{Da} = \frac{V_p k(T_0) c_{A0}^n}{S_x k_c c_{A0}}, \tag{4.1.32}$$

из соотношений (4.1.30) и (4.1.31) мы вновь получаем уравнение (4.1.29).

Здесь число Дамкёлера Da есть отношение прореагировавшего количества вещества A (при $T = T_{A0}$ и $c = c_{A0}$) к максимально возможному потоку массы этого вещества через поверхность.

Таким образом, одна безразмерная система уравнений описывает несколько различных с физической точки зрения задач.

4.1.2.4. Анализ числа стационарных режимов (решений уравнения (4.1.29))

Рассмотрим сначала эндотермические реакции, для которых $(-\Delta H_r) < 0$, $\beta < 0$. При этом левая часть уравнения (4.1.29) представляет собой монотонно возрастающую, а правая часть — монотонно убывающую функцию y. Таким образом, в данном случае может существовать не более одного стационарного состояния для любых значений критерия Da.

Рассмотрим теперь экзотермическую реакцию $(-\Delta H_r > 0$, $\beta > 0)$. Перепишем уравнение (4.1.29) в виде

$$F(y) = \frac{f(y)}{y-1} = \frac{\beta^{n-1}}{\mathrm{Da}}. \tag{4.1.33}$$

Если предположить, что $u \in (0; 1)$, то из формулы (4.1.28) следует, что $y \in (1; 1+\beta)$. Если функция $F(y)$ будет монотонно убывать на промежутке $(1; 1+\beta)$, то при всех значениях Da будет существовать единственное решение. Для реакции первого порядка это будет иметь место в случае, когда

$$\gamma\beta \leqslant 4(1+\beta), \tag{4.1.34}$$

а для реакции произвольного положительного порядка ($n > 0$) при условии

$$\Gamma(y) = (n-1)y^3 + y^2(\beta + \gamma + 1 - n) - y\gamma(2+\beta) + \gamma(1+\beta) \geqslant 0. \tag{4.1.35}$$

Рассмотрим теперь условия существования нескольких стационарных решений. Если критерий однозначности (4.1.35) выполняется не для всех значений числа Da, то функция $F(y)$ при $y \in (1; 1+\beta)$ имеет локальный минимум и максимум (см.

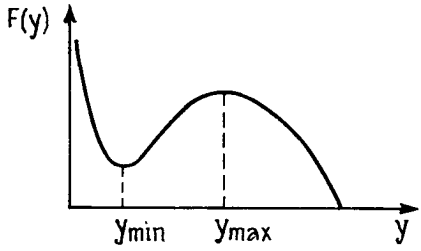


Рис. 4.2. Минимум и максимум функции $F(y)$.

рис. 4.2). Таким образом, существуют три стационарных состояния для значений числа Дамкёлера в диапазоне

$$\frac{F(y_{\min})}{\beta^{n-1}} < \frac{1}{\mathrm{Da}} < \frac{F(y_{\max})}{\beta^{n-1}}. \tag{4.1.36}$$

Например, для реакции первого порядка оказывается

$$y_{\max,\min} = \frac{\gamma(2+\beta) \pm \sqrt{(\gamma\beta[\gamma\beta - 4(1+\beta)])}}{2(1+\beta)}. \tag{4.1.37}$$

Анализу возможности существования нескольких стационарных состояний и примерам их возникновения в задачах теории горения и в моделях реакторов разных типов посвящена обширная литература [4.12—4.21].

4.2. ЗАДАЧИ С СОСРЕДОТОЧЕННЫМИ ПАРАМЕТРАМИ

В этом параграфе мы рассмотрим ряд физических проблем, анализ которых приводит к необходимости исследования систем обыкновенных дифференциальных уравнений. Эти проблемы будут представлены в форме, удобной для иллюстрации численных методов исследования нелинейных систем в гл. 5.

Системы дифференциальных уравнений мы будем записывать в виде

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{p}), \tag{4.2.1}$$

где $\mathbf{x} \in \mathbf{R}^n$, $\mathbf{x} = (x_1, \ldots, x_n)$ — вектор переменных состояния, а в вектор $\mathbf{p} \in \mathbf{R}^k$ включены параметры системы. При этом решение системы (4.2.1) определяется заданием начальных условий

$$\mathbf{x}(0) = \mathbf{x}^0. \tag{4.2.2}$$

4.2.1. *Задача* 1. Реактор проточного типа с полным перемешиванием в случае неизотермической реакции и рецикла

Рассматриваемый реактор схематически представлен на рис. 4.3. Будем предполагать, что реакционная смесь полностью перемешивается и что объем реактора V, объемный расход F_0, входная концентрация c_{A0} и температура на входе T_0, а также

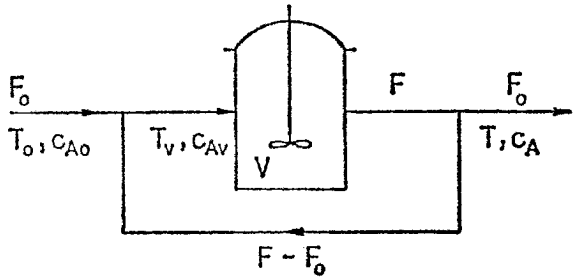


Рис. 4.3. Реактор проточного типа с перемешиванием и рециклом.

коэффициент теплопередачи U, площадь поверхности теплообмена S, теплоемкость на единицу объема C_p и теплота реакции $(-\Delta H_r)$ остаются постоянными. Кроме того, мы будем предполагать, что температура охлаждающей среды не изменяется и что в реакторе происходит практически необратимая реакция типа $A \rightarrow$ продукты.

С учетом этих предположений уравнения баланса массы и энтальпии можно представить в виде

$$V \frac{dc_A}{dt'} = F[c_{Av} - c_A] - r(c_A, T)V, \tag{P1-1}$$

$$VC_p \frac{dT}{dt'} = FC_p[T_v - T] + r(c_A, T)(-\Delta H_r)V - US(T - T_c). \tag{P1-2}$$

Положим $\Lambda = F_0/F$. Тогда

$$T_v = \Lambda T_0 + (1 - \Lambda)T, \tag{P1-3}$$

$$C_{Av} = \Lambda c_{A0} + (1 - \Lambda)c_A. \tag{P1-4}$$

При этом реактор без рецикла соответствует случаю $\Lambda = 1$.

Рассмотрим реакцию 1-го порядка, для которой $r = kc_A = k_\infty c_A \exp(-E/RT)$.

Определим следующие безразмерные величины:

конверсию

$$x = \frac{c_{A0} - c_A}{c_{A0}},$$

температуру

$$\Theta = \frac{E}{RT_0^2}(T - T_0),$$

число Дамкёлера

$$\mathrm{Da} = k_0 \frac{V}{F}, \quad (k_0 = k(T_0)),$$

параметр тепловыделения

$$B = \frac{(-\Delta H_r)\, c_{A0}}{C_p T_0} \frac{E}{RT_0}, \tag{P1-5}$$

энергию активации

$$\gamma = E/RT_0,$$

температуру хладагента

$$\Theta_c = \frac{E}{RT_0^2}(T_c - T_0),$$

параметр теплоотвода

$$\beta = \frac{US}{FC_p},$$

безразмерное время

$$t = t'F/V.$$

Тогда уравнения баланса массы и энтальпии переписываются в виде

$$\frac{dx}{dt} = -\Lambda x + \mathrm{Da}(1 - x)\exp\left(\frac{\Theta}{1 + \Theta/\gamma}\right), \tag{P1-6}$$

$$\frac{d\Theta}{dt} = -\Lambda\Theta + \mathrm{Da}\, B(1 - x)\exp\left(\frac{\Theta}{1 + \Theta/\gamma}\right) - \beta(\Theta - \Theta_c). \tag{P1-7}$$

Уравнения (P1-6), (P1-7) могут быть представлены в форме (4.2.1), где

$$\mathbf{x} = (x, \Theta),$$

$$\mathbf{p} = (\Lambda, \mathrm{Da}, \gamma, B, \beta, \Theta_c).$$

Обозначим через τ «время задержки»: $\tau = V/F$. Тогда

$$\mathrm{Da} = k_0\tau, \quad \beta = a\tau, \quad \text{где} \quad a = US/VC_p. \tag{P1-8}$$

4.2.2. *Задача* 2. Каскад из двух неизотермических проточных реакторов с полным перемешиванием и рециклом

Система из двух реакторов схематически представлена на рис. 4.4. Используя те же предположения, что в *задаче* 1, урав-

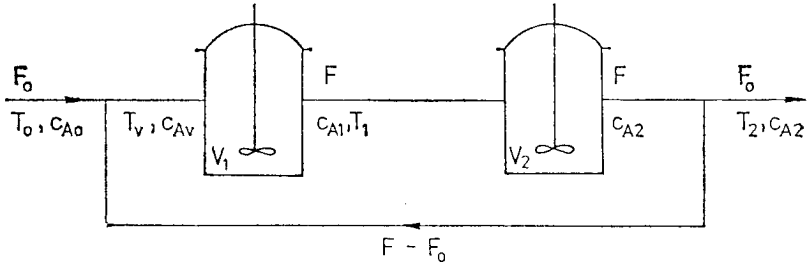


Рис. 4.4. Два реактора проточного типа с перемешиванием и рециклом.

нения баланса массы и энтальпии в этом случае можно записать в виде

$$V_1 \frac{dc_{A1}}{dt'} = F[c_{Av} - c_{A1}] - r(c_{A1}, T_1) V_1, \qquad \text{(P2-1)}$$

$$V_1 C_p \frac{dT_1}{dt'} = FC_p [T_v - T_1] + r(c_{A1}, T_1)(-\Delta H_r) V_1 - U_1 S_1 (T_1 - T_{c1}), \qquad \text{(P2-2)}$$

$$V_2 \frac{dc_{A2}}{dt'} = F[c_{A1} - c_{A2}] - r(c_{A2}, T_2) V_2, \qquad \text{(P2-3)}$$

$$V_2 C_p \frac{dT_2}{dt'} = FC_p [T_1 - T_2] + r(c_{A2}, T_2)(-\Delta H_r) V_2 - U_2 S_2 (T_2 - T_{c2}). \qquad \text{(P2-4)}$$

Введем следующие безразмерные величины: для $i = 1, 2$ положим

$$x_i = \frac{c_{A0} - c_{Ai}}{c_{A0}}, \quad \Theta_i = \frac{E}{RT_0^2}(T_i - T_0), \quad \beta_i = \frac{U_i S_i}{FC_p},$$

$$\Theta_{ci} = \frac{E}{RT_0^2}(T_{ci} - T_0) \qquad \text{(P2-5a)}$$

и, кроме того, примем

$$B = \frac{(-\Delta H_r) c_{A0}}{C_p T_0} \frac{E}{RT_0}, \quad \mathrm{Da}_1 = k_0 \frac{V_1}{F}, \quad \mathrm{Da}_2 = k_0 \frac{V_2}{F}, \qquad \text{(P2-5b)}$$

$$\gamma = \frac{E}{RT_0}, \quad \varkappa = \frac{V_2}{V_1} = \frac{\mathrm{Da}_2}{\mathrm{Da}_1}, \quad t = t' \frac{F}{V_1}, \quad T_v = (1 - \Lambda) T_2 + \Lambda T_0,$$

$$c_{Av} = (1 - \Lambda) c_{A2} + \Lambda c_{A0}.$$

Введенные здесь переменные и параметры соответствуют безразмерным величинам, определенным в *задаче* 1. Аналогичным образом мы поступили бы и в случае каскада, состоящего из большего числа реакторов (для некоторых процессов полимеризации используются каскады, состоящие из 10—12 ступеней).

Воспользовавшись формулами (P2-5), преобразуем уравнения (P2-1)—(P2-4) к безразмерному виду (здесь мы вновь рассматриваем реакцию первого порядка)

$$\frac{dx_1}{dt} = (1-\Lambda)x_2 - x_1 + \mathrm{Da}_1(1-x_1)\exp\left(\frac{\Theta_1}{1+\Theta_1/\gamma}\right), \qquad \text{(P2-6)}$$

$$\frac{d\Theta_1}{dt} = (1-\Lambda)\Theta_2 - \Theta_1 + \mathrm{Da}_1 B(1-x_1)\exp\left(\frac{\Theta_1}{1+\Theta_1/\gamma}\right) - \beta_1(\Theta_1-\Theta_{c1}), \qquad \text{(P2-7)}$$

$$\varkappa\frac{dx_2}{dt} = x_1 - x_2 + \mathrm{Da}_2(1-x_2)\exp\left(\frac{\Theta_2}{1+\Theta_2/\gamma}\right), \qquad \text{(P2-8)}$$

$$\varkappa\frac{d\Theta_2}{dt} = \Theta_1 - \Theta_2 + \mathrm{Da}_2 B(1-x_2)\exp\left(\frac{\Theta_2}{1+\Theta_2/\gamma}\right) - \beta_2(\Theta_2-\Theta_{c2}). \qquad \text{(P2-9)}$$

Так же, как в *задаче* 1, можно ввести параметр τ, характеризующий время задержки, полагая [1)]

$$\mathrm{Da}_1 = \mathrm{Da}_2 = k_0\tau, \quad \beta_1 = \beta_2 = a\tau. \qquad \text{(P2-10)}$$

Уравнения (P2-6) — (P2-9) можно представить в форме (4.2.1), положив $\mathbf{x} = (x_1, \Theta_1, x_2, \Theta_2)$, $\mathbf{p} = (\Lambda, \mathrm{Da}_1, \mathrm{Da}_2, \beta_1, \beta_2, \Theta_{c1}, \Theta_{c2}, \gamma, \beta)$.

4.2.3. *Задача* 3. Проточный реактор с полным перемешиванием и с автокаталитической системой реакций (модель Нойеса — Филда)

Реакция Белоусова — Жаботинского представляет собой процесс окисления малоновой или бромма лоновой кислоты ионами броматов в кислой среде, катализированный ионами переходных металлов (церия, железа). При различных условиях в реакторе проточного типа с перемешиванием можно наблюдать длительные автоколебания, несколько стационарных состояний и периодических режимов, хаотическое поведение, а в распределенных системах — распространяющиеся концентрационные волны окисления и восстановления [4.24, 4.25]. Указанная

[1)] Формулами (P2-10) время задержки $\tau (= V/F)$ определено для *одинаковых* реакторов. — *Прим. ред.*

реакция служит моделью при исследовании нелинейных явлений в химической кинетике. Филд, Кёрёш и Нойес [4.26] разработали подробную схему механизма этой реакции, состоящую из одиннадцати основных реакций между двенадцатью компонентами. Позднее Филд и Нойес [4.27] предложили упрощенную схему, состоящую из пяти основных этапов. Обозначим компоненты реакции следующим образом: $A = BrO_3^-$, $B = BrMA$, $P = HOBr$, $X = HBrO_2$, $Y = Br^-$, $Z = Ce^{4+}$ и запишем эту реакцию в виде следующей схемы:

	Константа скорости реакции	
(1) $A + Y \rightarrow X + P$	k_1	
(2) $X + Y \rightarrow 2P$	k_2	
(3) $A + X \rightarrow 2X + 2Z$	k_3	(Р3-1)
(4) $2X \rightarrow A + P$	k_4	
(5) $B + Z \rightarrow hY$	k_5	

Предположим, что компоненты A и B находятся в большом избытке и что их концентрации не зависят от времени. Тогда изменение во времени концентраций остальных компонентов в замкнутой системе можно описать с помощью уравнений

$$\begin{aligned} \frac{dc_X}{dt'} &= k_1 c_A c_Y - k_2 c_X c_Y + k_3 c_A c_X - 2k_4 c_X^2, \\ \frac{dc_Y}{dt'} &= -k_1 c_A c_Y - k_2 c_X c_Y + h k_5 c_B c_Z, \\ \frac{dc_Z}{dt'} &= 2k_3 c_A c_X - k_5 c_B c_Z \end{aligned} \qquad (Р3\text{-}2)$$

(здесь c_j означает концентрацию компоненты j). Введем новые переменные

$$x = \omega c_X, \quad y = \eta c_Y, \quad z = \gamma c_Z, \quad t = \delta t'.$$

Тогда кинетические уравнения (Р3-2) примут вид

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= \frac{\omega}{\delta}\left(k_1 c_A \frac{y}{\eta} - k_2 \frac{xy}{\omega\eta} + k_3 c_A \frac{x}{\omega} - 2k_4 \frac{x^2}{\omega^2}\right), \\ \frac{dy}{dt} &= \frac{\eta}{\delta}\left(-k_1 c_A \frac{y}{\eta} - k_2 \frac{xy}{\omega\eta} + h k_5 c_B \frac{z}{\gamma}\right), \\ \frac{dz}{dt} &= \frac{\gamma}{\delta}\left(2k_3 c_A \frac{x}{\omega} - k_5 c_B \frac{z}{\gamma}\right). \end{aligned} \qquad (Р3\text{-}3)$$

Выберем теперь ω, η, γ, δ так, чтобы полученные уравнения имели максимально простой вид. Положим

$$\varepsilon = \frac{k_5 c_B}{k_3 c_A}, \quad \varepsilon' = \varepsilon \frac{\omega}{\eta},$$
$$\mu = \frac{2k_1 k_4}{k_2 k_3}, \quad g = 2h, \tag{P3-4}$$
$$\omega = \frac{2k_4}{k_3 c_A}, \quad \eta = \frac{k_2}{k_3 c_A}, \quad \gamma = \frac{k_4 k_5 c_B}{(k_3 c_A^2)}, \quad \delta = k_5 c_B.$$

Уравнения (P3-3) при этом переписываются в следующем безразмерном виде:

$$\varepsilon \frac{dx}{dt} = \mu y - xy + x - x^2,$$
$$\varepsilon' \frac{dy}{dt} = -\mu y - xy + gz, \tag{P3-5}$$
$$\frac{dz}{dt} = x - z.$$

Уравнения (P3-5) описывают процесс реакции в реакторе с полностью загруженной активной зоной (т. е. без подачи и отвода соответствующих компонент).

Таким образом, скорости образования отдельных компонент можно записать как

$$r_x = (\mu y - xy + x - x^2)/\varepsilon,$$
$$r_y = (-\mu y - xy + gz)/\varepsilon', \tag{P3-6}$$
$$r_z = x - z.$$

Тогда уравнения баланса компонент X, Y, Z в реакторе проточного типа с перемешиванием для случая установившегося режима принимают вид (x_0, y_0, z_0 — соответствующие концентрации на входе)

$$F(x_0 - x) + Vr_x = 0,$$
$$F(y_0 - y) + Vr_y = 0, \tag{P3-7}$$
$$F(z_0 - z) + Vr_z = 0.$$

Компоненты реакции X ($HBrO_2$) и Z (Ce^{4+}) представляют собой промежуточные продукты, возникающие в ходе реакции. При этом в реактор проточного типа с перемешиванием подается только компонента Y (Br^-).

Если $x_0 = z_0 = 0$, то, полагая $F/V = \beta$, $y_0 = \alpha$ и вводя затем обозначения $x = x_1$, $y = x_2$ и $z = x_3$, уравнения (P3-7)

с учетом формул (Р3-6) можно переписать в виде

$$(\mu x_2 - x_1 x_2 + x_1 - x_1^2)/\varepsilon - \beta x_1 = 0,$$
$$(-\mu x_2 - x_1 x_2 + g x_3)/\varepsilon' + \beta(\alpha - x_2) = 0,$$
$$x_1 - x_3 - \beta x_3 = 0. \qquad (Р3\text{-}8)$$

Таким образом, для уравнения в форме (4.2.1) в данном случае мы имеем $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)$, $\mathbf{p} = (\mu, \varepsilon, \varepsilon', \beta, g, \alpha)$.

Более подробно кинетические модели реакции Белоусова — Жаботинского обсуждаются в работах [4.28, 4.29].

4.2.4. *Задача* 4. SH-модель метаболизма тиолов

Химические процессы, происходящие при окислении низкомолекулярных тиолов (глютатион, цистеин и т. д.) в клеточных белках, могут быть описаны схемой реакций, представленной на рис. 4.5.

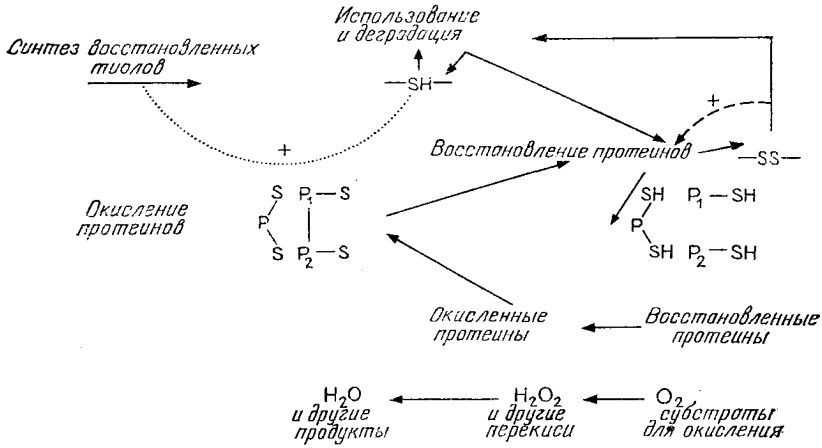


Рис. 4.5. Упрощенная схема реакций метаболизма тиолов.

Для изменения во времени концентраций S — H и S — S групп в низкомолекулярных тиолах при использовании ряда упрощающих предположений можно получить следующую модель [4.30—4.32]:

$$\frac{dX}{dt} = \alpha(\nu_0 + X^\nu)/(1 + X^\nu) - X(1 + Y), \qquad (Р4\text{-}1)$$

$$\frac{dY}{dt} = X(\beta + Y) - \delta Y. \qquad (Р4\text{-}2)$$

Здесь X, Y — безразмерные концентрации S — H и S — S групп, t — время, а α, β, γ, δ, ν_0 — положительные параметры, причем $\beta, \gamma > 1$.

Уравнения (P4-1) — (P4-2) можно записать в форме (4.2.1), положив $\mathbf{x} = (X, Y)$, $\mathbf{p} = (\alpha, \beta, \gamma, \delta, \nu_0)$.

4.2.5. *Задача* 5. Модель анаэробного разложения

Рассмотрим теперь пример реальной задачи с большим числом параметров. По нему читатель сможет составить себе представление о сложности достаточно реалистических моделей.

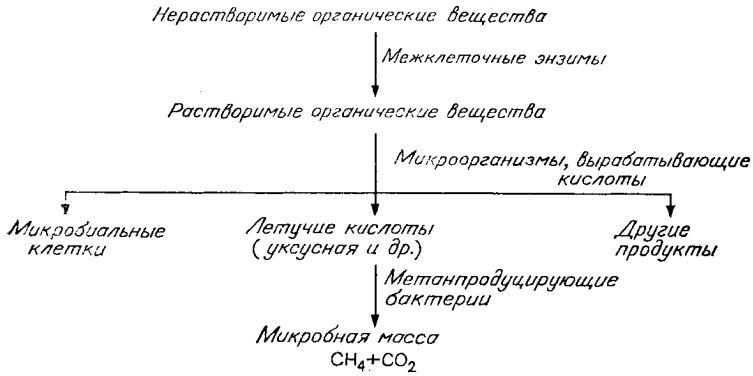


Рис. 4.6. Схема анаэробного разложения органических веществ.

Обычно принято считать, что анаэробное разложение органических веществ происходит по схеме, представленной на рис. 4.6 [4.33]. Подробная модель этого процесса была разработана Эндрюсом и его сотрудниками [4.34]. В указанной модели в качестве управляющего звена используется последняя ступень анаэробного процесса (получение метана). Предполагается, что в резервуаре, содержащем газовую и жидкую фазы, происходит полное перемешивание смеси. Недиссоциирующие летучие кислоты (представленные на схеме уксусной кислотой) рассматриваются, с одной стороны, как субстрат (вещество, потребляемое бактериями), ограничивающий рост микроорганизмов, а с другой стороны, как ингибитор, причем их превращение представляет собой элементарную стадию реакции, лимитирующую скорость всего процесса. Кроме того, предполагается, что в постоянном потоке смеси на входе F содержатся

катионы. Объемы жидкой смеси V и газовой смеси V_G в реакторе также считаются постоянными. При указанных допущениях уравнения баланса (вещества) для концентрации субстрата в жидкой фазе c_s, концентрации двуокиси углерода в жидкой (c_c) и газовой (p_c) фазах, концентрации микроорганизмов c_x, концентрации катионов c_z и концентрации токсичных веществ c_T в жидкой фазе можно записать в следующем виде (точка означает здесь дифференцирование по времени, $\dot{} = d/dt$):

$$\dot{c}_x = \frac{F}{V}(c_{x0} - c_x) + \mu c_x - K_T c_T, \qquad \text{(P5-1)}$$

$$\dot{c}_s = \frac{F}{V}(c_{s0} - c_s) - \mu c_x / S_{xs}, \qquad \text{(P5-2)}$$

$$\dot{c}_c = \frac{F}{V}(c_{c0} - c_c) + \mu c_x S_{cx} + \frac{F}{V}(c_{H0} - c_H) + \dot{c}_s - \dot{c}_z + K_L a (K p_c - c_c), \qquad \text{(P5-3)}$$

$$\dot{p}_c = -p S_p \frac{V}{V_G} K_L a (K p_c - c_c) - p_c [S_p V S_{Mx} \mu c_x - S_p V K_L a (K p_c - c_c)] / V_G, \qquad \text{(P5-4)}$$

$$\dot{c}_Z = \frac{F}{V}(c_{Z0} - c_Z), \qquad \text{(P5-5)}$$

$$\dot{c}_T = \frac{F}{V}(c_{T0} - c_T). \qquad \text{(P5-6)}$$

Здесь

$$c_{H0} = c_{Z0} - c_{s0}, \quad c_H = c_Z - c_s, \qquad \text{(P5-7)}$$

$$c_{HS} = \frac{K_I c_c c_s}{K_a (c_Z - c_s)}. \qquad \text{(P5-8)}$$

Функция роста микроорганизмов μ выражается при этом в виде

$$\mu = \frac{\hat{\mu}}{1 + K_s / c_{HS} + c_{HS} / K_i}. \qquad \text{(P5-9)}$$

Определения отдельных параметров вместе с их характерными для лабораторной практики значениями приведены в табл. 4.1 (эти значения используются в примерах гл. 5). Характеристики переменных представлены в табл. 4.2.

Систему уравнений (P5-1)—(P5-6), учтя определения (P5-7)—(P5-9), можно записать в форме (4.2.1), положив

$\mathbf{x} = (c_x, c_s, c_c, p_c, c_z, c_T)$ и взяв в качестве компонент вектора $\mathbf{p}$ параметры, перечисленные в табл. 4.1.

Таблица 4.1. *Задача* 5. Параметры

Величина	Характерное значение	Единица измерения	Физический смысл
F	1	л/сутки$^{-1}$	расход
K	$0{,}432 \cdot 10^{-2}$	моль · л$^{-1}$/ · Па$^{-1}$	постоянная Генри
K_a	$0{,}316 \cdot 10^{-4}$	моль · л$^{-1}$	постоянная диссоциации кислоты
K_i	$0{,}1 \cdot 10^{-4}$	моль · л$^{-1}$	константа ингибирования
$K_L a$	100	сутки$^{-1}$	суммарный коэффициент массопередачи в газовой фазе
K_I	$0{,}1 \cdot 10^{-5}$	моль · л$^{-1}$	константа ионизации
K_s	$0{,}303 \cdot 10^{-4}$	моль · л$^{-1}$	константа насыщения
S_{xs}	0,02	—	выход микроорганизмов
S_{cx}	47	—	выход CO_2
S_{Mx}	47	—	выход метана
V	10	л	объем жидкой смеси
V_G	2	л	объем газовой смеси
$\hat{\mu}$	0,4	сутки$^{-1}$	максимальная удельная скорость роста
p	$0{,}946 \cdot 10^5$	Па	полное давление
K_T	2	сутки$^{-1}$	параметр токсичности
S_p	25	л · моль$^{-1}$	коэффициент конверсии
c_{x0}	0,001	моль · л$^{-1}$	концентрация микроорганизмов на входе
c_{s0}	0,09	моль · л$^{-1}$	концентрация лимитирующего субстрата на входе
c_{c0}	0,009	моль · л$^{-1}$ моль · л$^{-1}$	концентрация растворенного CO_2 на входе
c_{z0}	0,1	моль · л$^{-1}$	концентрация катионов при подаче в реактор
c_{T0}	0	моль · л$^{-1}$	концентрация токсических веществ при подаче в реактор

Подобные нелинейные задачи с большим числом параметров обычно исследуют, выбирая некоторый основной (эталонный) вариант задачи и затем оценивая влияние изменений отдельных параметров; при этом мы всегда меняем лишь один или несколько параметров. Эталонный вариант может соответствовать, к примеру, условиям полупромышленного эксперимента.

Таблица 4.2. *Задача* 5. Переменные

Переменная	Единица измерения	Физический смысл
c_c	моль · л$^{-1}$	концентрация растворенного CO_2
c_H	моль · л$^{-1}$	концентрация растворенного бикарбоната
c_{HS}	моль · л$^{-1}$	концентрация недиссоциирующих летучих кислот
c_s	моль · л$^{-1}$	концентрация лимитирующего субстрата
c_T	моль · л$^{-1}$	концентрация токсичных веществ
c_x	моль · л$^{-1}$	концентрация микроорганизмов
c_z	моль · л$^{-1}$	концентрация свободных катионов
μ	сутки$^{-1}$	удельная скорость роста
p_c	Па	парциальное давление CO_2 в газовой фазе
t	сутки	время

4.2.6. *Задача* 6. Упрощенная модель анаэробного разложения

При рассмотрении предыдущей задачи мы видели, что модельные уравнения, описывающие процесс анаэробного разложения в двухфазной системе (жидкость — газ), достаточно сложны и содержат большое число различных параметров. Поэтому для получения предварительных выводов о поведении системы обычно используется упрощенная модель, учитывающая лишь жидкую фазу. При этом модельные уравнения имеют вид

$$\dot{c}_x = \frac{F}{V}(c_{x0} - c_x) + \mu c_x \qquad \text{(P6-1)}$$

$$\dot{c}_s = \frac{F}{V}(c_{s0} - c_s) - \mu c_x / S_{xs}. \qquad \text{(P6-2)}$$

Уравнения (P6-1) и (P6-2) представляют собой уравнения баланса микроорганизмов и субстрата, причем влиянием катионов в растворе мы пренебрегаем. Функция роста μ имеет вид, аналогичный представлению (P5-9), т. е.

$$\mu = \frac{\hat{\mu}}{1 + K_s/c_s + c_s/K_i}. \qquad \text{(P6-3)}$$

Формула (P6-3) получается из соотношения для скорости роста микроорганизмов в виде

$$\dot{v}_x = \hat{\mu} c_x c_s / (K_s + c_s + c_s^2/K_i).$$

Физический смысл параметров здесь тот же, что в предыдущей задаче. При записи системы (Р6-1), (Р6-2) в форме (4.2.1) $\mathbf{x} = (c_x, c_s)$, $\mathbf{p} = (V/F, c_{x0}, c_{s0}, \hat{\mu}, K_s, K_i, S_{xs})$.

Присутствующие в системе микроорганизмы, откликаясь на изменяющиеся внешние условия, например на изменение концентрации субстрата, реагируют на них не сразу, а с некоторым запаздыванием. Подобная реакция с временным запаздыванием t_L может быть описана с помощью модифицированной функции роста [4.35]

$$\mu = \frac{\hat{\mu}}{1 + K_s/c_s(t - t_L) + c_s(t - t_L)/K_i}. \qquad \text{(Р6-4)}$$

Замечание. Уравнения (Р6-1), (Р6-2) описывают также реактор проточного типа с полным перемешиванием в случае ферментативной реакции, ингибируемой субстратом.

4.2.7. *Задача* 7. Реактор с модельной реакцией типа «брюсселятор»

В теории диссипативных структур в качестве теоретического примера нелинейной химической реакции чаще всего используется схема реакции типа «брюсселятор» [4.36]. В этой схеме исходные вещества A и B превращаются в продукты реакции D и E с возникновением промежуточных продуктов X и Y:

$$A \xrightarrow{k_1} X,$$

$$B + X \xrightarrow{k_2} Y + D,$$

$$2X + Y \xrightarrow{k_3} 3X,$$

$$X \xrightarrow{k_4} E.$$

Если концентрации входных веществ (A и B) постоянны, а константы скоростей реакций k_i, $i = 1, 2, 3, 4$, равны единице, то изменение концентраций промежуточных продуктов в реакторе проточного типа с перемешиванием описывается соотношениями

$$\frac{dX}{dt} = A - (B + 1)X + X^2Y, \qquad \text{(Р7-1)}$$

$$\frac{dY}{dt} = BX - X^2Y. \qquad \text{(Р7-2)}$$

Обратите внимание на то, что в приведенных уравнениях баланса не учитываются входные и выходные потоки. Тем самым мы предполагаем, что в реактор поступают только

компоненты A и B, концентрации которых остаются постоянными, а выводятся из реактора продукты D и E, которые не входят в уравнения из-за необратимости реакций.

Два дифференциальных уравнения (P7-1), (P7-2) можно записать в форме (4.2.1), положив $\mathbf{x} = (X, Y)$ и $\mathbf{p} = (A, B)$.

4.2.8. *Задача* 8. Каскад реакторов с взаимным массообменом и реакцией типа «брюсселятор»

Рассмотрим N изотермических реакторов проточного типа с полным перемешиванием в случае наличия взаимного массообмена между соседними реакторами. Тогда уравнение баланса массы для системы, в которой происходит R независимых реакций между S компонентами ($S > R$), можно представить в виде

$$V_k \frac{dx_{ik}}{dt} = F_k x_{ik}^0 - F_k x_{ik} + \sum_{j=1}^{R} \nu_{ij} r_{jk} V_k + \sum_{l=1}^{N} h_{ilk} (x_{il} - x_{ik}). \quad \text{(P8-1)}$$

Здесь $i = 1, 2, \ldots, R$, $k = 1, \ldots, N$, V_k — постоянный объем k-го реактора, F_k — постоянный расход, x_{ik}^0 — концентрация i-й компоненты на входе k-го реактора, ν_{ij} — соответствующий стехиометрический коэффициент, r_{ik} — скорость i-й реакции в k-м реакторе, h_{ilk} — коэффициент массопередачи i-й компоненты между l-м и k-м реактором.

Для реакции типа «брюсселятор», где $R = 2$, обычно предполагается, что результирующие приток и отток промежуточных продуктов равны нулю ($F_k = 0$), а концентрация поступающих компонентов поддерживается постоянной [4.36].

Рассмотрим каскад из двух одинаковых реакторов ($N = 2$, $V_1 = V_2$) и пусть $h_{1lk} = \text{const} = D_1$ $h_{2lk} = \text{const} = D_2$ (рис. 4.7а). Тогда уравнения баланса массы для промежуточных продуктов X и Y можно представить в виде ($\dot{} = d/dt$)

$$\dot{X}_1 = A - (B + 1) X_1 + X_1^2 Y_1 + D_1 (X_2 - X_1), \quad \text{(P8-2)}$$

$$\dot{Y}_1 = B X_1 - X_1^2 Y_1 + D_2 (Y_2 - Y_1), \quad \text{(P8-3)}$$

$$\dot{X}_2 = A - (B + 1) X_2 + X_2^2 Y_2 + D_1 (X_1 - X_2), \quad \text{(P8-4)}$$

$$\dot{Y}_2 = B X_2 - X_2^2 Y_2 + D_2 (Y_1 - Y_2). \quad \text{(P8-5)}$$

В качестве начальных условий можно взять, например, при $t = 0$ $X_1 = X_2 = Y_1 = Y_2 = 0$.

Эти четыре дифференциальных уравнения можно записать в форме (4.2.1), положив

$$\mathbf{x} = (X_1, Y_1, X_2, Y_2), \quad \mathbf{p} = (A, B, D_1, D_2). \quad \text{(P8-6)}$$

Два реактора с взаимным массообменом можно рассматривать также в случае потока, текущего лишь в одном направлении, из реактора 1 в реактор 2 (рис. 4.7*b*). При этом уравнения (P8-4), (P8-5) сохранят свой вид, а уравнения (P8-2) и (P8-3) заменятся следующими:

$$\dot{X}_1 = A - (B+1)X_1 + X_1^2 Y_1, \qquad \text{(P8-2a)}$$

$$\dot{Y}_1 = BX_1 - X_1^2 Y_1. \qquad \text{(P8-3a)}$$

Аналогичным образом, если рассматривать линейную цепочку из одинаковых реакторов ($N = 4$), схема которой показана на

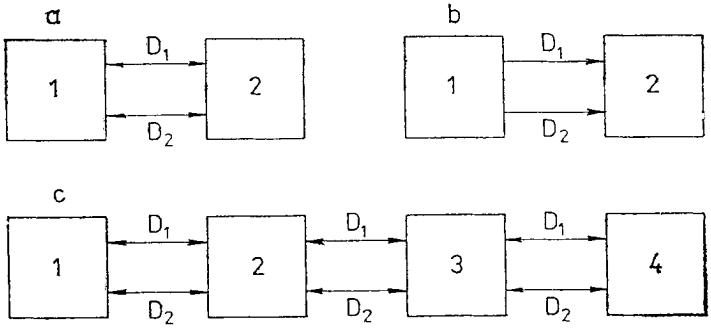


Рис. 4.7. Каскад реакторов с взаимным массообменом.

рис. 4.7*c*, то уравнения баланса массы можно записать в виде

$$\dot{X}_1 = A - (B+1)X_1 + X_1^2 Y_1 + D_1(X_2 - X_1), \qquad \text{(P8-7)}$$

$$\dot{Y}_1 = BX_1 - X_1^2 Y_1 + D_2(Y_2 - Y_1), \qquad \text{(P8-8)}$$

$$\dot{X}_2 = A - (B+1)X_2 + X_2^2 Y_2 + D_1(X_1 - 2X_2 + X_3), \qquad \text{(P8-9)}$$

$$\dot{Y}_2 = BX_2 - X_2^2 Y_2 + D_2(Y_1 - 2Y_2 + Y_3), \qquad \text{(P8-10)}$$

$$\dot{X}_3 = A - (B+1)X_3 + X_3^2 Y_3 + D_1(X_2 - 2X_3 + X_4), \qquad \text{(P8-11)}$$

$$\dot{Y}_3 = BX_3 - X_3^2 Y_3 + D_2(Y_2 - 2Y_3 + Y_4), \qquad \text{(P8-12)}$$

$$\dot{X}_4 = A - (B+1)X_4 + X_4^2 Y_4 + D_1(X_3 - X_4), \qquad \text{(P8-13)}$$

$$\dot{Y}_4 = BX_4 - X_4^2 Y_4 + D_2(Y_3 - Y_4). \qquad \text{(P8-14)}$$

Эти дифференциальные уравнения можно представить в форме (4.2.1), положив

$$\mathbf{x} = (X_1, Y_1, X_2, Y_2, X_3, Y_3, X_4, Y_4), \quad \mathbf{p} = (A, B, D_1, D_2). \qquad \text{(P8-15)}$$

Совершенно аналогично можно построить модели для систем реакторов, соединенных различными способами, например, для линейной цепочки из пяти и более реакторов, для замкнутого кольца из реакторов, для гексагональной структуры из шести реакторов, расположенных по окружности с одним центральным реактором, и т. д. Читатель может легко вывести соответствующие уравнения, используя формулу (Р8-1).

4.2.9. *Задача* 9. Система типа «брюсселятор» с изменяющимся во времени впуском

Схема модельной реакции «брюсселятор» может быть использована при исследовании свойств нелинейных неавтономных систем, т. е. систем, для которых время входит в правые части соответствующих дифференциальных уравнений явным образом [4.37].

Будем предполагать, что концентрация исходного вещества А не постоянна, а меняется во времени по следующему закону:

$$c_A = A + a \sin \omega t. \qquad \text{(P9-1)}$$

Тогда изменение концентраций промежуточных продуктов X и Y в одном реакторе описывается уравнениями, аналогичными (Р7-1) и (Р7-2):

$$\frac{dX}{dt} = X^2Y - (B+1)X + A + a \sin \omega t, \qquad \text{(P9-2)}$$

$$\frac{dY}{dt} = BX - X^2Y, \qquad \text{(P9-3)}$$

или

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{f}(t, \mathbf{x}, \mathbf{p}), \quad \mathbf{x} = (X, Y), \quad \mathbf{p} = (A, B, a, \omega). \qquad \text{(P9-4)}$$

4.2.10. *Задача* 10. Модель Лоренца

Рассмотрим слой жидкости, изображенный на рис. 4.8. В направлении вертикальной оси слой имеет толщину H, в горизонтальных направлениях размеры слоя считаются бесконечными. Будем предполагать, что жидкость имеет свободную поверхность и что тепло, возникающее за счет внутреннего трения в жидкости, пренебрежимо мало. Будем предполагать, далее, что распределения скоростей и температуры, возникающие из-за разности температур ΔT, могут быть описаны системой дифференциальных уравнений с частными производными в приближении Буссинеска (в частности, являются постоянными плотность, коэффициенты вязкости и теплопроводности, см.

[4.38, 4.40, 4.52]). Эту систему можно аппроксимировать системой обыкновенных дифференциальных уравнений, получаемых в результате разложения полей температур и скоростей течения в ряды Фурье [4.52]. Лоренц [4.40] применил очень простую аппроксимацию, в которой используется всего три

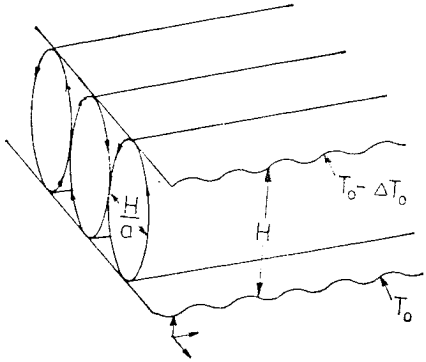


Рис. 4.8. Слой жидкости, нагреваемый снизу (к модели Лоренца).

члена этих разложений. При этом он получил следующую систему уравнений:

$$\begin{aligned} \dot{x} &= \sigma y - \sigma x, \\ \dot{y} &= -xz + rx - y, \\ \dot{z} &= xy - bz. \end{aligned} \qquad \text{(P10-1)}$$

Здесь переменная x отвечает одной из компонент скорости, а переменные y, z соответствуют членам разложения температуры в ряд Фурье. Параметр σ представляет собой число Прандтля, а параметр r — число Рэлея. В векторной форме (4.2.1) мы имеем

$$\mathbf{x} = (x,\ y,\ z), \quad \mathbf{p} = (\sigma,\ r,\ b).$$

Тривиальное стационарное решение системы (P10-1), $x = y = z = 0$, соответствует случаю передачи тепла с помощью теплопроводности, когда жидкость покоится и температурный профиль оказывается линейным. Два других стационарных решения системы (P10-1) имеют вид

$$x = y = \pm\,[b(r-1)]^{1/2}, \quad z = r - 1. \qquad \text{(P10-2)}$$

Эти решения соответствуют простому конвективному течению, изображенному на рис. 4.8.

За последние десять лет модель Лоренца превратилась в наиболее изученную модель возникновения хаотического движения жидкости [4.40]. При этом в большинстве работ исследуется обычно изменение характера решения (возникновение периодического решения определенного типа или же появление хаотического решения) в зависимости от изменения параметра r (числа Рэлея).

4.3. ЗАДАЧИ С РАСПРЕДЕЛЕННЫМИ ПАРАМЕТРАМИ

В этом параграфе будут сформулированы нелинейные задачи, приводящие к решению систем дифференциальных уравнений с частными производными, которые в дальнейшем, в гл. 6, используются для иллюстрации различного рода численных подходов. Принимая во внимание сложности численного анализа, мы будем рассматривать только системы с одной пространственной координатой (параметрические исследования для систем с большим числом пространственных переменных много труднее и в настоящее время только начинают широко применяться на практике).

4.3.1. Системы типа «реакция — диффузия»

Рассмотрим s компонент, реагирующих между собой в ходе R независимых реакций при постоянной температуре. Изменение концентрации во времени и пространстве может быть описано системой локальных уравнений баланса массы для s выбранных компонент

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{j}_i = f_i. \tag{4.3.1}$$

Здесь c_i — молярная концентрация компоненты i, f_i описывает возникновение i-й компоненты в результате R независимых реакций $\left(\text{при этом } f_i = \sum_{j=1}^{R} \nu_{ij} r_j, \text{ где } \nu_{ij} \text{ — стехиометрический коэффициент } i\text{-й компоненты в } j\text{-й реакции и } r_j \text{ — скорость } j\text{-й реакции}\right)$, $\mathbf{j}_i$ — молярная плотность потока компоненты i. Если учитывать только диффузионные и конвективные составляющие потока, то имеет место соотношение

$$\mathbf{j}_i = \mathbf{j}_{di} + \mathbf{v} c_i, \tag{4.3.2}$$

где $\mathbf{v}$ — вектор локальной мгновенной скорости смеси; в дальнейшем мы будем полагать $\mathbf{v} = \mathbf{0}$.

Диффузионный поток $\mathbf{j}_{di}$ линейно зависит от градиентов концентраций:

$$\mathbf{j}_{di} = -\sum_{k=1}^{s} D_{ik} \operatorname{grad} c_k, \tag{4.3.3}$$

где s — число компонент. Комбинируя формулы (4.3.1) и (4.3.3), получаем

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} = \operatorname{div}\left(\sum_{k=1}^{s} D_{ik} \operatorname{grad} c_k\right) + f_i(c_1, \ldots, c_s), \quad i = 1, 2, \ldots, s. \tag{4.3.4}$$

Здесь D_{ik} — коэффициенты диффузии и взаимной диффузии. Если положить в дальнейшем $D_{ii} = \text{const}$ и $D_{ij} = 0$ при $i \neq j$

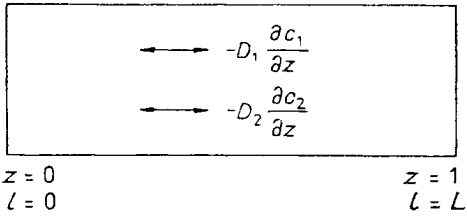


Рис. 4.9. Одномерная двухкомпонентная система типа «реакция — диффузия».

и рассматривать только две компоненты реакции, считая при этом задачу одномерной, то соответствующие уравнения баланса можно записать в виде (см. рис. 4.9)

$$\frac{\partial c_1}{\partial t} = \frac{D_1}{L^2}\left(\frac{\partial^2 c_1}{\partial z^2}\right) + f_1(c_1, c_2), \tag{4.3.5}$$

$$\frac{\partial c_2}{\partial t} = \frac{D_2}{L^2}\left(\frac{\partial^2 c_2}{\partial z^2}\right) + f_2(c_1, c_2). \tag{4.3.6}$$

Здесь L — размер системы, $z \in (0, 1)$ — безразмерная координата и $j_1 = -D_1(\partial c_1/\partial z)$, $j_2 = -D_2(\partial c_2/\partial z)$.

Анализ поведения систем типа «реакция—диффузия» для случая двух компонент представляет собой достаточно общую задачу. В дальнейшем мы будем использовать следующие обозначения: $x = c_1$, $y = c_2$, $D_x = D_1$, $D_y = D_2$, $f = f_1$, $g = f_2$; для искомых функций $x(z, t)$ и $y(z, t)$ имеем

$$\frac{\partial x}{\partial t} = \frac{D_x}{L^2}\frac{\partial^2 x}{\partial z^2} + f(x, y), \tag{4.3.7a}$$

$$\frac{\partial y}{\partial t} = \frac{D_y}{L^2}\frac{\partial^2 y}{\partial z^2} + g(x, y). \tag{4.3.7b}$$

Выбор *начальных и граничных условий* для системы (4.3.7) зависит от конкретной физической ситуации. В случае задания на границе рассматриваемой пространственной области постоянных значений концентраций мы будем говорить о граничных условиях 1-го рода (ГУ1), или *условиях Дирихле*:

$$z=0: \quad x(0,\ t)=\bar{x}_0, \quad y(0,\ t)=\bar{y}_0, \tag{4.3.8a}$$

$$z=1: \quad x(1,\ t)=\bar{x}_1, \quad \bar{y}(1,\ t)=\bar{y}_1. \tag{4.3.8b}$$

Важный частный случай ГУ1:

$$\bar{x}_0=\bar{x}_1=\bar{x}, \quad \bar{y}_0=\bar{y}_1=\bar{y}, \tag{4.3.9}$$

где $\bar{x}$ и $\bar{y}$ представляют собой решение уравнений

$$f(\bar{x},\ \bar{y})=0, \quad g(\bar{x},\ \bar{y})=0. \tag{4.3.10}$$

При таких граничных условиях есть очевидное стационарное решение уравнений (4.3.7), однородное по пространству:

$$x(z)\equiv\bar{x}, \quad y(z)\equiv\bar{y}. \tag{4.3.11}$$

Другим часто встречающимся типом граничных условий являются условия 2-го рода (ГУ2, или условия Неймана)

$$z=0,\ 1: \ \frac{\partial x}{\partial z}=\frac{\partial y}{\partial z}=0. \tag{4.3.12}$$

Указанные условия характеризуют непроницаемость границ области для компонент x и y. Тривиальное стационарное решение (4.3.11), очевидно, удовлетворяет и ГУ2.

Граничные условия 3-го рода (ГУ3), которые описывают частичную проницаемость границ системы для компонент x и y, имеют вид

$$z=0: \ \alpha_{x0}\frac{\partial x}{\partial z}+\beta_{x0}x=\gamma_{x0}, \quad \alpha_{y0}\frac{\partial y}{\partial z}+\beta_{y0}y=\gamma_{y0}, \tag{4.3.13a}$$

$$z=1: \ \alpha_{x1}\frac{\partial x}{\partial z}+\beta_{x1}x=\gamma_{x1}, \quad \alpha_{y1}\frac{\partial y}{\partial z}+\beta_{y1}y=\gamma_{y1}. \tag{4.3.13b}$$

Для всех трех типов граничных условий мы ввели здесь сокращения ГУ1, ГУ2 и ГУ3, которые в дальнейшем (в данной главе и в гл. 6) будут часто использоваться для упрощения записи. Заметим, что система может иметь на своей левой и правой границах граничные условия различных типов. Так, например, если нас интересует симметричное относительно центра промежутка решение для ГУ1 (4.3.9), то мы можем рассмотреть это решение на половинном промежутке, т. е. для $z\in[0,1/2]$, причем в точке $z=0$ мы задаем ГУ1, а в точке $z=1/2$ ГУ2.

Начальные условия для системы (4.3.7) имеют вид

$$t=0:\ x(z,\ 0)=x_0(z),\quad y(z,\ 0)=y_0(z) \tag{4.3.14}$$

и описывают начальное распределение концентраций (концентрационные профили).

Уравнения (4.3.7) с приведенными выше начальными и граничными условиями, кроме изотермической системы типа «реакция — диффузия», могут описывать также, к примеру, некоторые задачи экологии [4.42].

Рассмотрим теперь асимптотическое поведение уравнений (4.3.7) с граничными условиями типа ГУ2 для случая очень больших интенсивностей массопереноса [4.43]. При этом $\partial^2x/\partial z^2\to 0$ и $\partial^2y/\partial z^2\to 0$, в результате чего вместо уравнений (4.3.7) мы получаем систему, в которой пространственные градиенты концентраций отсутствуют:

$$\frac{dx}{dt}=f(x,\ y),\qquad \frac{dy}{dt}=g(x,\ y). \tag{4.3.15}$$

Уравнения (4.3.15) описывают систему с идеальным перемешиванием (систему с сосредоточенными параметрами).

Положим теперь один из коэффициентов диффузии равным нулю. Это можно сделать в тех случаях, когда величины коэффициентов диффузии существенно различаются между собой, либо какая-нибудь компонента системы связана (неподвижна). Тогда найденное решение упрощенной задачи может служить аппроксимацией решения исходной задачи. Например, если $D_x \gg D_y$, то построенная таким образом аппроксимационная модель принимает вид

$$\begin{aligned}\frac{\partial x}{\partial t}&=\frac{D_x}{L^2}\frac{\partial^2 x}{\partial z^2}+f(x,\ y),\\ \frac{\partial y}{\partial t}&=g(x,\ y).\end{aligned} \tag{4.3.16}$$

Система (4.3.7) в случае задания ГУ2 обладает еще одной интересной особенностью. Зная решение $x(z)$, $y(z)$ на промежутке $z\in[0,1]$ при заданном L, мы можем с помощью *«сложения профилей»* построить решение $\tilde{x}(\tilde{z})$, $\tilde{y}(\tilde{z})$ при $\tilde{L}=mL$, где m — натуральное число, воспользовавшись для этого следующим способом:

$$\tilde{z}\in\left[\frac{k}{m},\ \frac{k+1}{m}\right]:\ \tilde{x}\left(\tilde{z}=\frac{k+z}{m}\right)=x(\varphi(z)),\qquad 0\leqslant k\leqslant m-1, \tag{4.3.17}$$

где функция $\varphi(z)$ определена при $z \in [0, 1]$ как

$$\begin{aligned} \varphi(z) &= z, && \text{если } k \text{ четное}, \\ \varphi(z) &= 1 - z, && \text{если } k \text{ нечетное}. \end{aligned} \tag{4.3.18}$$

Аналогичный подход — «сложение решений» — можно использовать и для периодических решений. Для того чтобы лучше уяснить себе смысл операции «сложения решений», читателю рекомендуется изобразить этот процесс графически для $m = 2$.

4.3.1.1. Задача 11. Система «реакция — диффузия» для кинетики типа «брюсселятор»

Если использовать модельную кинетику типа «брюсселятор» (см. *задачу* 7), то функции f и g в уравнениях (4.3.7) принимают вид

$$\begin{aligned} f(x, y) &= A - (B + 1)x + x^2 y, \\ g(x, y) &= Bx - x^2 y. \end{aligned} \tag{P11-1}$$

Тривиальное стационарное решение (4.3.11) в этом случае записывается как

$$x(z) \equiv A, \quad y(z) \equiv B/A. \tag{P11-2}$$

Роль параметров в этой задаче играют D_x, D_y, L, A, B.

4.3.1.2. Задача 12. Система «реакция — диффузия», случай SH-*кинетики*

Если рассматривать распределенную систему с кинетикой, описываемой SH-моделью (см. *задачу* 4), то функции f и g в уравнениях (4.3.7) представляются в виде

$$f(x, y) = \alpha(\nu_0 + x^\gamma)/(1 + x^\gamma) - x(1 + y), \tag{P12-1}$$

$$g(x, y) = x(\beta + y) - \delta x. \tag{P12-2}$$

Решение системы уравнений $f = g = 0$, в отличие от модели типа «брюсселятор», здесь может быть найдено только численно (при заданных значениях параметров α, δ, $\nu_0 > 0$, β, $\gamma > 1$). При этом в определенном диапазоне изменения параметров можно получить несколько решений. Как и выше, *задачу* 12 можно рассматривать с граничными условиями всех трех типов. Отметим, что данная задача имеет восемь параметров: D_x, D_y, L, α, δ, ν_0, β, γ.

4.3.1.3. *Задача 13. Система «реакция — диффузия» в случае модели Майнхардта*

Одной из наиболее известных моделей морфогенеза в настоящее время является модель системы «реакция—диффузия» с кинетикой типа активатор—ингибитор, предложенная Майнхардтом [4.44—4.47]. Эта модель описывает пространственную дифференциацию ткани в процессе эмбриогенеза при почти симметричных начальных условиях.

Модель описывается системой двух уравнений «реакция—диффузия» типа (4.3.7). Функции f и g в данном случае имеют вид

$$f(x, y) = \rho_0\rho + c\rho x^2/y - \mu x, \qquad \text{(P13-1)}$$

$$g(x, y) = c'\rho' x^2 - \nu y. \qquad \text{(P13-2)}$$

Величины ρ и ρ' характеризуют здесь плотность источников для веществ, действующих как активатор и ингибитор, а ρ_0, c, μ, c', ν — положительные параметры. У этой системы существует единственное тривиальное решение $\bar{x}$, $\bar{y}$:

$$\bar{x} = \rho_0\rho/\mu + c\rho\nu/c'\rho'\mu, \qquad \text{(P13-3)}$$

$$\bar{y} = c'\rho'\bar{x}^2/\nu. \qquad \text{(P13-4)}$$

Для *задачи* 13 можно использовать граничные условия всех трех типов — ГУ1, ГУ2 или ГУ3. В данной задаче имеется 10 параметров: D_x, D_y, L, ρ, ρ', ρ_0, c, μ, c', ν.

4.3.2. *Задача* 14. Трубчатый неизотермический реактор с аксиальным перемешиванием

Модель трубчатого реактора с аксиальным перемешиванием используется как для гомогенных, так и для гетерогенных (каталитических) реакторов ([4.48], [4.49]). В последнем случае полезна упрощенная, псевдогомогенная модель, основанная на предположении, что гетерогенную систему «катализатор—реакционная смесь» можно заменить гомогенной средой с некими эффективными характеристиками. Такая псевдогомогенная модель и формулируется в *задаче* 14.

Рассмотрим трубчатый реактор с теплопередачей через стенку (см. рис. 4.10). Будем считать, что реакционная смесь полностью перемешивается в радиальном направлении; тем самым мы будем рассматривать только продольные градиенты концентраций компонент и температуры. Далее, предположим, что плотность потока компонент в продольном направлении описывается соотношением вида $\sim -D_e(\partial c/\partial l)$, аналогичным

закону Фика, где D_e — эффективный коэффициент диффузии, c — концентрация компоненты.

Аналогично будем предполагать, что плотность потока тепла в продольном направлении задается соотношением вида $-k_e(\partial T/\partial l)$, где k_e — эффективный коэффициент теплопроводности.

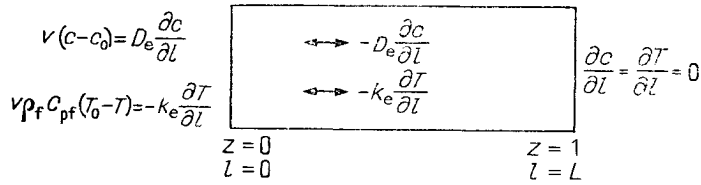


Рис. 4.10. Трубчатый реактор с аксиальным переносом тепла и массы; граничные условия типа Данквертса.

Предположим, далее, что в реакторе протекает реакция первого порядка, описываемая выражением для скорости реакции вида $k_\infty c \exp(-E/RT)$ (E — энергия активации, R — газовая постоянная) и с тепловым эффектом (энтальпией реакции) $-\Delta H_r$. Мы будем считать, что плотность теплового потока через стенку трубки определяется выражением $4U(T-T_c)/d$, где U — соответствующий коэффициент теплопередачи, d — диаметр трубки и T_c — температура теплообменной (например, охлаждающей) среды вне трубки.

Мы будем предполагать, что в реакторе имеется катализатор. Пусть плотность жидкости равна ρ_f, а ее теплоемкость на единицу объема при постоянном давлении постоянна и равна C_{pf}; плотность же катализатора равна ρ_s, а его теплоемкость на единицу объема также постоянна и равна C_{ps}. Тогда уравнения баланса массы и энергии можно представить в виде

$$\varepsilon_p \frac{\partial c}{\partial \tau} = D_e \frac{\partial^2 c}{\partial l^2} - v\frac{\partial c}{\partial l} - k_\infty (1-\varepsilon_p) c \exp(-E/RT), \quad \text{(P14-1)}$$

$$[\varepsilon_p \rho_f C_{pf} + (1-\varepsilon_p)\rho_s C_{ps}]\frac{\partial T}{\partial \tau} = k_e \frac{\partial^2 T}{\partial l^2} - \rho_f C_{pf} v \frac{\partial T}{\partial l} -$$

$$- \frac{4U}{d}(T-T_c) + (1-\varepsilon_p)(-\Delta H_r) k_\infty c \exp(-E/RT). \quad \text{(P14-2)}$$

Здесь τ — время, ε_p — доля объема, занятая жидкостью, и v — (постоянная) скорость жидкости. Начальные условия сле-

дующие:

$$\tau = 0:\ c(l,\ 0) = c^0(l), \quad T(l,\ 0) = T^0(l). \tag{P14-3}$$

Пусть теперь на границе области выполняются граничные условия типа Данквертса (рис. 4.10) (см. [4.8])

$$\begin{aligned} \tau > 0, \quad l = 0:\ & -D_e \frac{\partial c}{\partial l} = v(c_0 - c), \\ & -k_e \frac{\partial T}{\partial l} = v\rho_f C_{pf}(T_0 - T), \end{aligned} \tag{P14-4}$$

$$\tau > 0, \quad l = L:\ \frac{\partial c}{\partial l} = \frac{\partial T}{\partial l} = 0. \tag{P14-5}$$

Здесь c_0 и T_0 — концентрация и температура до входа в реактор. Введем следующие безразмерные переменные и параметры:

$$\begin{gathered} z = l/L, \quad t = \tau v/L\varepsilon_p, \quad y = 1 - c/c_0, \quad \Theta = \frac{T - T_0}{T_0} \cdot \frac{E}{RT_0}, \\ \mathrm{Pe_M} = \frac{vL}{D_e}, \quad \mathrm{Pe_H} = \frac{v\rho_f C_{pf} L}{k_e}, \quad \gamma = \frac{E}{RT_0}, \\ B = \gamma \frac{(-\Delta H_r) c_0}{\rho_f C_{pf} T_0}, \quad \mathrm{Da} = \frac{L(1 - \varepsilon_p)}{v} k_\infty \exp(-\gamma), \\ \mathrm{Le} = \frac{\varepsilon_p \rho_f C_{pf} + (1 - \varepsilon_p)\rho_s C_{ps}}{\rho_f C_{pf} \varepsilon_p}, \quad \beta = \frac{4UL}{dv\rho_f C_{pf}}, \\ \Theta_c = \frac{T_c - T_0}{T_0} \cdot \frac{E}{RT_0}. \end{gathered} \tag{P14-6}$$

Здесь y обозначает конверсию, Θ — безразмерную температуру, z — безразмерную координату, t — безразмерное время, $\mathrm{Pe_M}$, $\mathrm{Pe_H}$ — числа Пекле для массы и тепла, γ — безразмерную энергию активации, B — безразмерное адиабатическое повышение температуры, Da — число Дамкёлера, β — безразмерный коэффициент теплопередачи, Θ_c — безразмерную температуру охлаждающей среды и Le — число Льюиса.

В переменных (P14-6) мы получаем систему уравнений

$$\frac{\partial y}{\partial t} = \frac{1}{\mathrm{Pe_M}} \frac{\partial^2 y}{\partial z^2} - \frac{\partial y}{\partial z} + \mathrm{Da}(1 - y) \exp \frac{\Theta}{1 + \Theta/\gamma}, \tag{P14-7}$$

$$\mathrm{Le} \frac{\partial \Theta}{\partial t} = \frac{1}{\mathrm{Pe_H}} \frac{\partial^2 \Theta}{\partial z^2} - \frac{\partial \Theta}{\partial z} + B\,\mathrm{Da}(1 - y) \exp \frac{\Theta}{1 + \Theta/\gamma} - \beta(\Theta - \Theta_c) \tag{P14-8}$$

с граничными условиями

$$z=0:\ \mathrm{Pe_M}\, y=\frac{\partial y}{\partial z},\quad \mathrm{Pe_H}\,\Theta=\frac{\partial\Theta}{\partial z}, \tag{P14-9}$$

$$z=1:\ \frac{\partial y}{\partial z}=\frac{\partial\Theta}{\partial z}=0. \tag{P14-10}$$

Данная задача имеет восемь параметров: $\mathrm{Pe_M}$, $\mathrm{Pe_H}$, γ, B, Da, β, Θ_c и Le. Заметим, что уравнения (P14-7), (P14-8) отличаются от уравнений (4.3.7), описывающих систему типа «реакция—диффузия», конвективными слагаемыми, а именно слагаемыми $\partial y/\partial z$ и $\partial\Theta/\partial z$. При этом граничные условия (P14-9) принадлежат к типу ГУ3, а условия (P14-10) — к типу ГУ2.

Если аксиальное перемешивание осуществляется в слабой степени (эффективные диффузия и теплопроводность очень малы, $\mathrm{Pe_H}\to\infty$, $\mathrm{Pe_M}\to\infty$), то вместо уравнений (P14-7), (P14-8) мы получаем гиперболические уравнения первого порядка, которые описывают трубчатый реактор идеального вытеснения:

$$\frac{\partial y}{\partial t}+\frac{\partial y}{\partial z}=\mathrm{Da}\,(1-y)\exp\frac{\Theta}{1+\Theta/\gamma}, \tag{P14-11}$$

$$\mathrm{Le}\,\frac{\partial\Theta}{\partial t}+\frac{\partial\Theta}{\partial z}=B\,\mathrm{Da}\,(1-y)\exp\frac{\Theta}{1+\Theta/\gamma}-\beta(\Theta-\Theta_c). \tag{P14-12}$$

При этом условия (P14-9) и (P14-10) заменяются условиями

$$z=0:\ y=0,\quad \Theta=0. \tag{P14-13}$$

Соотношения (P14-11)—(P14-13) используются иногда для нахождения приближенного решения исходной задачи при больших значениях $\mathrm{Pe_H}$, $\mathrm{Pe_M}$.

4.3.3. *Задача* 15. Трубчатый неадиабатический реактор с аксиальным перемешиванием (двухфазная модель)

В случаях, когда температура и концентрация в объеме жидкости и на поверхности частиц катализатора резко отличаются, приходится рассматривать двухфазную модель. В этой модели, кроме переменных T и c, характеризующих жидкость, вводятся температура поверхности катализатора T^* и концентрация на его поверхности c^*.

Здесь мы рассмотрим вариант этой модели, предложенный Лью и Амундсоном [4.50]. Помимо предположений, введенных при описании задачи 14, будем считать, что реакция протекает на поверхности катализатора. При составлении соответствующих уравнений баланса мы будем учитывать конвективный пере-

нос, межфазовый тепло- и массообмен, теплоотдачу стенок реактора. Потоки компонент реакции и поток тепла с внешней поверхности катализатора в жидкую реакционную смесь будем описывать с помощью коэффициентов массоотдачи и теплоотдачи, считая потоки пропорциональными разности концентраций $c^* - c$ или разности температур $T^* - T$. При этом мы не учитываем перенос тепла и массы внутри частиц катализатора. Площадь внешней поверхности частиц катализатора, отнесенную к единице объема, обозначим через a.

Если рассматривать реакцию первого порядка, то для случая стационарного режима уравнения баланса вещества и энтальпии можно представить в форме [4.51]

$$D_e \frac{d^2c}{dl^2} - v\frac{dc}{dl} + k_c a(c^* - c) = 0, \qquad \text{(P15-1)}$$

$$k_e \frac{d^2T}{dl^2} - vC_p\frac{dT}{dl} + ha(T^* - T) - \frac{4U}{d}(T - T_c) = 0. \qquad \text{(P15-2)}$$

Уравнения баланса массы и энтальпии на внешней поверхности катализатора принимают вид

$$k_e a(c^* - c) + k_\infty \exp\left(-\frac{E}{RT^*}\right) c^* = 0, \qquad \text{(P15-3)}$$

$$ha(T^* - T) - k_\infty \exp\left(-\frac{E}{RT^*}\right) c^*(-\Delta H_r) = 0. \qquad \text{(P15-4)}$$

Граничные условия на входе и выходе задаются соотношениями (P14-4) и (P14-5). Вводя безразмерные переменные по формулам (P14-6) и, кроме того, полагая

$$J_M = \frac{k_e aL}{v}, \quad J_H = \frac{haL}{vC_p}, \quad \omega = \frac{c_0 - c^*}{c_0}, \quad \theta = \frac{T^* - T_0}{T_0}\gamma, \qquad \text{(P15-5)}$$

получим:

$$\frac{1}{\mathrm{Pe}_M}\frac{d^2y}{dz^2} - \frac{dy}{dz} + J_M(\omega - y) = 0, \qquad \text{(P15-6)}$$

$$\frac{1}{\mathrm{Pe}_H}\frac{d^2\Theta}{dz^2} - \frac{d\Theta}{dz} + J_H(\theta - \Theta) - \beta(\Theta - \Theta_c) = 0, \qquad \text{(P15-7)}$$

$$J_M(\omega - y) - \mathrm{Da}(1 - \omega)\exp\frac{\theta}{1 + \theta/\gamma} = 0, \qquad \text{(P15-8)}$$

$$J_H(\theta - \Theta) - B\,\mathrm{Da}(1 - \omega)\exp\frac{\theta}{1 + \theta/\gamma} = 0. \qquad \text{(P15-9)}$$

Граничные условия в безразмерном виде задаются соотношениями (P14-9) и (P14-10).

Комбинируя (P15-9) и (P15-8), имеем

$$\theta = \Theta + B\frac{J_{\text{м}}}{J_{\text{н}}}(\omega - y). \qquad \text{(P15-10)}$$

Воспользовавшись (P15-10), исключим из соотношения (P15-8) величину θ:

$$g(\omega) = J_{\text{м}}(\omega - y) - \text{Da}(1-\omega)\exp\left[\frac{\Theta + B\frac{J_{\text{м}}}{J_{\text{н}}}(\omega - y)}{1 + \left[\Theta + B\frac{J_{\text{м}}}{J_{\text{н}}}(\omega - y)\right]/\gamma}\right] = 0. \qquad \text{(P15-11)}$$

Таким образом, задача описывается системой двух дифференциальных уравнений (P15-6) и (P15-7) относительно неизвестных функций $y(z)$ и $\Theta(z)$ (краевая задача) и одним нелинейным (алгебраическим) уравнением (P15-11) для определения величины ω. Функция $\theta(z)$ при этом выражается через $y(z)$ и ω по формуле (P15-10). В общем случае данная задача имеет 9 параметров: $\text{Pe}_{\text{м}}$, $\text{Pe}_{\text{н}}$, $J_{\text{м}}$, $J_{\text{н}}$, B, Da, γ, β и Θ_c и представляет собой одну из проблем, в которых речь идет о совместном решении системы дифференциальных и алгебраических уравнений (см. также задачу (4.3.16) для случая установившегося режима).

4.3.4. *Задача* 16. Неизотермическая модель внутренней диффузии в частице пористого катализатора

Большинство каталитических реакций протекает на пористых частицах катализатора. Процессы тепло- и массообмена внутри пористой частицы и на ее поверхности часто существенным образом влияют на результирующую скорость реакции. Поэтому анализ указанных процессов имеет большое практическое значение. Математические модели, описывающие взаимодействие процессов тепло- и массообмена с реакцией на пористом катализаторе, обычно рассматриваются для частиц трех геометрических форм: бесконечная пластина или одна пора, проходящая через частицу ($a = 0$); бесконечный цилиндр ($a = 1$); и, наконец, шар ($a = 2$). В дальнейшем параметр a будет определять собой форму частицы. Введем следующие предположения [4.11]:

1. Сложные процессы переноса внутри пористой структуры можно описать с помощью постоянных эффективных коэффициентов диффузии D_{e} и теплопроводности λ_{e}.

2. Можно рассматривать одиночную частицу катализатора с коэффициентами формы $a = 0, 1, 2$.

3. Концентрация исследуемой компоненты остается постоянной на всей внешней поверхности частицы; мы будем обозначать эту концентрацию как c_s. Аналогично, соответствующую постоянную температуру мы обозначим T_s. Концентрация и температура в ядре текущей жидкости ($c_в$ и $T_в$) также считаются постоянными. Тепло- и массообмен на внешней поверхности частицы может быть описан с помощью постоянных коэффициентов теплоотдачи α и массоотдачи k_c. При указанных предположениях уравнения баланса массы и энтальпии принимают вид

$$\frac{\partial c}{\partial \tau} = D_e \nabla^2 c - r(c, T), \qquad \text{(P16-1)}$$

$$C_p \frac{\partial T}{\partial \tau} = \lambda_e \nabla^2 T + (-\Delta H_r) \cdot r(c, T). \qquad \text{(P16-2)}$$

Здесь C_p — теплоемкость на единицу объема псевдогомогенной реагирующей среды «катализатор—реакционная смесь» и $(-\Delta H_r)$ — теплота реакции.

Рассмотрим теперь каталитическую реакцию с соотношением для скорости реакции, задаваемым в форме

$$r = k_\infty c \exp(-E/RT).$$

Если рассматривать введенные выше формы частиц катализатора, то уравнения баланса (P16-1) и (P16-2) можно переписать в виде

$$\frac{\partial c}{\partial \tau} = D_e \left(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{a}{x} \frac{\partial c}{\partial x} \right) - k_\infty c \exp(-E/RT), \qquad \text{(P16-3)}$$

$$C_p \frac{\partial T}{\partial \tau} = \lambda_e \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{a}{x} \frac{\partial T}{\partial x} \right) + (-\Delta H_r) k_\infty c \exp(-E/RT). \qquad \text{(P16-4)}$$

Граничные условия, описывающие перенос тепла и массы на внешней поверхности частицы, имеют вид (R может обозначать, например, радиус частицы)

$$x = R: \; k_c (c_в - c) = D_e \frac{\partial c}{\partial x}. \qquad \text{(P16-5)}$$

$$\alpha (T_в - T) = \lambda_e \frac{\partial T}{\partial x}, \qquad \text{(P16-6)}$$

При этом соответствующие профили концентрации и температуры считаются симметричными относительно центра частицы ($x = 0$) и, следовательно,

$$x = 0: \; \frac{\partial c}{\partial x} = \frac{\partial T}{\partial x} = 0. \qquad \text{(P16-7)}$$

Применяя уравнения (P16-3), (P16-4) к случаю установившегося состояния, можно получить соотношение между концентрацией и температурой внутри частицы

$$T - T_s = (-\Delta H_r)\frac{D_e}{\lambda_e}(c_s - c), \qquad \text{(P16-8)}$$

которое принято называть формулой Пратера (T_s и c_s — соответственно температура и концентрация на поверхности частицы).

Введем безразмерные переменные

$$r = x/R, \quad y = c/c_B, \quad \Theta = \frac{E}{RT_B^2}(T - T_B), \quad \gamma = \frac{E}{RT_B},$$

$$\beta = \frac{(-\Delta H_r)\,c_B D_e}{\lambda_e T_B}, \quad \Phi = R\sqrt{\frac{k_\infty}{D_e}}, \quad \mathrm{Lw} = \frac{\lambda_e}{C_p D_e}, \qquad \text{(P16-9)}$$

$$\mathrm{Sh} = \frac{k_e R}{D_e}, \quad \mathrm{Nu} = \frac{\alpha R}{\lambda_e}, \quad t = \frac{\tau\lambda_e}{C_p R^2}.$$

В этих переменных уравнения баланса в безразмерной форме перепишутся так:

$$\mathrm{Lw}\frac{\partial y}{\partial t} = \frac{\partial^2 y}{\partial r^2} + \frac{a}{r}\frac{\partial y}{\partial r} - \Phi^2 y \exp\left(\frac{\Theta}{1+\Theta/\gamma}\right), \qquad \text{(P16-10)}$$

$$\frac{\partial \Theta}{\partial t} = \frac{\partial^2 \Theta}{\partial r^2} + \frac{a}{r}\frac{\partial \Theta}{\partial r} + \gamma\beta\Phi^2 y \exp\left(\frac{\Theta}{1+\Theta/\gamma}\right). \qquad \text{(P16-11)}$$

Граничные условия при этом принимают вид

$$t > 0,\ r = 1:\ 1 = y + \frac{1}{\mathrm{Sh}}\frac{\partial y}{\partial r}, \qquad 0 = \Theta + \frac{1}{\mathrm{Nu}}\frac{\partial \Theta}{\partial r}, \qquad \text{(P16-12)}$$

$$t > 0,\ r = 0:\ \frac{\partial y}{\partial r} = \frac{\partial \Theta}{\partial r} = 0. \qquad \text{(P16-13)}$$

Если интенсивность тепло- и массообмена на внешней поверхности частицы оказывается высокой ($\mathrm{Sh} \to \infty$, $\mathrm{Nu} \to \infty$, $c_s = c_B$, $T_s = T_B$), то граничные условия (P16-13) переходят в условия

$$y(1, t) = 1, \quad \Theta(1, t) = 0. \qquad \text{(P16-14)}$$

Формула Пратера (P16-8) в этом случае приобретает вид

$$\Theta = \gamma\beta(1 - y). \qquad \text{(P16-15)}$$

Задача 16 имеет в общем случае 7 параметров: γ, β, Φ, a, Lw, Sh, Nu.

4.3.5. *Задача* 17. Уравнения Навье — Стокса для случая течения жидкости между двумя бесконечными соосными вращающимися дисками

Рассмотрим установившееся, вращательное и осесимметричное течение вязкой несжимаемой жидкости. Пусть область, в которой перемещается жидкость, ограничена двумя бесконечными вращающимися дисками. Соответствующие уравнения Навье—Стокса в цилиндрических координатах (r, Θ, z) можно записать в виде [4.52]

$$u\frac{\partial u}{\partial r}+w\frac{\partial u}{\partial z}-\frac{v^2}{r}=-\frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial r}+\nu\left(\nabla^2 u-\frac{u}{r^2}\right), \qquad \text{(P17-1)}$$

$$u\frac{\partial v}{\partial r}+w\frac{\partial v}{\partial z}+\frac{uv}{r}=\nu\left(\nabla^2 v-\frac{v}{r^2}\right), \qquad \text{(P17-2)}$$

$$u\frac{\partial w}{\partial r}+w\frac{\partial w}{\partial z}=-\frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial z}+\nu\nabla^2 w. \qquad \text{(P17-3)}$$

Здесь (u, v, w) — составляющие скорости по координатам (r, Θ, z), p — давление, ρ — плотность и ν — кинематическая вязкость. Оператор ∇^2 в цилиндрических координатах имеет вид

$$\nabla^2=\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}.$$

К уравнениям (P17-1)—(P17-3) добавляется уравнение неразрывности

$$\frac{1}{r}\frac{\partial (ru)}{\partial r}+\frac{\partial w}{\partial z}=0. \qquad \text{(P17-4)}$$

Мы будем считать, что один из дисков располагается в плоскости $z=0$ и вращается с угловой скоростью Ω. Другой диск лежит в плоскости $z=d$ и вращается с угловой скоростью $S\Omega$, где $S\in[-1, 1]$.

Граничные условия для уравнений (P17-1)—(P17-4) («условия прилипания») записываются в виде

$$z=0:\ u=0,\quad v=\Omega r,\quad w=0, \qquad \text{(P17-5a)}$$

$$z=d:\ u=0,\quad v=S\Omega r,\quad w=0. \qquad \text{(P17-5b)}$$

Введем предположения, приводящие задачу (P17-1)—(P17-5) к краевой задаче для системы обыкновенных дифференциальных уравнений.

Будем искать решение, у которого осевая составляющая скорости зависит только от осевой координаты, т. е.

$$w\equiv w(z). \qquad \text{(P17-6)}$$

Далее предположим, что при $r=0$ составляющая скорости u имеет конечное значение. Тогда, интегрируя уравнение (P17-4) по переменной r, мы получаем ($A(z)$ — постоянная интегрирования)

$$ru + A(z) = -\frac{r^2}{2} w'(z).$$

Подставив $r=0$, получаем $A(z) \equiv 0$ и, следовательно,

$$u = -\frac{r}{2} w'(z). \qquad \text{(P17-7)}$$

Из уравнения (P17-3) имеем

$$w \cdot w'(z) = -\frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial z} + \nu w''(z),$$

после чего, интегрируя по z, находим ($B(r)$ — постоянная интегрирования)

$$\frac{w^2}{2} = -\frac{p}{\rho} + \nu w'(z) + B(r). \qquad \text{(P17-8)}$$

Дифференцирование соотношения (P17-8) по r дает

$$\frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial r} = \frac{dB(r)}{dr}. \qquad \text{(P17-9)}$$

Из уравнения (P17-1) после подстановки формул (P17-7) и (P17-9) получаем

$$\frac{dB(r)}{dr} - \frac{v^2}{r} = r\varphi(z). \qquad \text{(P17-10)}$$

Интегрирование (P17-10) с учетом граничных условий (P17-5) дает

$$B(r) = \frac{1}{2} r^2\Omega^2 + \frac{1}{2} r^2 q + c, \qquad \text{(P17-11)}$$

где q и c — некоторые постоянные величины. Сравнивая теперь формулы (P17-9) и (P17-10), имеем

$$v = rg(z), \qquad \text{(P17-12)}$$

а комбинируя формулы (P17-8) и (P17-11), находим

$$\frac{p}{\rho} = \frac{w^2}{z} - \nu w'(z) + \frac{r^2}{2}(\Omega^2 + q) + c, \qquad \text{(P17-13)}$$

т. е.

$$\frac{p}{\rho} = P(z) + \frac{r^2}{z}(\Omega^2 + q). \qquad \text{(P17-14)}$$

Соотношения (P17-7), (P17-12) и (P17-14) определяют вид соответствующих функций для составляющих скорости и для давления. Принимая во внимание эти соотношения, воспользуемся подстановкой

$$\xi = z/d, \tag{P17-15a}$$

$$u = r\Omega F(\xi), \tag{P17-15b}$$

$$v = r\Omega G(\xi), \tag{P17-15c}$$

$$w = (\nu\Omega)^{1/2} H(\xi), \tag{P17-15d}$$

$$\frac{p}{\rho} = \nu\Omega P(\xi) + \frac{1}{2} k\Omega^2 r^2. \tag{P17-15e}$$

Здесь k — не определенная пока постоянная.

Обозначим $\mathrm{Re} = \Omega d^2/\nu$ и преобразуем уравнения (P17-1), (P17-2) и (P17-4) с помощью формул (P17-15a), ..., (P17-15e) к виду

$$F'' = \sqrt{\mathrm{Re}}\, HF' + \mathrm{Re}\,(F^2 - G^2 + k), \tag{P17-16}$$

$$G'' = 2\,\mathrm{Re}\, FG + \sqrt{\mathrm{Re}}\, HG', \tag{P17-17}$$

$$H' = -2\sqrt{\mathrm{Re}}\, F. \tag{P17-18}$$

Функции F, G и H являются безразмерными. Функцию p, выраженную с помощью функций F и H, мы можем найти из уравнения (P17-3). Используя формулы (P17-15), граничные условия (P17-5) представим в безразмерном виде

$$\xi = 0\colon\ F = H = 0, \quad G = 1, \tag{P17-19}$$

$$\xi = 1\colon\ F = H = 0, \quad G = S. \tag{P17-20}$$

Если значения параметров Re и S заданы, то система уравнений (P17-16)—(P17-18) (с соответствующими граничными условиями) представляет собой краевую задачу пятого порядка с одной неизвестной постоянной k. Соотношения (P17-19), (P17-20) определяют шесть граничных условий. Тем самым задача поставлена полностью.

ЛИТЕРАТУРА

[4.1] Abraham R. H., Shaw Ch. D.: Dynamics — The Geometry of Behavior. Part I. Periodic Behavior, Aerial Press, Inc., Santa Cruz. 1983.

[4.2] Smith C. L., Pike R. W., Murrill P. W.: Formulation and Optimization of Mathematical Models. International Textbook Company, New York, 1970.

[4.3] Launder B. E., Spalding D. B.: Mathematical Models of Turbulence. Academic Press, New York, 1972.

[4.4] Himmelblau D. M., Bischoff K. B.: Process Analysis and Simulation. John Wiley. New York, 1968.

[4.5] Slattery J. C.: Momentum, Energy and Mass Transfer in Continua. McGraw-Hill. New. York, 1972.
[4.6] Astarita G.: An Introduction to Non-Linear Continuum Thermodynamics. Societe Editrice de Chimica, Milano, 1975.
[4.7] Braun M., Coleman C. S., Drew O. A., eds.: Models in Applied Mathematics.: Vol. 1., Differential Equation Models, Springer, Berlin, 1982. Brams S. J., Lucas W. F., Straffin P. O.., Jr.. eds.: ibid, Vol. 2, Political and Related Models. Springer, Berlin, 1982.
Lucas W. F., Roberts F. S., Thrall R. M.: ibid, Vol. 3., Discrete and System Models. Springer, Berlin, 1983.
Marcus-Roberts H., Thompson M.: ibid. Vol. 4, Life Science Models. Springer, Berlin, 1983,
[4.8] Bird R. B., Stewart W. E., Lightfoot N. E., Transport Phenomena. J. Wiley, New York, 1960.
[4.9] Aris R.: Method in the Modelling of Chemical Engineering Systems, in «Control and Dynamic Systems». Academic Press, New York, 1979.
[4.10] Kauschus W., Demont J., Hartmann K.: Chem. Engng. Sci. 33 (1978), 1283.
[4.11] Schneider P., Mitschka P.: Coll. Czech. Chem. Commun. 31 (1966) 3677. Aris R.: The Mathematical Theory of Diffusion and Reaction in Permeable Catalysts. Clarendon Press, Oxford, 1975.
[4.12] Zeldovič Ja. V., Zysin Y. A.: J. Technical Physics 11 (1941) 502.
[4.13] Golubitsky M., Keyfitz B. L.: Siam J. Math. Anal. 11 (1980), 316.
[4.14] Uppal A., Ray W. H., Poore A.: Chem. Engng. Sci. 31 (1976), 805.
[4.15] Balakotaiah V., Luss D.: Chem. Eng. Commun. 13 (1981), 111.
[4.16] Denn M. M.: Stability of Reaction and Transport Processes. Prentice Hall, Englewood Cliffs, 1974.
[4.17] Liljenroth F. G.: Chem. Met. Eng. 19 (1918), 287.
[4.18] Франк-Каменецкий Д. А. Фиффузия и теплопередача в химической кинетике. — М.: Наука, 1987.
[4.19] Hottel H. C., Williams G. C., Bonnell A. M.: Comb. & Flame 2 (1958), 13.
[4.20] Baddour R. F., Brian P. L. T., Logeais B. A., Eymery J. P.: Chem. Engng. Sci. 20 (1965), 281.
[4.21] Denn M. M.: Modeling for Process Control, in «Control and Dynamics Systems». Academic Press, 1979.
[4.22] Freudenthal H., ed.: The Concept and the Role of the Model in Mathematics and Natural and Social Science. Reidel Pubi. Co., Dordrecht, 1961.
[4.23] Lin C. C., Segel L. A.: Mathematics Applied to Deterministic Problems in the Natural Sciences, Macmillan, New York, 1975.
[4.24] Tyson J. J.: The Belousov—Zhabotinskii Reaction. Lecture Notes in Biomathematics. Springer, Berlin, 1976.
[4.25] Vidal C., Pacault A.: Non-Linear Phenomena in Chemical Dynamics. Springer, Berlin, 1981.
[4.26] Field R. J., Körös E., Noyes R. M.: J. Am. Chem. Soc. 94 (1975), 864.
[4.27] Field R. J., Noyes R. M.: J. Chem. Phys. 60 (1974), 1877.
[4.28] Edelson D., Field R. Y., Noyes R. M.: Int. J. Chem. Kinet. 7 (1975), 417.
[4.29] Tyson J. J.: J. Phys. Chem., 86 (1982), 3006.
[4.30] Березин И. В., Мартинек К. Основы физической химии ферментативного анализа. — М.: Высшая школа, 1977.
[4.31] Wiseman A. W., Ed.: Handbook of Enzyme Biotechnology. Ellis Horwood, Chichester 1975.
[4.32] Сельков Е. Е. Биофизика *15* (1970), 1065.

[4.33] Klass D. L., Waterman W. W., eds.: Energy from Biomass and Wastes. Symposium Papers. Washington D. C. Institution of Gas Technology, 1978.
[4.34] Graef S. P., Andrews Y. F.: J. Water Pol. Contr. Fed. 46 (1974), 666.
[4.35] Kubíček M., Holodniok M., Marek M., Lučha J.: Anaerobic Digester-Steady States, Transients and Control, 6th IFAC/IFIP Conference on «Digital Computer Applications to Process Control», Düsseldorf, 1980.
[4.36] Nicolis G., Prigogine I.: Self-Organization in Nonequilibrium Systems. J. Wiley, New York, 1977. [Имеется перевод: Николис Г., Пригожин И. Самоорганизация в неравновесных системах. — М.: Мир, 1979.]
[4.37] Tomita K., Tsuda M.: Phys. Lett. 71A (1979), 489.
[4.38] Leray J.: Acta Math. 63 (1939), 193.
Ландау Л. Д., Лившиц Е. М. Гидродинамика. — М.: Наука, 1988.
[4.39] Ruelle D., Takens F.: Comm. Math. Phys. 20 (1971), 167; 23 (1971), 343.
[4.40] Lorenz E. N.: J. Atmos. Sci. 20 (1963), 130.
Sparrow C. T: The Lorenz Equations: Bifurcations, Chaos and Strange Attractors, Springer, New York, 1982.
[4.41] Samohýl I.: Racionální termodynamika chemicky reagujících směsí. Academia, Praha, 1982.
[4.42] Mimura M., Nishiura Y., Yamaguti M.: Some Diffusive Prey and Predator Systems and their Bifurcation Problems. Ann. New York Acad. Sci. 316 (1979), 490.
[4.43] Hustak P., Kubíček M., Marek I., Marek M.: Bifurcation in Reaction-Diffusion Systems. In: «Theory of Nonlinear Operators», Academie Verlag, Berlin (1978), 117.
[4.44] Gierer A., Meinhardt W.: Kybernetik, 12 (1972), 30.
[4.45] Meinhardt H.: J. Cell Sci 23 (1977), 117.
[4.46] Marek M., Kubíček M.; Bull Math. Biol. 43 (1981), 259.
[4.47] Marek M., Kubíček M.: Z. Naturforsch. 35a (1980), 556.
[4.48] Hlaváček V., Marek M.: Chem. Engng. Sci. 29 (1966), 501.
[4.49] Aris R., Varma N.: Chemical Reactor Theory (Lapidus, L., Amundson, N. R. eds.). Prentice-Hall, Englewood Cliffs, (1977), 79.
[4.50] Liu S. L., Amundson N. R.: IEC Fundls 1 (1962), 200; 2 (1963), 183.
[4.51] Karanth N. G., Hughes R.: Cat. Rev. — Sci. Eng. 9 (1974), 169.
[4.52] McLaughlin J. B., Martin P. C.: Phys. Rev. A 12 (1975), 186.

ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ ЛИТЕРАТУРА

Кафаров В. В., Дорохов И. Н., Лиятов Л. Н. Системный анализ процессов химической технологии. В 3-х кн. Кн. 3 — М.: Наука, 1982.
Азаров В. Л., Луничев Л. Н., Тавризов Г. А. Математические методы исследования физических систем. — М.: Наука, 1976.

Глава 5

ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ И АЛГОРИТМЫ, ИСПОЛЬЗУЕМЫЕ ДЛЯ АНАЛИЗА НЕЛИНЕЙНЫХ СИСТЕМ С СОСРЕДОТОЧЕННЫМИ ПАРАМЕТРАМИ

Системы с сосредоточенными параметрами, с которыми мы встречаемся в технике и в естественных науках, чаще всего описываются системами обыкновенных дифференциальных уравнений. В тех случаях, когда используются не только линейные аппроксимации рассматриваемых процессов, эти системы оказываются нелинейными. В этой главе мы рассмотрим совокупность численных алгоритмов и методов, которые позволяют анализировать поведение систем нелинейных дифференциальных уравнений в зависимости от изменений характерных параметров модели.

Вначале мы опишем методы отыскания стационарных решений (§ 5.1) и способы построения соответствующих диаграмм решений (§ 5.2). Затем обсудим исследование устойчивости этих стационарных решений (§ 5.3). В § 5.4 последовательно рассматриваются алгоритмы нахождения точек поворота и точек ветвления, а также точек возникновения изол[1]. Далее в § 5.5 описываются методы нахождения точек комплексной бифуркации (бифуркации Хопфа), когда возникают решения типа предельного цикла.

В § 5.6 исследуются проблемы построения полной бифуркационной диаграммы, а следующий за ним параграф посвящен описанию наиболее употребительных методов численного интегрирования систем обыкновенных дифференциальных уравнений. Некоторые новые численные подходы к построению зависимости периодических решений от параметра рассмотрены в § 5.8. Далее в параграфе 5.9 приведены некоторые численные методы, используемые при изучении неупорядоченного (хаотического) поведения решений обыкновенных дифференциальных

---

[1] См. определение в гл. 3.

уравнений. Системам, в которых параметры медленно меняются со временем, посвящен § 5.10. Наконец, в § 5.11 описываются методы, используемые при анализе неавтономных систем. Численные подходы иллюстрируются с помощью *задач* 1—10, формулировка которых приведена в гл. 4. Результаты численного анализа представлены в тексте в виде графиков или таблиц. В заключение в § 5.12 приведено несколько задач, которые могут быть использованы для вычислительного практикума.

5.1. СТАЦИОНАРНЫЕ РЕШЕНИЯ

Динамическая модель с сосредоточенными параметрами может быть представлена в виде системы обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\frac{dx_i}{dt} = f_i(x_1, x_2, \ldots, x_n, \alpha_1, \ldots, \alpha_m), \quad i = 1, 2, \ldots, n. \tag{5.1.1}$$

Систему (5.1.1) можно записать также в векторной форме

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\alpha}), \tag{5.1.2}$$

где использованы обозначения

$$\mathbf{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_n), \quad \mathbf{f} = (f_1, f_2, \ldots, f_n), \quad \boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_m).$$

Здесь x_i — это переменные состояния, t — время, а $\boldsymbol{\alpha}$ — вектор параметров системы. В большинстве случаев мы будем рассматривать свойства системы в зависимости от одного скалярного параметра ($m = 1$). Это означает, что значения оставшихся параметров фиксированы и, следовательно, такие параметры являются «составной частью» функции $\mathbf{f}$. Кроме того, мы будем считать систему автономной, т. е. будем считать, что время t не входит явным образом в правые части уравнений (5.1.1). Неавтономным задачам будет посвящен § 5.11. Мы предполагаем, что правые части системы (5.1.1) представляют собой непрерывно дифференцируемые функции своих аргументов.

Стационарное решение уравнений (5.1.1) удовлетворяет системе нелинейных уравнений

$$f_i(x_1, x_2, \ldots, x_n, \boldsymbol{\alpha}) = 0, \quad i = 1, 2, \ldots, n. \tag{5.1.3}$$

Для решения этой системы (при фиксированном $\boldsymbol{\alpha}$) мы можем в принципе использовать любые методы решения систем нелинейных уравнений. Читатель, который более глубоко заинтересуется этой проблемой, может найти обзор соответствующих методов в книге [5.1]. Если функции f_i можно продифференцировать аналитически, то удобнее всего воспользоваться методом

типа метода Ньютона, представляющим собой один из вариантов метода итераций. Для этого построим последовательность $\{\mathbf{x}^k\}$ в соответствии с рекуррентной формулой вида

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k + \omega \Delta \mathbf{x}^k, \quad k = 0, 1, 2, \ldots, \tag{5.1.4}$$

где $\Delta \mathbf{x}^k$ для данного k находится из решения системы линейных алгебраических уравнений

$$\mathbf{J}(\mathbf{x}^k, \alpha) \Delta \mathbf{x}^k = -\mathbf{f}(\mathbf{x}^k). \tag{5.1.5}$$

Здесь через $\mathbf{J}$ обозначена матрица Якоби для системы (5.1.3), т. е. матрица $\mathbf{J} = [\partial f_i / \partial x_j]$. Параметр $\omega \in (0, 1]$ выбирается обычно так, чтобы

$$\| \mathbf{f}(\mathbf{x}^{k+1}) \| < \| \mathbf{f}(\mathbf{x}^k) \|. \tag{5.1.6}$$

В окрестности решения системы 5.1.3 условие (5.1.6) выполняется при $\omega = 1$, что соответствует классическому методу Ньютона; на большем удалении от решения иногда оказывается полезным выбирать меньшую величину ω, с тем чтобы условие (5.1.6) было выполнено. Указанная модификация классического метода Ньютона позволяет расширить область сходимости метода по отношению к выбору начального приближения $\mathbf{x}^0$.

Метод Ньютона обладает определенными достоинствами в отношении его сходимости, однако слабым местом этого метода является необходимость дифференцирования функций f_i. Если аналитическое дифференцирование оказывается затруднительным, то часто используется вариант метода Ньютона с матрицей Якоби, приближенно вычисляемой с помощью разностных отношений

$$\frac{\partial f_i(\mathbf{x})}{\partial x_j} \approx \frac{f_i(\mathbf{x} + h\mathbf{e}_j) - f_i(\mathbf{x})}{h}, \tag{5.1.7}$$

где h — достаточно малый шаг, а $\mathbf{e}_j$ — единичный вектор с единицей на j-м месте. Таким образом, для проведения одной итерации нам в общем случае потребуется вычислять вектор $\mathbf{f}$ $(n+1)$ раз.

Сходимость метода Ньютона (равно как и других методов) существенно зависит от выбора начального приближения решения $\mathbf{x}^0$. При этом уравнения (5.1.3) часто имеют не одно, а несколько решений. Тем самым возникает вопрос, как отыскать все решения данной системы. Такого рода задача разрешима, вообще говоря, лишь в некоторых специальных случаях, например при $n = 1$ и для функции f_1 в виде полинома. В случае функций f_i общего вида чаще всего выбирается несколько различных начальных приближений $\mathbf{x}^0$, после чего для каждого из них последовательно применяется схема Ньютона. При этом для

выбранного начального приближения мы практически получаем один из следующих результатов:

1. итерационный процесс сходится к физически приемлемому решению (новому или уже найденному ранее);

2. итерационный процесс сходится к физически неприемлемому решению;

3. итерационный процесс расходится, т. е. значения переменных с какого-то момента в ходе итераций превышают установленные пределы;

4. итерационный процесс не сходится с предписанной точностью при числе итераций, не превосходящем заданного.

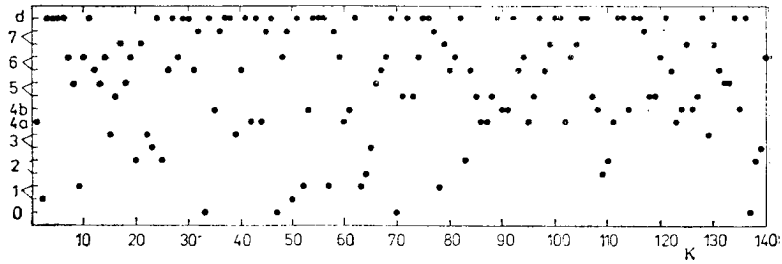


Рис. 5.1. Диаграмма успешности применения метода Ньютона в зависимости от случайно выбранного начального приближения. K — порядковый номер начального приближения. На вертикальной оси приведены номера полученных решений (см. табл. 5.1 при $N = 4$). Символ d означает расходимость метода от соответствующего начального приближения. Для решений, отмеченных в табл. 5.1 звездочкой, два симметричных решения на рисунке представлены отдельно.

Проиллюстрируем указанный подход на примере, приведенном в гл. 4 в качестве *задачи* 8 для случая $N = 2, 3, 4$. В табл. 5.1 представлены решения для двух, трех и четырех связанных между собой реакторов (т. е. для $n = 4, 6, 8$ в системе (5.1.3)). Число решений при этом оказывается соответственно равным 3, 7 и 15 [5.2]. В случае цепочки из большего числа реакторов количество различных стационарных решений будет еще больше.

Начальные приближения $\mathbf{x}^0$ для метода Ньютона выбирались случайным образом из интервалов

$$x_i^0 \in (0,\ 10), \quad i = 1,\ 2,\ \ldots,\ n. \tag{5.1.8}$$

Примеры расчета итераций приведены в табл. 5.2. На рис. 5.1 изображена диаграмма успешности этого подхода для случая четырех связанных между собой реакторов ($N = 4$).

Таблица 5.1. Стационарные решения в случае модели линейного каскада связанных друг с другом реакторов (*задача* 8: $A = 2$, $B = 6$, $D_1 = 0{,}4$, $D_2 = 4$). В первой строке каждой ячейки указана величина концентрации X, во второй — величина концентрации Y.

Количество реакторов	Номер стационарного решения	Реактор 1	2	3	4	Устойчивость решения (S — устойчивое, N — неустойчивое)
Два реактора ($N = 2$)	0	2,00 3,00	2,00 3,00			N
	1*	0,57 2,61	3,43 1,97			S
Три реактора ($N = 3$)	0	2,00 3,00	2,00 3,00	2,00 3,00		N
	1*	4,96 1,40	0,68 2,57	0,36 3,01		S
	2*	2,81 2,24	2,66 2,46	0,53 3,04		N
	3	2,64 2,47	0,71 2,83	2,64 2,47		N
	4	0,66 2,29	4,69 1,55	0,66 2,29		S
Четыре реактора ($N = 4$)	0	2,00 3,00	2,00 3,00	2,00 3,00	2,00 3,00	N
	1*	0,36 4,02	0,39 3,61	0,87 2,75	6,38 1,10	S
	2*	0,37 3,70	0,54 3,27	2,82 2,27	4,27 1,56	N
	3*	0,54 3,10	2,73 2,52	0,81 2,53	3,92 1,74	N
	4a	3,43 1,97	0,57 2,61	0,57 2,61	3,43 1,97	N
	4b	0,57 2,61	3,43 1,97	3,43 1,97	0,57 2,61	N
	5*	0,51 3,38	2,25 2,84	2,46 2,50	2,77 2,28	N
	6*	2,29 2,80	0,68 3,03	2,50 2,59	2,53 2,46	N
	7*	0,36 2,91	0,78 2,46	6,10 1,21	0,76 2,05	S

* Каждое решение, отмеченное звездочкой, задает по существу два решения. Второе решение, симметричное к указанному в таблице, например для N=4, мы получаем, меняя местами значения концентраций в первом и в четвертом, а также во втором и в третьем реакторах.

Таблица 5.2. Поведение итераций в процессе вычисления стационарных решений методом Ньютона (*задача* 8: $N = 4$, $A = 2$, $B = 6$, $D_1 = 0{,}4$, $D_2 = 4$).

Итерация	X_1	Y_1	X_2	Y_2	X_3	Y_3	X_4	Y_4
0	3,195	0,769	3,964	4,732	8,696	3,428	2,124	5,553
1	11,115	4,012	0,985	7,304	−4,449	9,873	0,349	9,806
2	11,171	0,610	0,757	3,944	−2,768	6,279	−1,161	6,908
3	8,566	0,733	1,192	3,152	−1,334	4,844	−0,424	5,359
4	7,598	0,910	1,701	2,999	−0,362	4,180	0,064	4,621
5	6,652	1,039	0,875	2,779	0,172	3,371	0,301	4,143
6	6,405	1,095	0,871	2,750	0,365	3,620	0,359	4,030
7	6,377	1,103	0,870	2,748	0,390	3,608	0,363	4,020
8	6,377	1,103	0,870	2,748	0,390	3,607	0,363	4,019

Область сходимости, т. е. область подходящих начальных приближений, в некоторых случаях может оказаться очень мала. Иногда в подобной ситуации используется метод продолжения решения из области (характеризуемой определенным значением выбранного параметра), в которой решение отыскать сравнительно легко, в область, где нахождение решения представляет определенные трудности. Параметр, по которому мы продолжаем решение, может быть реальным (физическим) параметром задачи, либо может искусственно вводиться в постановку задачи. (Иногда мы говорим о погружении исходной задачи в класс задач, зависящих от параметра.) Первый из этих подходов будет рассмотрен в § 5.2, а второй, так называемый *метод введения искусственного параметра*, кратко описывается ниже.

Запишем систему (5.1.3) в векторной форме

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}; \tag{5.1.9}$$

при этом значение параметра α мы считаем фиксированным и поэтому в уравнениях его не указываем. Идея метода введения искусственного параметра заключается в построении функции $\mathbf{H}(\tau, \mathbf{x})$, зависящей от некоторого вещественного параметра τ, причем обычно $\tau \in [0, 1]$. Функция $\mathbf{H}$ выбирается таким образом, чтобы решение уравнения

$$\mathbf{H}(0, \mathbf{x}) = \mathbf{0} \tag{5.1.10}$$

можно было построить по возможности просто, например, не прибегая к процессу итераций (это решение мы обозначим через $\mathbf{x}_0$). Далее, уравнение

$$\mathbf{H}(1, \mathbf{x}) = \mathbf{0} \tag{5.1.11}$$

должно иметь те же корни, что и уравнение (5.1.9), например

$$\mathbf{H}(1, \mathbf{x}) = \mathbf{f}(\mathbf{x}). \tag{5.1.12}$$

Если существует непрерывная зависимость $\mathbf{x}(\tau)$, описывающая решение уравнения

$$\mathbf{H}(\tau, \mathbf{x}(\tau)) = \mathbf{0}, \quad \tau \in [0, 1], \tag{5.1.13}$$

с условием $\mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0$, то $\mathbf{x}(1)$ является решением исходного уравнения (5.1.9). В принципе мы можем «протянуть» решение $\mathbf{x}$ от $\tau = 0$ (когда $\mathbf{x} = \mathbf{x}_0$) до $\tau = 1$ двумя способами. Первый из них заключается в последовательном использовании какого-нибудь итерационного метода (например, метода Ньютона) в узлах сетки $\tau_0 = 0, \tau_1, \tau_2, \ldots, \tau_m = 1$. В качестве начального приближения процесса итераций для $\tau = \tau_j$ можно выбрать решение $\mathbf{x}(\tau_{j-1})$. Второй способ основан на дифференцировании тождества (5.1.13) по τ, т. е. зависимость $\mathbf{x}(\tau)$ ищется как решение системы дифференциальных уравнений

$$\frac{d\mathbf{x}}{d\tau} = -\left[\mathbf{H}'_{\mathbf{x}}(\tau, \mathbf{x})\right]^{-1} \mathbf{H}'_{\tau}(\tau, \mathbf{x}) \tag{5.1.14}$$

с начальным условием $\mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0$.

Укажем две возможности выбрать функцию $\mathbf{H}$:

$$\mathbf{H}(\tau, \mathbf{x}) = \mathbf{f}(\mathbf{x}) + (\tau - 1)\mathbf{f}(\mathbf{x}_0) \tag{5.1.15}$$

и

$$\mathbf{H}(\tau, \mathbf{x}) = (1 - \tau)(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) + \tau\mathbf{f}(\mathbf{x}). \tag{5.1.16}$$

Представление (5.1.15) тесно связано с методом Ньютона. (Чтобы убедиться в этом, нужно, взяв $\mathbf{H}$ в виде (5.1.15), решить дифференциальное уравнение (5.1.14) методом Эйлера с шагом $h = 1$.) Более подробный анализ различных вариантов метода введения искусственного параметра читатель может найти в книгах [5.1, 5.3]. Описание некоторых других подходов и их связь с итерационными методами рассмотрены в работе [5.4].

5.2. ЗАВИСИМОСТЬ СТАЦИОНАРНЫХ РЕШЕНИЙ ОТ ПАРАМЕТРА — ДИАГРАММА РЕШЕНИЙ

В предыдущем параграфе было показано, как находить стационарные решения системы (5.1.1) при фиксированных значениях параметров. Если мы хотим изучить поведение динамической модели в целом, то обычно оказывается недостаточно знать ее характеристики только при одном конкретном значении того или иного параметра — нужно иметь представление о характере поведения модели в зависимости от значений параметров, изменяющихся в некотором диапазоне.

В этом параграфе мы займемся построением зависимости стационарных решений от одного (скалярного) параметра α, входящего в систему (5.1.3). Найденные зависимости, представленные в виде соответствующих графиков, мы будем называть диаграммой решений (см. гл. 3, § 3.1).

Простейший метод построения диаграммы заключается в последовательном использовании итерационной процедуры, описанной в § 5.1. Так, например, выберем в интервале изменения значений параметра α узловые точки $\alpha^0 < \alpha^1 < \ldots < \alpha^k$ и применим последовательно метод Ньютона для указанных значений α. В качестве начального приближения для нашего итерационного процесса при $\alpha = \alpha^i$ мы будем выбирать решение $\mathbf{x}$, найденное при $\alpha = \alpha^{i-1}$, т. е. $\mathbf{x}(\alpha^{i-1})$. Если сетка значений параметра α достаточно густа и на полученных зависимостях отсутствуют точки бифуркации, то для обеспечения сходимости метода Ньютона при каждом значении α оказывается достаточным одной-двух итераций. Указанная методика не позволяет, однако, переходить через точки поворота на диаграмме решений (см. § 3.1), а в окрестности точек ветвления процесс может даже расходиться. Поскольку метод последовательных шагов не является универсальным, были развиты методики, с помощью которых построение зависимости решения от параметра в целом происходит более или менее автоматически. Основные принципы этих методик будут рассмотрены в последующих пунктах.

5.2.1. Отображение параметра

Во многих случаях оказывается возможным использовать некоторые специальные свойства системы (5.1.3), которые позволяют разработать тот или иной неитерационный алгоритм (или же, при необходимости, итерационный, но в пространстве существенно меньшей размерности). Рассмотрим, например, случай, когда система (5.1.3) нелинейна лишь по одной переменной x_k и линейна по всем другим переменным, а также по параметру α. Тогда для построения диаграммы решений мы можем использовать следующий подход. Выберем последовательность значений переменной x_k (достаточно близких друг к другу). Для каждого выбранного значения переменной x_k решим систему линейных алгебраических уравнений (5.1.3) относительно неизвестных $x_1, x_2, \ldots, x_{k-1}, x_{k+1}, \ldots, x_n, \alpha$ (например, методом исключения Гаусса) — в результате мы получим одну из точек диаграммы решений. Существуют и другие возможности отображения параметра, когда, например, мы пользуемся тем, что умеем решать квадратное уравнение, можем построить соответствующую обратную функцию и т. д. Используемый при этом

подход всегда зависит от конкретного вида уравнений, и мы продемонстрируем указанную методику на нескольких примерах.

Рассмотрим *задачу* 1 (см. гл. 4, п. 4.2.1). Стационарное состояние в данном случае описывается уравнениями

$$-\Lambda x + \mathrm{Da}\,(1-x)\exp\left(\frac{\Theta}{1+\Theta/\gamma}\right) = 0, \tag{5.2.1}$$

$$-\Lambda\Theta + B\,\mathrm{Da}\,(1-x)\exp\left(\frac{\Theta}{1+\Theta/\gamma}\right) - \beta(\Theta-\Theta_c) = 0, \tag{5.2.2}$$

где x и Θ — переменные состояния. Умножая уравнение (5.2.1) на параметр B и вычитая полученный результат из уравнения (5.2.2), после простых преобразований мы получаем соотношение

$$x = \frac{\Theta}{B} + \frac{\beta(\Theta-\Theta_c)}{B\Lambda}, \tag{5.2.3}$$

которое позволяет свести систему двух уравнений (5.2.1) и (5.2.2) к одному нелинейному уравнению для переменной Θ:

$$-\Delta\Theta + \mathrm{Da}\left(B - \Theta - \frac{\beta(\Theta-\Theta_c)}{\Lambda}\right)\exp\left(\frac{\Theta}{1+\Theta/\gamma}\right) - \beta(\Theta+\Theta_c) = 0. \tag{5.2.4}$$

Уравнение (5.2.4) зависит от переменной Θ нелинейно, тогда как параметры Da [1], B, β и Θ_c входят в него линейным образом. Параметр Λ (после умножения обеих частей уравнения на Λ) входит в полученное уравнение квадратичным образом, а параметр γ — нелинейно. Для нахождения зависимости решения от параметра Da (при фиксированных значениях остальных параметров) можно использовать следующую процедуру:

1. Выбираем значение $\Theta\,(\Theta > \Theta_c)$..
2. Из уравнения (5.2.4) подсчитываем значение параметра Da.
3. Из уравнения (5.2.3) находим значение другой переменной состояния x.

Пример одного из вариантов расчета представлен в табл. 5.3. Читатель может легко построить соответствующие алгоритмы для отображения параметров B, β и Θ_c, а если воспользоваться решением соответствующего квадратного уравнения, то и для отображения параметра Λ.

Рассмотрим теперь *задачу* 1 в форме (P1-6), (P1-7), введя параметры τ (время задержки в реакторе) и a по формулам $\beta = a\tau$, $\mathrm{Da} = k_0\tau$. Совершенно аналогично можно построить ал-

[1] Напомним, что Da — обозначение одного параметра (числа Дамкёлера), а не произведение $D\cdot a$. — *Прим. ред.*

Таблица 5.3. Отображение параметра Da в *задаче* 1 ($\gamma = 20$, $B = 10$, $\Lambda = 1$, $\Theta_c = -5$, $\beta = 0{,}6$).[1)]

Θ	Da	x	λ_1	λ_2	Тип
−1,85	0,03084	0,004	−1,0	−1,6	SU
−1,5	0,32306	0,060	−1,0±0,4i		SO
−0,8	0,47798	0,172	−0,08	−0,87	SU
−0,75	0,47849	0,180	−0,01	−0,87	SU
−0,7	0,47823	1,188	0,056	−0,87	S
0,0	0,42857	0,300	0,83	−0,86	S
0,5	0,37631	0,380	1,2	−0,84	S
1,0	0,32866	0,460	1,5	−0,8	S
1,5	0,29083	0,540	1,6	−0,73	S
2,0	0,26484	0,620	1,5	−0,61	S
2,4	0,25394	0,684	1,1	−0,37	S
2,55	0,25260	0,708	0,68	−0,13	S
2,6	0,25254	0,716	0,42	0,06	NU
2,65	0,25270	0,724	0,21±0,66i		NO
2,85	0,25572	0,756	0,047	±1,7i	NO
2,9	0,25727	0,764	−0,005	±2,0i	SO
3,2	0,27374	0,812	−0,44	±3,0i	SO
3,5	0,31241	0,860	−1,3	±3,8i	SO
3,8	0,40502	0,908	−3,0	±2,7i	SO
4,0	0,55889	0,940	−2,1	−9,7	SU
4,2	1,0790	0,972	−1,7	−29	SU
4,35	6,9904	0,996	−1,6	−240	SU

[1)] См. п. 5.3.4 (S — седло, SU — устойчивый узел, NU — неустойчивый узел, SO — устойчивый фокус, NO — неустойчивый фокус, $\lambda_{1,2}$ — собственные числа матрицы Якоби).

горитм для отображения параметра τ. Фиксируя значение Θ, мы получаем для τ квадратное уравнение вида

$$\left[\frac{-k_0 a(\Theta-\Theta_c)}{\Lambda}\exp\left(\frac{\Theta}{1+\Theta/\gamma}\right)\right]\tau^2+$$
$$+\left[k_0(B-\Theta)\exp\left(\frac{\Theta}{1+\Theta/\gamma}\right)-a(\Theta-\Theta_c)\right]\tau+[-\Lambda\Theta]=0. \quad (5.2.5)$$

Диаграмма решений, построенная с помощью этого уравнения для нескольких различных значений параметра a, представлена на рис. 5.2.

Читатель может легко вывести аналогичные алгоритмы для *задач* 5 и 6. В обоих случаях фиксируются значения концентрации субстрата C_S и подсчитывается значение некоторого параметра задачи. В *задаче* 6 это могут быть параметры $\hat{\mu}$, V/F, K_s, K_i. В случае же *задачи* 5 соответствующая процедура оказывается более сложной, и мы приведем лишь краткое ее описание.

0. Левые части соотношений (P5-1)—(P5-6) полагаем равными нулю. При этом для стационарных значений c_z и $c_т$ мы получим $c_z = c_{z0}$, $c_т = c_{т0}$.
1. Выбираем значение c_s.
2. Из уравнений (P5-1) и (P5-2) вычисляем c_x и μ.
3. Подставляя результат в уравнение (P5-3), находим линейную зависимость p_c от c_c, которую затем подставляем

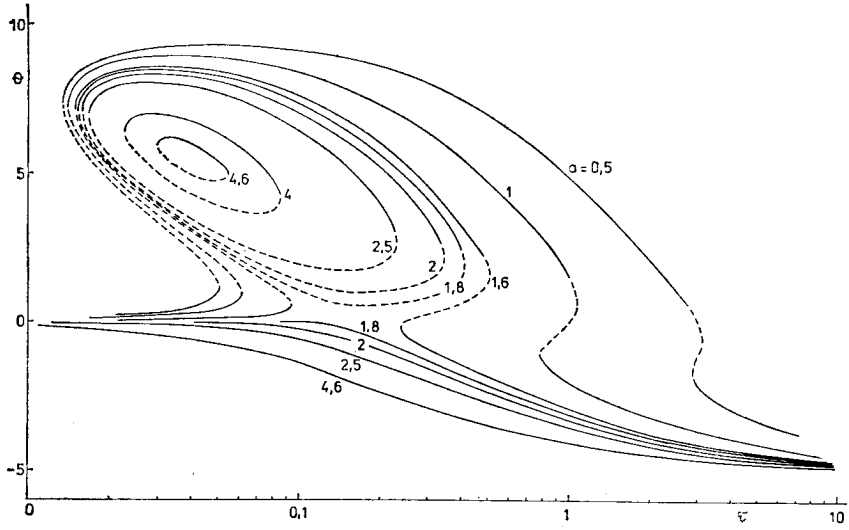


Рис. 5.2. Диаграмма стационарных решений *задачи* 1, $\gamma = 20$, $B = 10$, $\Lambda = 1$, $\Theta_c = -5$, $k_0 = 1$; сплошные линии — устойчивые решения, штриховые — неустойчивые решения.

в соотношение (P5-4). При этом мы получаем квадратное уравнение относительно c_c. Физически допустимые решения этого квадратного уравнения дают нам окончательные значения c_c, p_c.

4. Из уравнения (P5-9) для μ (величину μ мы уже определили на этапе 2) можно найти теперь один из параметров $\hat{\mu}$, K_s, K_i, K_a, K_1 в предположении, что остальные параметры заданы.

Как уже говорилось, метод отображения параметра не обладает достаточной общностью. В связи с этим были развиты методы общего характера, которые мы рассмотрим в следующих пунктах.

5.2.2. Метод дифференцирования по параметру

Пусть в точке $(\mathbf{x}^0, \alpha^0)$ выполнены условия теоремы о неявной функции: $\mathbf{f}(\mathbf{x}^0, \alpha^0) = \mathbf{0}$ и матрица Якоби $\mathbf{J}(\mathbf{x}, \alpha) = [\partial f_i / \partial x_j]$ невырожденная.

Тогда для функции $x(\alpha)$, задаваемой уравнением $\mathbf{f}(\mathbf{x}, \alpha) = \mathbf{0}$,

$$\frac{d\mathbf{x}}{d\alpha} = -[\mathbf{J}(\mathbf{x}, \alpha)]^{-1} \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \alpha}(\mathbf{x}, \alpha). \tag{5.2.6}$$

Соотношение (5.2.6) можно трактовать как систему дифференциальных уравнений для нахождения функции $\mathbf{x}(\alpha)$ с начальным условием

$$\mathbf{x}(\alpha_0) = \mathbf{x}^0. \tag{5.2.7}$$

Если матрица $\mathbf{J}$ на промежутке $[\alpha^0, \alpha^1]$ оказывается регулярной (имеющей обратную), то зависимость решения от параметра $\mathbf{x}(\alpha)$, найденная путем интегрирования этой системы, будет удовлетворять соотношению

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}(\alpha), \alpha) = \mathbf{0}, \quad \alpha \in [\alpha^0, \alpha^1],$$

поскольку

$$\frac{d}{d\alpha} \mathbf{f}(\mathbf{x}(\alpha), \alpha) = \mathbf{J}(\mathbf{x}(\alpha), \alpha) \cdot \frac{d\mathbf{x}}{d\alpha} + \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \alpha}(\mathbf{x}(\alpha), \alpha) \equiv \mathbf{0}.$$

В критических точках диаграммы решений матрица $\mathbf{J}$ оказывается вырожденной, и потому указанный подход, т. е. численное интегрирование системы дифференциальных уравнений (5.2.6), отказывает в тех же точках, что и процедура последовательного применения метода Ньютона [1]. Однако этот метод можно модифицировать путем введения нового параметра. Обычно в качестве такого параметра выбирается длина дуги на кривой $\mathbf{f}(\mathbf{x}, \alpha) = \mathbf{0}$ в $(n+1)$-мерном пространстве переменных $x_1, x_2, \ldots, x_n, \alpha$. [2] Обозначим ее через z; тогда, дифференцируя тождество $\mathbf{f}(\mathbf{x}(z), \alpha(z)) = \mathbf{0}$ по z, находим

$$\frac{df_i}{dz} = \sum_{j=1}^{n} \frac{\partial f_i}{\partial x_j} \frac{dx_j}{dz} + \frac{\partial f_i}{\partial \alpha} \frac{d\alpha}{dz} = 0, \quad i = 1, 2, \ldots, n. \tag{5.2.8}$$

При этом уравнение

$$\left(\frac{dx_1}{dz}\right)^2 + \ldots + \left(\frac{dx_n}{dz}\right)^2 + \left(\frac{d\alpha}{dz}\right)^2 = 1 \tag{5.2.9}$$

---

[1] Точнее, в этих точках теряет смысл само уравнение (5.2.6). — *Прим. ред.*

[2] Дело, конечно, не в выборе параметра, а в рассмотрении $\mathbf{x}$ и α как *равноправных* переменных. Эта, почти очевидная, мысль не требует обязательного рассмотрения дифференциального уравнения (5.2.6). — *Прим. ред.*

определяет параметр z как длину дуги кривой. Начальное условие (5.2.10) теперь принимает вид

$$z=0:\ \mathbf{x}=\mathbf{x}^0,\quad \alpha=\alpha^0. \tag{5.2.10}$$

Соотношения (5.2.8) можно рассматривать как систему n линейных алгебраических уравнений относительно $n+1$ неизвестных dx_1/dz, dx_2/dz, ..., dx_n/dz, $d\alpha/dz$. Мы можем решить эту систему так, чтобы найти зависимость выбранных n неизвестных от заданной неизвестной dx_k/dz, где k фиксировано. В дальнейшем для упрощения записи будем обозначать

$$x_{n+1}=\alpha. \tag{5.2.11}$$

Для построения указанной зависимости необходимо, чтобы матрица

$$\mathbf{J}_k=\begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1}, & \ldots, & \frac{\partial f_1}{\partial x_{k-1}}, & \frac{\partial f_1}{\partial x_{k+1}}, & \ldots, & \frac{\partial f_1}{\partial x_{n+1}} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1}, & \ldots, & \frac{\partial f_n}{\partial x_{k-1}}, & \frac{\partial f_n}{\partial x_{k+1}}, & \ldots, & \frac{\partial f_n}{\partial x_{n+1}} \end{bmatrix}, \tag{5.2.12}$$

которая получается из матрицы системы (5.2.8) $\tilde{\mathbf{J}}$ вычеркиванием k-го столбца (квадратная матрица размером $n\times n$), оказалась невырожденной.

В точке поворота всегда можно выбрать индекс k так, чтобы матрица $\mathbf{J}_k$ была невырожденной; в точке ветвления, наоборот, все $\mathbf{J}_k$ вырождены. Если матрица $\mathbf{J}_k$ — невырожденная, то систему (5.2.8) можно представить в виде

$$\frac{dx_i}{dz}=\beta_i\frac{dx_k}{dz},\quad i=1,\ 2,\ \ldots,\ k-1,\ k+1,\ \ldots,\ n+1, \tag{5.2.13}$$

где коэффициенты β_i подсчитываются методом исключения Гаусса. Выбор индекса k представляет собой самостоятельную проблему. Мы либо фиксируем его заранее, либо видоизменяем алгоритм исключения Гаусса с выбором главного элемента для решения (неквадратной) системы n линейных алгебраических уравнений (5.2.12) относительно $n+1$ неизвестных. При этом неизвестная, в столбце которой отсутствует главный элемент, есть неизвестная x_k [1].

Подставим найденные зависимости (5.2.13) в уравнение (5.2.9):

$$\frac{dx_k}{dz}=\pm\left[1+\sum_{\substack{i=1\\ i\neq k}}^{n+1}\beta_i^2\right]^{-1/2}. \tag{5.2.14}$$

[1] Речь идет о выборе главного элемента «по строке». При этом переменные могут быть предварительно масштабированы, см. [5.10]. — *Прим. ред.*

Таким образом, мы определили производную dx_k/dz с точностью до знака. Если индекс k остается неизменным для всего продолжения, то знак в формуле (5.2.14) в процессе продолжения не меняется[1]. Отсюда следует, что тогда x_k во время всего процесса продолжения должно либо постоянно возрастать, либо постоянно убывать. Однако это не всегда бывает так, и тогда фиксированный выбор k невозможен. Поэтому в практических ситуациях выбор k осуществляется адаптивным образом — значение индекса k получается в результате применения метода исключения Гаусса (см. выше). При этом знак в формуле (5.2.14) будет определяться тем, возрастает или убывает в этот момент выбранная величина x_k вдоль кривой в направлении возрастания z. Поэтому мы введем «знаковые» переменные N_i, положив

$$N_i = \operatorname{sign}\left(\frac{dx_i}{dz}\right), \quad i = 1, \ldots, n+1. \tag{5.2.15}$$

Указанные «параметры направления» будут вычисляться на каждом шаге процесса продолжения. Выбор знака в формуле (5.2.14) определяется, следовательно, соответствующей величиной N_k, взятой с предыдущего шага. Отметим, что оставшиеся производные dx_i/dz $(i \neq k)$ вычисляются по формуле (5.2.13), где коэффициенты β_i известны. Затем после вычисления этих производных мы вновь вычисляем параметры направления N_i и делаем шаг по параметру z. Соответствующая расчетная схема представлена на рис. 5.3, причем для интегрирования дифференциальных уравнений (5.2.13) и (5.2.14) в данном случае используется обычный метод Эйлера.

Проиллюстрируем использование описанного метода продолжения на примере нахождения зависимости стационарного решения *задачи* 1 от времени задержки τ (ср. рис. 5.2). Уравнения (5.1.3) в указанном случае переписываются в виде

$$\begin{aligned} f_1(x, \Theta, \tau) &= -\Lambda x + k_0\tau(1-x)\exp\frac{\Theta}{1+\Theta/\gamma} = 0, \\ f_2(x, \Theta, \tau) &= -\Lambda\Theta + k_0\tau B(1-x)\exp\frac{\Theta}{1+\Theta/\gamma} - a\tau(\Theta-\Theta_c) = 0. \end{aligned} \tag{5.2.16}$$

Начальное условие (5.2.10) при $\tau = 0$ принимает вид

$$z = 0\colon\ x = 0, \quad \Theta = 0, \quad \tau = 0,$$

[1] Пока $\mathbf{J}_k$ невырожденна, β_i конечны и $\dfrac{dx_k}{dz}$ не обращается в 0. — *Прим. ред.*

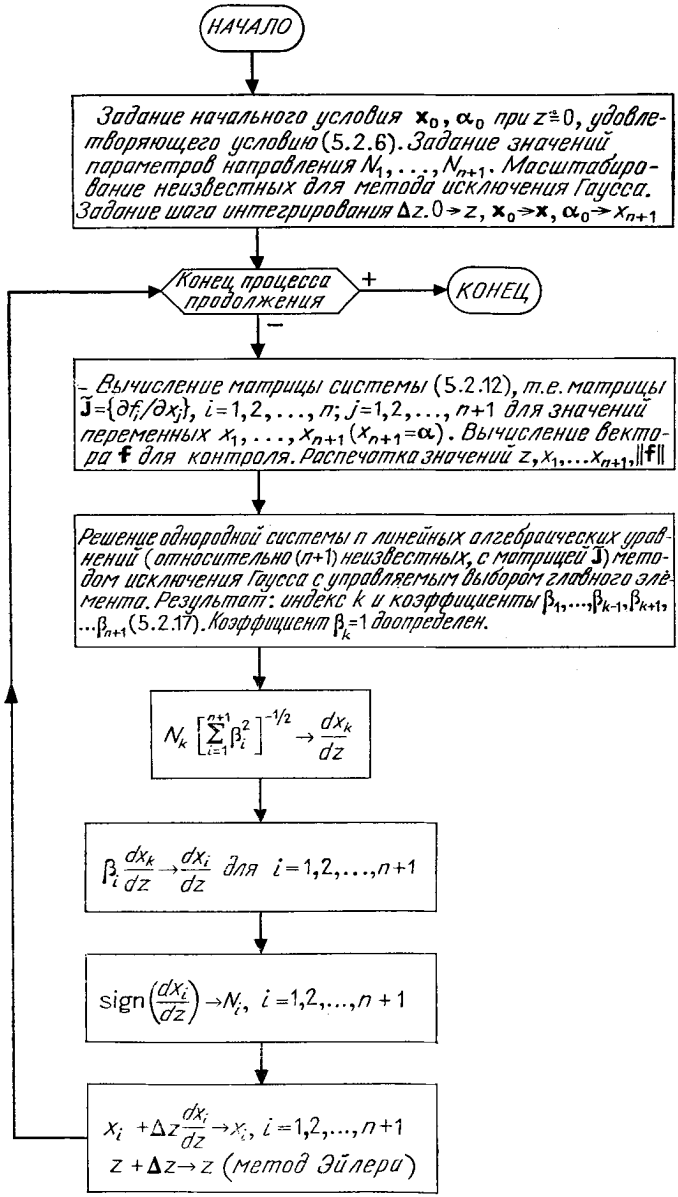


Рис. 5.3. Схема метода дифференцирования по длине дуги и метода продолжения Эйлера.

Таблица 5.4. Результаты вычислений по методу продолжения с помощью алгоритма, представленного на рис. 5.3 (*задача* 1: $\gamma = 20$, $B = 10$, $\Lambda = 1$, $\Theta = -5$, $k_0 = 1$, $a = 1$). Исходные значения коэффициентов направления: $N_1 = 1$, $N_2 = 1$, $N_3 = 1$, масштабные коэффициенты в методе Гаусса [1] $p_1 = 1$, $p_2 = 0{,}1$, $p_3 = 1$, $\Delta z = 0{,}01$.

z	x	Θ	τ	$\|f\|$	N_1	N_2	N_3
0	0,0000	0,0000	0,0000	0,0	1	1	1
0,5	0,0780	0,4905	0,0527	4,9E — 3	1	1	1
1	0,1355	0,9870	0,0615	7,5E — 3	1	1	—1
1,5	0,1857	1,484	0,0575	8,6E — 3	1	1	—1
2,0	0,2333	1,982	0,0503	8,9E — 3	1	1	—1
3,0	0,3268	2,978	0,0364	7,9E — 3	1	1	—1
4,0	0,4210	3,973	0,0265	5,7E — 3	1	1	—1
5,0	0,5168	4,969	0,0200	2,9E — 3	1	1	—1
7,0	0,7129	6,959	0,0142	4,6E — 3	1	1	—1
8,0	0,8145	7,954	0,0148	1,3E — 2	1	1	1
9,0	0,9366	8,946	0,0302	1,2E — 1	1	1	1
9,5	0,9743	8,516	0,0908	5,8E — 1	1	—1	1
10,0	0,9778	8,018	0,1352	6,0E — 1	1	—1	1
11,0	0,9779	7,022	0,2292	6,1E — 1	—1	—1	1
13,0	0,9649	5,036	9,4592	6,3E — 1	—1	—1	1
16,0	0,8690	2,076	0,9336	6,7E — 1	—1	—1	1
18,0	0,5883	0,1114	1,127	6,9E — 1	—1	—1	—1
19,0	0,3483	—0,8555	1,044	6,9E — 1	—1	—1	—1
20,0	0,1980	—1,825	1,195	6,9E — 1	—1	—1	1
21,0	0,1381	—2,663	1,724	6,8E — 1	—1	—1	1

	Δz					
	0,2	0,1	0,05	0,02	0,01	0,005
z	5	5	5	5	5	5
x	0,5163	0,5166	0,5167	0,5168	0,5168	0,5168
Θ	4,9664	4,9676	4,9682	4,9685	4,9686	4,9686
τ	0,0201	0,0201	0,0200	0,0200	0,0200	0,0200
$\|f\|$	2,9E — 2	2,2E — 2	1,3E — 2	5,6E — 3	2,9E — 3	1,5E — 3
z	12	12	12	12	12	12
x	0,9665	1,1904	0,9972	0,9997	0,9736	0,9797
Θ	11,814	11,912	11,869	11,818	6,0281	6,3726
τ	—0,1286	—0,0005	—0,1128	—0,1084	0,3360	0,3010
$\|f\|$	8,2E1	1,0E1	1,5E1	1,1E1	6,2E — 1	2,1E0

[1] При выборе «главного» элемента в строке 1 берется $\max\limits_j (p;\ a_{1j})$. Аналогично на следующих шагах метода исключения.

а (расширенная) матрица Якоби $\tilde{\mathbf{J}}$ системы (5.2.16) (если обозначить $E = \exp(\Theta/(1+\Theta/\gamma))$) записывается как

$$\tilde{\mathbf{J}} = \begin{bmatrix} -\Lambda - k_0\tau E, & \dfrac{k_0\tau(1-x)E}{(1+\Theta/\gamma)^2}, & k_0(1-x)E \\ -k_0\tau BE, & -\Lambda + \dfrac{k_0\tau B(1-x)E}{(1+\Theta/\gamma)^2} - a\tau, & k_0B(1-x)E - a(\Theta-\Theta_c) \end{bmatrix}. \tag{5.2.17}$$

Применим теперь вычислительный алгоритм, соответствующий расчетной схеме рис. 5.3, для случая различных шагов интегрирования Δz. Результаты вычислений представлены в табл. 5.4. Первая часть этой таблицы может быть использована для более глубокого уяснения метода. Читатель может легко сопоставить полученные результаты с данными рис. 5.2 для $a = 1$. Вторая часть таблицы характеризует влияние погрешностей аппроксимации при выбранном методе интегрирования. При этом чем меньше шаг интегрирования, тем лучше найденные значения аппроксимируют реальную зависимость. Из таблицы видно, что даже в случае рассматриваемой простой задачи для получения достаточно точных результатов нам пришлось бы выбирать Δz очень малым. Это обусловлено, конечно, в первую очередь низким порядком аппроксимации используемого метода Эйлера (погрешность аппроксимации в этом случае есть $O(\Delta z)$). Если выбрать более эффективный метод интегрирования, например метод Рунге — Кутты 4-го порядка, то результаты окажутся более точными. Полученное решение, однако, также, хотя и в меньшей степени, будет отличаться от истинной зависимости. Вследствие этого представляется необходимым после прохождения некоторого интервала изменения переменной z всегда уточнять решение, т. е. корректировать его так, чтобы выполнялось исходное уравнение (5.1.3), или, для рассматриваемого случая, уравнения (5.2.16). Так появились методы продолжения типа предиктор-корректор, которые мы опишем в следующем пункте.

5.2.3. Алгоритм продолжения типа предиктор-корректор

В принципе существуют две возможности коррекции погрешностей аппроксимации, накапливающихся при продолжении решения с использованием простого предиктора. Первая из них заключается в том, чтобы контролировать, как отличается решение от истинного, например, по норме $\|\mathbf{f}\|$, и когда это отличие превышает некоторый заранее заданный допуск, использовать для уточнения результатов какой-либо итерацион-

ный метод (например, метод Ньютона). При другом подходе также используется метод Ньютона, но после каждого шага предиктора. При этом в методе Ньютона осуществляется лишь такое число итераций, чтобы приращение $\Delta \mathbf{x}$ по соответствующей норме оказалось бы меньше заданной точности вычислений. В обоих подходах уточняются выбранные n из $n+1$ переменных $x_1, \ldots, x_n, x_{n+1} = \alpha$.

Выбор неизменяемой переменной (ее индекса k) не является произвольным: например, в окрестности предельной точки это не может быть α, а в окрестности экстремума x_i это не может быть x_i. Поэтому алгоритм выбирает ее сам, причем одной из возможностей является использование того же самого механизма, что в п. 5.2.2. Диаграмма вычислений для описанного алгоритма продолжения типа предиктор-корректор представлена на рис. 5.4. В работе [5.5] этот алгоритм расписан на языке Фортран, соответствующая подпрограмма называется DERPAR. В данной книге мы будем использовать это название. Отметим, что в этой подпрограмме вместо метода Эйлера в предикторе используются варианты многошагового метода Адамса-Башфорта переменного порядка.

Приведенный алгоритм продолжения беспрепятственно преодолевает точки поворота на зависимостях решения от параметра. В точках же ветвления он обычно дает продолжение первоначальной ветви решения. Продолжение может не удаться, если очередная вычисленная точка окажется слишком близкой к точке ветвления. Сигналом, указывающим, что мы перешли за точку ветвления, может служить изменение знака $\det \mathbf{J}_k$ определителя матрицы $\mathbf{J}_k$. Таким образом, указанный алгоритм формирует зависимость решения от параметра, представляющую собой непрерывную кривую в $(n+1)$-мерном пространстве переменных $x_1, \ldots, x_n, x_{n+1} = \alpha$. Разумеется, алгоритм DERPAR не приспособлен для того, чтобы с его помощью построить всю диаграмму решений целиком. Для каждой изолированной ветви кривой $f(x, \alpha) = 0$ ему нужна новая начальная точка, которую можно получить, например, методом случайного перебора начальных приближений для схемы Ньютона (см. § 5.1). Наконец, отметим, что описанный алгоритм не рассчитан на точное нахождение бифуркационных точек в пространстве $(\mathbf{x}, \alpha)$. Обнаружив такую точку, ее координаты можно точно вычислить с помощью алгоритмов, описанных в п. 5.4.1, и определить затем соответствующие начальные значения для процесса продолжения на остальных ветвях решения (см. п. 5.4.2).

В последнее время был разработан целый ряд методов и алгоритмов, связанных с процессом продолжения (см., например,

работы [5.24], [5.25]), где большей частью используется практически тот же подход, что и в алгоритме DERPAR.

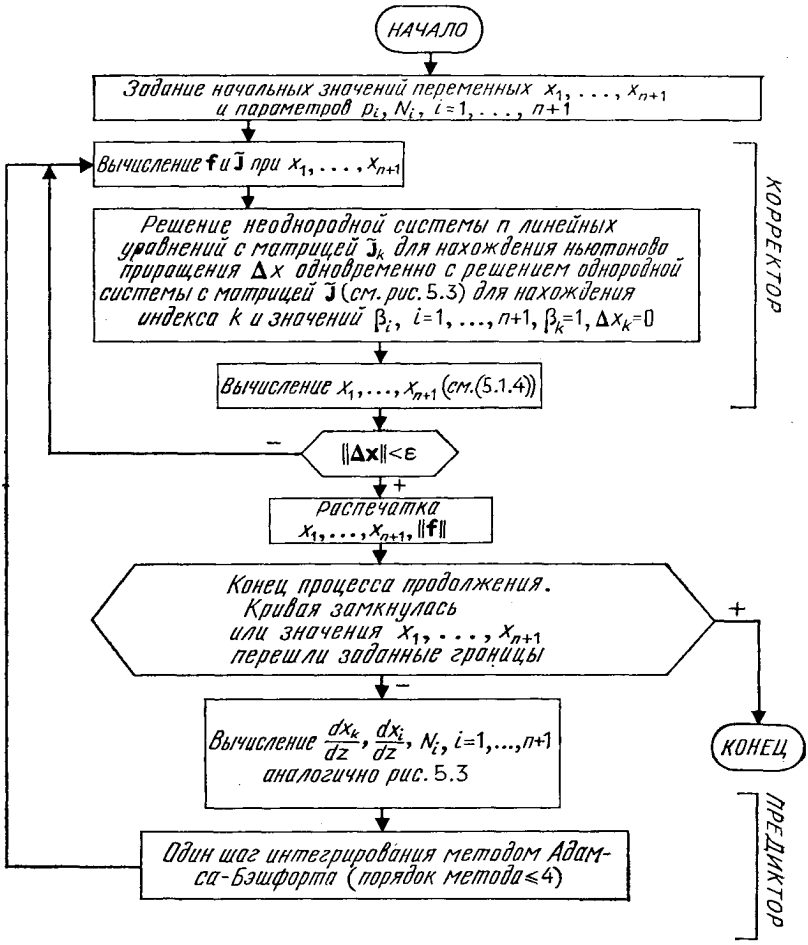


Рис. 5.4. Схема алгоритма продолжения DERPAR.

Результат применения алгоритма продолжения DERPAR для *задачи* 2 [5.5] представлен на рис. 5.5. При этом вся кривая целиком была построена путем одного обращения к алгоритму. Отметим, что на диаграмме решений имеется 6 точек поворота и отсутствуют точки ветвления. Точка пересечения трех ветвей на рисунке не является точкой бифуркации, по-

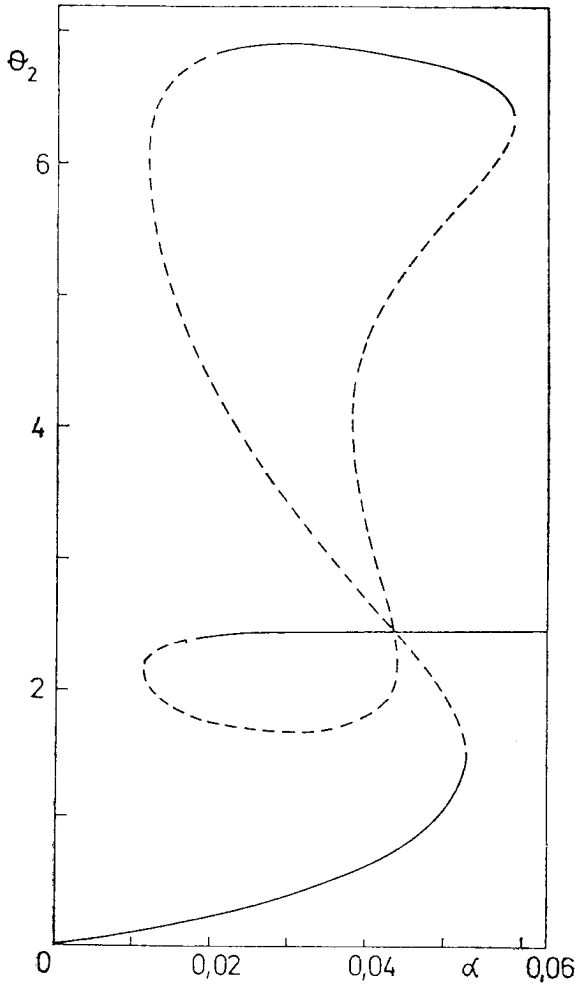


Рис. 5.5. Диаграмма стационарных решений *задачи* 2, $\gamma = 1000$, $B = 22$, $\beta_1 = \beta = 2$, $\Theta_{c_1} = \Theta_{c_2} = 0$: $\Lambda = 1$, $\alpha \equiv \mathrm{Da}_1 = \mathrm{Da}_2$; сплошные линии — устойчивые решения, штриховые — неустойчивые решения.

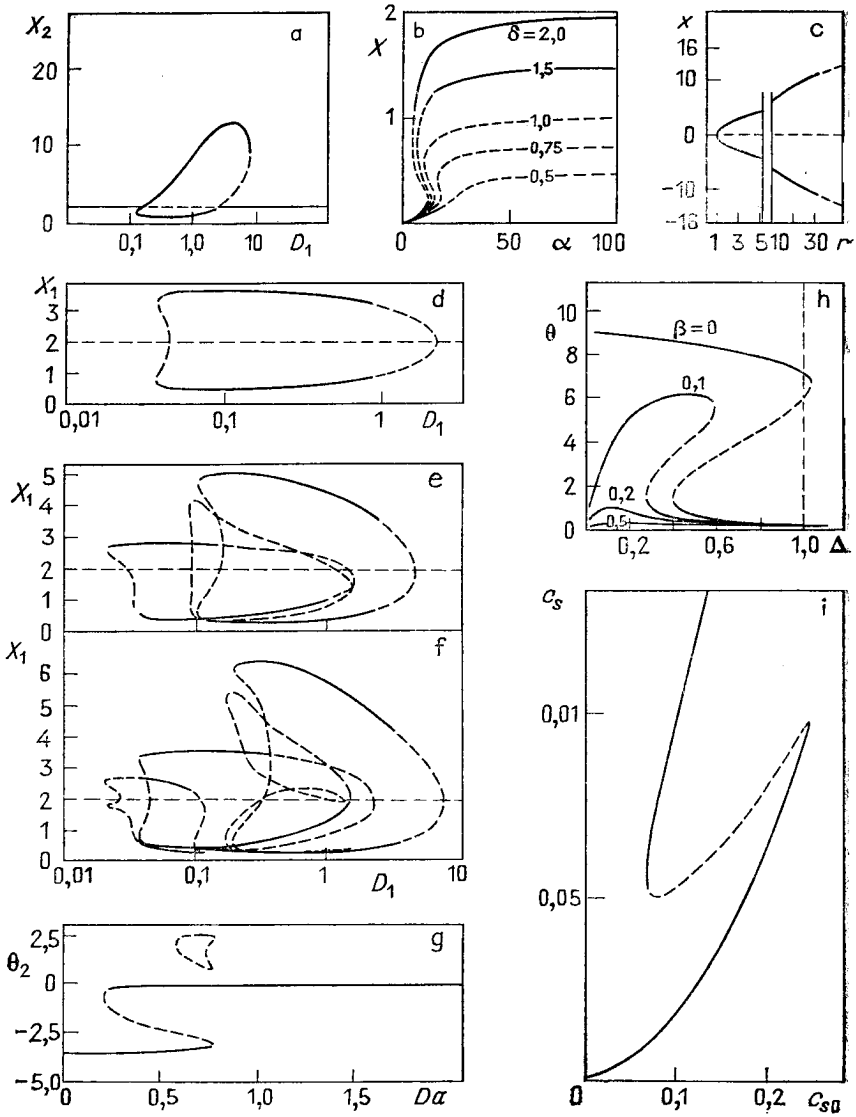


Рис. 5.6. Диаграммы стационарных решений некоторых задач из *главы* 4; сплошные линии — устойчивые решения, штриховые линии — неустойчивые решения. *a*) *Задача* 8, каскад из двух реакторов с однонаправленным течением, уравнения (P8-2*a*), (P8-3*a*), (P8-4), (P8-5); $A = 2$, $B = 4$, $D_2 = 10D_1$. *b*) *Задача* 4; $\gamma = 3$, $\beta = 1{,}5$; $\nu_0 = 0{,}01$. *c*) *Задача* 10; $\sigma = 16$, $b = 4$. *d*) *Задача* 8; $N = 2$, уравнения (P8-2)—(P8-5); $A = 2$, $B = 6$, $D_2 = 10D_1$. *e*) *Задача* 8; $N = 3$, уравнения (P8-7)—(P8-12); $A = 2$, $B = 6$, $D_2 = 10D_1$. *f*) *Задача* 8; $N = 4$, уравнения (P8-7)—(P8-10), (P8-14)—(P8-17), $A = 2$, $B = 6$, $D_2 = 10D_1$. *g*) *Задача* 2; $\gamma = 20$, $\Lambda = 1$, $\Theta_{c_1} = \Theta_{c_2} = -5$, $\beta_1 = \beta_2 = 1$, $B = 15$, $\mathrm{Da} = \mathrm{Da}_1 = \mathrm{Da}_2$. *h*) *Задача* 1; $\gamma = 20$; $B = 9$, $\Theta_c = 0$, $\mathrm{Da} = 0{,}02$. *i*) *Задача* 5; значения параметров см. в табл. 4.1.

скольку значения трех других переменных состояния на каждой из ветвей оказываются разными.

Построение диаграммы решений представляет собой важнейшую задачу анализа нелинейной динамической системы[1]. Читателю, который хочет практически освоить эту проблематику, мы советуем рассчитать несколько диаграмм решений самостоятельно. На рис. 5.6 изображены 9 диаграмм решений для различных задач, рассмотренных в гл. 4. Диаграммы решений, представленные на рис. 5.6b, h, i, можно получить с помощью отображения соответствующего параметра. Диаграмму на рис. 5.6c можно построить аналитически. Начальные значения для продолжения решений на рис. 5.6d, e, f читатель найдет в табл. 5.1 при $D_1 = 0{,}4$.

5.3. ИССЛЕДОВАНИЕ УСТОЙЧИВОСТИ СТАЦИОНАРНЫХ РЕШЕНИЙ

В этом параграфе, который носит вспомогательный характер, мы опишем методику исследования устойчивости стационарных решений по линейному приближению. Как известно, устойчивость решения зависит от собственных чисел матрицы линеаризованной системы. Мы коротко рассмотрим методы нахождения коэффициентов характеристического многочлена матрицы и приведем критерий устойчивости Рауса — Гурвица. В дальнейшем мы используем характеристический многочлен при нахождении бифуркационных точек (§§ 5.4, 5.5, 5.8), а также для определения устойчивости периодических решений (§ 5.8). Наконец, мы напомним о методе нахождения собственных чисел матрицы непосредственно как корней характеристического многочлена, что является более предпочтительным при небольших размерах системы.

5.3.1. Линейные уравнения

Система линейных дифференциальных уравнений с постоянными коэффициентами

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{A}\mathbf{x} \tag{5.3.1}$$

имеет (в случае невырожденной матрицы $\mathbf{A}$) единственное стационарное решение $\mathbf{x} = 0$. Если у матрицы $\mathbf{A}$ нет кратных

[1] Во многих задачах нахождение стационарных решений есть лишь первый шаг, основной же интерес представляют периодические (или еще более сложные) решения. — *Прим. ред.*

собственных значений, то решение системы (5.3.1) можно представить в виде

$$\mathbf{x}(t)=\sum_{i=1}^{n} C_i [\ldots]_i e^{\operatorname{Re}\lambda_i t}, \tag{5.3.2}$$

где в квадратных скобках стоит либо собственный вектор матрицы $\mathbf{A}$, соответствующий вещественному собственному числу λ_i, либо ограниченная векторная функция переменной t, если λ_i — мнимое число. Постоянные C_i определяются начальным условием $\mathbf{x}(0)$. Из разложения (5.3.2) следует, что устойчивость (в данном случае глобальная) стационарного решения системы (5.3.1) определяется вещественными частями собственных чисел λ_i. Если для любого собственного числа матрицы $\mathbf{A}$ имеет место условие

$$\operatorname{Re}\lambda_i<0, \quad i=1, \ldots, n, \tag{5.3.3}$$

то нулевое стационарное решение является асимптотически устойчивым; в частности, для всякого решения системы (5.3.1) выполняется условие

$$\lim_{t\to\infty} \|\mathbf{x}(t)\|=0. \tag{5.3.4}$$

Если какое-нибудь собственное число имеет положительную вещественную часть, то нулевое решение, очевидно, неустойчиво: существуют решения $\mathbf{x}(t)$, для которых $\|\mathbf{x}(t)\|\to\infty$ при $t\to\infty$ (и сколь угодно малых $\mathbf{x}(0)$). Эти утверждения справедливы и для случая кратных собственных чисел. При этом в квадратных скобках в разложении (5.3.2) появляются многочлены от t, однако, как известно, экспоненциальная функция убывает (или возрастает) быстрее, чем многочлен любого порядка.

5.3.2. Характеристический многочлен

Собственные числа матрицы $\mathbf{A}$ являются корнями характеристического многочлена

$$P(\lambda)=(-1)^n \det(\mathbf{A}-\lambda\mathbf{I})=\lambda^n+a_1\lambda^{n-1}+\ldots$$
$$\ldots+a_{n-1}\lambda+a_n. \tag{5.3.5}$$

Для $n=2$ или 3 мы можем получить характеристический многочлен прямо из определения детерминанта. Для больших же значений n этот процесс оказывается очень трудоемким и неудобным даже при использовании ЭВМ.

Существует целый ряд методов для вычисления коэффициентов характеристического многочлена (см., например, ра-

боты [5.6, 5.7, 5.8]). Ниже мы рассмотрим только два из них, наиболее простые с вычислительной точки зрения — это метод Крылова и метод интерполяции.

Метод Крылова основывается на тождестве Гамильтона — Кэли

$$P(\mathbf{A}) = \mathbf{A}^n + a_1\mathbf{A}^{n-1} + \ldots + a_{n-1}\mathbf{A} + a_n\mathbf{I} = 0. \qquad (5.3.6)$$

Умножим тождество (5.3.6) на некоторый вектор $\mathbf{h}^0$; в результате мы получим соотношение

$$a_1\mathbf{h}^{n-1} + a_2\mathbf{h}^{n-2} + a_{n-1}\mathbf{h}^1 + a_n\mathbf{h}^0 = -\mathbf{h}^n, \qquad (5.3.7)$$

где через $\mathbf{h}^k$ обозначены произведения $\mathbf{h}^k = \mathbf{A}^k\mathbf{h}^0$. Эти векторы могут быть вычислены рекуррентно:

$$\mathbf{h}^{k+1} = \mathbf{A}\mathbf{h}^k, \quad k = 0, 1, \ldots, n-1. \qquad (5.3.8)$$

Соотношение (5.3.7) представляет собой систему n линейных алгебраических уравнений относительно n неизвестных $a_1, \ldots, a_n$. Мы можем ее решить, например, методом исключения Гаусса. Если матрица системы (5.3.7) окажется вырожденной, что представляется маловероятным, то необходимо выбрать другой вектор $\mathbf{h}^0$. [9]

Метод интерполяции основан на том факте, что два многочлена степени n, значения которых совпадают в $n+1$ различных точках, тождественно равны друг другу. Выберем $n+1$ различных вещественных чисел $s_0, s_1, \ldots, s_n$ и вычислим значение $P(s_i)$:

$$P(s_i) = (-1)^n \det(\mathbf{A} - s_i\mathbf{I}). \qquad (5.3.9)$$

Отметим, что в формулу (5.3.9) входит определитель числовой матрицы (s_i — заданное число), и для его вычисления можно использовать программное обеспечение, основанное на методе исключения Гаусса. Построив по точкам $(s_i, P(s_i))$, $i = 0, \ldots, n$, интерполяционный многочлен Лагранжа, мы получим выражение для характеристического многочлена $P(\lambda)$.

Для построения характеристического многочлена можно воспользоваться также методом неопределенных коэффициентов, записав (5.3.9) в виде системы линейных алгебраических уравнений для коэффициентов $a_0, a_1, \ldots, a_n$:

$$\begin{aligned}
&a_0s_0^n + a_1s_0^{n-1} + a_2s_0^{n-2} + \ldots + a_{n-1}s_0 + a_n = P(s_0),\\
&a_0s_1^n + a_1s_1^{n-1} + a_2s_1^{n-2} + \ldots + a_{n-1}s_1 + a_n = P(s_1),\\
&\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\\
&a_0s_n^n + a_1s_n^{n-1} + a_2s_n^{n-2} + \ldots + a_{n-1}s_n + a_n = P(s_n).
\end{aligned} \qquad (5.3.10)$$

Коэффициент a_0 должен равняться единице (см. (5.3.5)). Поэтому отклонение a_0 от единицы можно рассматривать в качестве меры погрешностей (округления), возникающих в процессе вычислений. (Можно включить равенство $a_0 = 1$ в алгоритм вычислений и вычислять определитель (5.3.9) только n раз.) [10]

5.3.3. Критерий Рауса — Гурвица

Для выяснения вопроса о том, все ли корни характеристического многочлена $P(\lambda)$ имеют отрицательные вещественные части, можно воспользоваться критерием Рауса — Гурвица [5.8]. Обозначим $D_1 = a_1$ и

$$D_k = \det \begin{bmatrix} a_1 & a_3 & a_5 & \dots & a_{2k-1} \\ 1 & a_2 & a_4 & \dots & a_{2k-2} \\ 0 & a_1 & a_3 & \dots & a_{2k-3} \\ 0 & 1 & a_2 & \dots & a_{2k-4} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \dots & a_k \end{bmatrix} \tag{5.3.11}$$

для $k = 2, 3, \dots, n$ (если $j > n$, то считается, что $a_j = 0$). Если теперь для всех k выполнены неравенства

$$D_k > 0, \quad k = 1, 2, \dots, n, \tag{5.3.12}$$

то все корни многочлена $P(\lambda)$ имеют отрицательную вещественную часть.

Отметим, что определители D_i представляют собой многочлены от коэффициентов $P(\lambda)$ и, следовательно, являются многочленами относительно элементов матрицы **A**. При небольших значениях n эти многочлены можно выписать в явном виде.

5.3.4. Нахождение собственных чисел матрицы

Часто оказывается необходимым знать все собственные числа матрицы **A**, а стало быть, и все (в том числе комплексные) корни характеристического многочлена. Вещественные корни можно найти, например, с помощью метода Ньютона

$$\lambda^{(k+1)} = \lambda^{(k)} - \frac{P(\lambda^{(k)})}{P'(\lambda^{(k)})}, \quad k = 0, 1, \dots, \tag{5.3.13}$$

задаваясь при этом подходящим образом выбранными начальными приближениями $\lambda^{(0)}$. Если мы таким способом найдем все n вещественных корней, то задача решена. Если у нас по-

лучится $n-1$ вещественных корней, то оставшийся корень также должен быть вещественным. Если найдены $n-2$ вещественных корней $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_{n-2}$, то можно разделить многочлен $P(\lambda)$ на произведение корневых сомножителей вида $(\lambda-\lambda_1)(\lambda-\lambda_2)\ \ldots\ (\lambda-\lambda_{n-2})$, после чего квадратное уравнение даст нам оставшиеся два корня. Если, наконец, число вещественных корней оказывается меньше, чем $n-2$, то после деления на соответствующее произведение корневых сомножителей мы получаем многочлен более высокого порядка, чем 2, решение которого уже нельзя построить в явном виде. Существует целый ряд методов нахождения набора корней вещественного многочлена. Одним из наиболее популярных среди них является метод Лина — Бэрстоу. Здесь мы рассмотрим лишь основную идею этого метода.

Выделим из произведения корневых сомножителей многочлена $P(\lambda)$ два множителя, соответствующие либо двум вещественным, либо двум комплексно-сопряженным корням λ_j и λ_k:

$$P(\lambda)=(\lambda^2-(\lambda_j+\lambda_k)\lambda+\lambda_j\lambda_k)\prod_{\substack{i\neq j\\ i\neq k}}(\lambda-\lambda_i).$$

Коэффициенты $(\lambda_j+\lambda_k)$ и $\lambda_j\lambda_k$ при таком выборе будут вещественными.

Основная идея метода Лина — Бэрстоу состоит в последовательном нахождении этих «квадратичных корневых множителей». Представим многочлен $P(\lambda)$ в виде

$$P(\lambda)=(\lambda^2-\alpha\lambda-\beta)(\lambda^{n-2}+b_1\lambda^{n-3}+\ \ldots\ +b_{n-2})+A\lambda+B, \tag{5.3.14}$$

где α и β — параметры, которые мы хотим подобрать так, чтобы $A=B=0$. Значения α и β определяют с помощью итерационной процедуры методом Ньютона.

Самостоятельной проблемой при этом остается выбор начальных значений α и β. Предположим, что $P(\lambda)$ имеет только простые корни, а именно, $2k$ комплексных и m вещественных корней $(2k+m=n)$. Тогда существует $k+\binom{m}{2}$ решений (α, β) для уравнений $A=0$, $B=0$. Таким образом, решений может оказаться относительно много, и поэтому вполне вероятно, что метод Ньютона со случайно выбранным начальным приближением α и β будет сходиться. Произвольное решение системы $A(\alpha, \beta)=B(\alpha, \beta)=0$ позволяет понизить степень многочлена на два. Однако при таком последовательном понижении степени многочлена могут накапливаться погрешности (в частности, неточности вычисления α и β, погрешности округления

и т. п.), так что последние из найденных корней могут оказаться уже недостаточно точными. Эти погрешности можно скорректировать, применяя, например, метод Ньютона или метод Лина — Бэрстоу для исходного многочлена.

Вычисление набора собственных чисел матрицы с помощью характеристического многочлена оказывается эффективным при небольших n. При больших значениях n, например при $n > 20$ (в зависимости от конкретной задачи), происходит накопление погрешностей округления, и результаты могут оказаться очень неточными, а часто вовсе неприемлемыми. Поэтому для вычисления всех собственных чисел матрицы обычно используются прямые итерационные методы, являющиеся стандартной составной частью программного обеспечения ЭВМ (например, программы EISPACK, MATLAB и др.). В настоящее время чаще всего используется QR-алгоритм (см., например, [5.34]). Используя это программное обеспечение, можно эффективно находить все собственные числа матрицы с числом строк n, измеряемым десятками.

5.3.5. Нелинейные уравнения — исследование устойчивости в линейном приближении

Обратимся вновь к нелинейной системе (5.1.1)

$$x_i' = f_i(x_1, \ldots, x_n, \alpha), \quad i = 1, \ldots, n. \tag{5.3.15}$$

Будем исследовать поведение решения в окрестности стационарного состояния $\bar{\mathbf{x}}$ при заданном α. Введем вектор отклонений решения от $\bar{\mathbf{x}}$

$$\delta = \mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}}. \tag{5.3.16}$$

Исходное нелинейное уравнение в окрестности точки $\bar{\mathbf{x}}$ аппроксимируем с помощью формулы Тейлора, сохраняя члены до первого порядка включительно ($' = d/dt$):

$$x_i' = \bar{x}_i' + \delta_i' = f_i(\mathbf{x}, \alpha) = f_i(\bar{\mathbf{x}} + \delta, \alpha) \approx$$
$$\approx f_i(\bar{\mathbf{x}}, \alpha) + \sum_{j=1}^{n} \frac{\partial f_i(\bar{\mathbf{x}}, \alpha)}{\partial x_j} \delta_j, \quad i = 1, 2, \ldots, n. \tag{5.3.17}$$

Для стационарного решения $\bar{\mathbf{x}}$ имеем $\bar{\mathbf{x}}_i' = 0$, $f_i(\bar{\mathbf{x}}, \alpha) = 0$, и из разложения (5.3.17) мы получаем

$$\delta_i' = \sum_{j=1}^{n} a_{ij}\delta_j, \quad i = 1, 2, \ldots, n, \; a_{ij} = \frac{\partial f_i}{\partial x_j}(\bar{\mathbf{x}}, \alpha). \tag{5.3.18}$$

Система (5.3.18) представляет собой линейную систему с постоянными коэффициентами, для ее исследования можно воспользоваться результатами предыдущих пунктов. Так, если все собственные числа матрицы $\mathbf{A}=[a_{ij}]$ имеют отрицательные вещественные части, то $\delta\to 0$ при $t\to\infty$ и, стало быть, принимая во внимание формулу (5.3.16), $\mathbf{x}\to\bar{\mathbf{x}}$ при $t\to\infty$ [1]. Если некоторые собственные числа матрицы $\mathbf{A}$ имеют положительные вещественные части, то стационарное решение $\bar{\mathbf{x}}$ не будет устойчивым. Если, наконец, некоторые из собственных чисел имеют вещественные части, равные нулю, а остальные $\operatorname{Re}\lambda_i<0$, то линейное приближение не позволяет решить вопрос об устойчивости стационарного решения.

Результаты, полученные с помощью указанного метода линеаризации, были использованы для выделения областей устойчивости на диаграммах стационарных решений, приведенных в § 5.2. Покажем, как подсчитываются значения λ_1 и λ_2 в табл. 5.2. Дифференцируя по соответствующим переменным правые части дифференциальных уравнений *задачи* 1, мы получаем (ср. формулу (5.2.17))

$$\mathbf{A}=\begin{bmatrix} -\Lambda-\mathrm{Da}\,E, & \mathrm{Da}\,(1-x)\,E/(1+\Theta/\gamma)^2 \\ -\mathrm{Da}\,BE, & -\Lambda+\mathrm{Da}\,B\,(1-x)\,E/(1+\Theta/\gamma)^2-\beta \end{bmatrix}, \tag{5.3.19}$$

где $E=\exp(\Theta/(1+\Theta/\gamma))$. Соответствующий характеристический многочлен имеет вид

$$P(\lambda)=\lambda^2-(a_{11}+a_{22})\lambda+a_{11}a_{22}-a_{12}a_{21}. \tag{5.3.20}$$

В соответствии с терминологией, принятой в теории динамических систем на плоскости, будем называть стационарное решение (состояние равновесия) узлом, седлом или фокусом в зависимости от значений собственных чисел λ_1, λ_2:

седло: λ_1, λ_2 вещественные, $\lambda_1\cdot\lambda_2<0$;

узел: λ_1, λ_2 вещественные, $\lambda_1\cdot\lambda_2>0$;

фокус: λ_1, λ_2 комплексно-сопряженные $(\lambda_1=\bar{\lambda}_2)$.

Фокус и узел могут быть как устойчивыми, так и неустойчивыми, седло же всегда является неустойчивым. Соответствующие типы решений и значения собственных чисел λ_1, λ_2 представлены в табл. 5.3.

---

[1] Из стремления $\delta(t)$ к 0 в (6.3.18) действительно следует, что $\mathbf{x}(t)\to\bar{\mathbf{x}}$ в силу исходной системы (5.3.15) (при достаточной малости $|\mathbf{x}(0)-\bar{\mathbf{x}}|$). Однако доказательство этого совсем не просто; оно было впервые дано А. М. Ляпуновым. — *Прим. ред.*

В заключение отметим, что результаты, найденные с помощью метода линеаризации, имеют локальный характер. Это означает, что они говорят лишь о поведении траекторий, которые начинаются «вблизи» стационарного состояния[1]. В нелинейном случае вокруг устойчивого стационарного состояния существует так называемая «область притяжения», т. е. область начальных условий, которые дают траекторию, приближающуюся к указанному состоянию. В случае одного устойчивого состояния такой областью притяжения может оказаться все пространство $\mathbb{R}^n$. Если одновременно существует несколько устойчивых стационарных состояний, то отдельные области притяжения разделяются гиперповерхностями, называемыми сепаратрисами. В случае $n = 2$ они находятся сравнительно просто (это кривые на плоскости); при $n > 2$ указанная задача становится гораздо более трудной.

5.4. ТОЧКИ ВЕТВЛЕНИЯ СТАЦИОНАРНЫХ РЕШЕНИЙ. ВЕЩЕСТВЕННАЯ БИФУРКАЦИЯ[2]

При параметрическом исследовании выбранной задачи нас обычно интересуют все ветви на диаграмме стационарных решений. Как уже отмечалось выше (гл. 3), ветви решений начинаются и заканчиваются в некоторых критических точках. Если мы найдем эти точки, то, естественно, сможем существенно упростить процесс построения диаграммы решений. Критические точки диаграммы стационарных решений характеризуются тем, что одно из собственных чисел матрицы Якоби для правых частей исходных дифференциальных уравнений равняется нулю. В гл. 3 такого рода точки вещественной бифуркации мы подразделяли на точки поворота и точки ветвления.

В этом параграфе мы займемся анализом алгоритмов нахождения точек вещественной бифуркации, исследуем связь ветвления в окрестности точки бифуркации с процессом продолжения решения, а также рассмотрим способы нахождения точек, в которых возникают изолы — замкнутые кривые, являющиеся компонентами диаграммы решений.

5.4.1. Нахождение точек поворота и точек ветвления

Пусть снова уравнения

$$f_i(x_1, x_2, \ldots, x_n; \alpha) = 0, \quad i = 1, 2, \ldots, n, \tag{5.4.0}$$

[1] В случае линейной системы (см. п. 5.3.1) выводы были справедливы для траекторий, начинающихся в любой точке пространства $\mathbb{R}^n$.

[2] Этот термин не является общепринятым. — *Прим. ред.*

определяют стационарные решения системы дифференциальных уравнений. Для того, чтобы существовали точки (вещественной) бифуркации стационарных решений, необходимо, чтобы (где-то в изучаемой области $(\mathbf{x}, \alpha)$) выполнялось условие

$$f_{n+1}(x_1, x_2, \ldots, x_n, \alpha) = \det \mathbf{J}(x_1, x_2, \ldots, x_n, \alpha) = 0, \quad (5.4.1)$$

где $\mathbf{J}$ — матрица Якоби; $\mathbf{J} = [\partial f_i/\partial x_j]$. Равенство (5.4.1) есть отрицание основного условия теоремы о неявных функциях. Оно формально эквивалентно утверждению о том, что у матрицы $\mathbf{J}$ имеется собственное число, равное нулю.

Для того, чтобы в изучаемой области $(\mathbf{x}, \alpha)$ существовали точки ветвления, необходимо, чтобы дополнительно к (5.4.1) при некотором k выполнялось условие

$$f_{n+2}(x_1, x_2, \ldots, x_n, \alpha) = \det \mathbf{J}_k(x_1, x_2, \ldots, x_n, \alpha) = 0, \quad (5.4.2)$$

где $\mathbf{J}_k$ — матрица, определяемая формулой (5.2.12) и получаемая из матрицы $\mathbf{J}$ вычеркиванием k-го столбца, $[\partial f_i/\partial f_{n+1}] = [\partial f_i/\partial \alpha]$. В большинстве практических задач для точки поворота $(\mathbf{x}^*, \alpha^*)$ при всех k выполняется условие

$$f_{n+2}(\mathbf{x}^*, \alpha^*) \neq 0. \quad (5.4.3)$$

Наоборот, для точки ветвления $(\mathbf{x}^{**}, \alpha^{**})$ из теоремы о неявных функциях следует, что для всех k

$$f_{n+2}(\mathbf{x}^{**}, \alpha^{**}) = 0. \quad (5.4.4)$$

Таким образом, соотношения (5.4.3) и (5.4.4) можно использовать для установления различий между точкой поворота и точкой ветвления.

Остановимся теперь на определении так называемых точек первичной бифуркации, т. е. точек бифуркации на тривиальном решении[1]: $\mathbf{x}(\alpha) \equiv \bar{\mathbf{x}}$ для всех значений параметра α. При этом уравнения системы (5.4.0) выполняются автоматически, а уравнение (5.4.1) определяет собой соотношение для определения значения параметра α^{**} в точке бифуркации. Решение этого (одного) нелинейного уравнения может быть найдено, например, с помощью метода Ньютона.

В общем случае уравнения (5.4.0) и (5.4.1) образуют вместе систему из $n+1$ уравнений относительно $(n+1)$ неизвестных координат $x_1^*, x_2^*, \ldots, x_n^*, \alpha^*$ критической точки. Для нахождения решения этой системы мы вновь можем воспользоваться

[1] Здесь под тривиальным решением мы понимаем решение, которое не зависит от выбранного параметра.

методом Ньютона:

$$\mathbf{F}'(\mathbf{X}^k)\Delta\mathbf{X}^k = -\mathbf{F}(\mathbf{X}^k), \tag{5.4.5}$$

$$\mathbf{X}^{k+1} = \mathbf{X}^k + \Delta\mathbf{X}^k. \tag{5.4.6}$$

Здесь использованы обозначения $\mathbf{X} = (x_1, x_2, \ldots, x_n, \alpha)$, $\mathbf{F} = (f_1, f_2, \ldots, f_{n+1})$, причем $\mathbf{F}'(\mathbf{X}) = [\partial f_i/\partial x_j]$ — это матрица Якоби. Последняя строка этой матрицы подсчитывается обычно с помощью соответствующих разностных формул. Формулы для их аналитического вычисления (полезные при небольшом n) представлены в работах [5.9, 5.10].

Рассмотрим теперь точку $(\mathbf{x}, \alpha)$, которая удовлетворяет соотношениям (5.1.3), (5.4.1) и (5.4.2), т. е. условиям для точки ветвления. Здесь мы имеем $n+2$ уравнений для $n+1$ неизвестных составляющих вектора $\mathbf{X}$. Положим теперь $\bar{\mathbf{F}} = (f_1, f_2, \ldots, f_{n+2})$. Для решения переопределенной системы

$$\bar{\mathbf{F}}(\mathbf{X}) = 0 \tag{5.4.7}$$

воспользуемся методом Гаусса — Ньютона (см. [5.1]):

$$[\bar{\mathbf{F}}'^T(\mathbf{X}^k)\bar{\mathbf{F}}'(\mathbf{X}^k)]\Delta\mathbf{X}^k = -\bar{\mathbf{F}}'^T(\mathbf{X}^k)\bar{\mathbf{F}}(\mathbf{X}^k). \tag{5.4.8}$$

Каждое новое приближение мы подсчитываем вновь по формуле (5.4.6). Указанный метод сходится к стационарной точке (минимуму) функции $\varphi = \bar{\mathbf{F}}^T\bar{\mathbf{F}}$; при этом в точке ветвления функция φ имеет минимум, равный нулю (и только в этом случае метод дает нужное нам решение переопределенной системы). Если матрица $\bar{\mathbf{F}}'^T(\mathbf{X}^{**})\bar{\mathbf{F}}'(\mathbf{X}^{**})$ оказывается невырожденной, то сходимость метода, даваемого формулой (5.4.8), будет квадратической.

Наиболее часто встречающиеся ситуации представлены в табл. 5.5. Конечно, можно найти и соответствующие контрпримеры, однако результаты табл. 5.5, судя по всему, будут верны для большинства практически важных случаев.

Таблица 5.5. Наиболее вероятные ситуации

	Скорость сходимости	
	для процесса (5.4.5), (5.4.6)	для процесса (5.4.8), (5.4.6)
Точка поворота Точка бифуркации	квадратическая линейная	расходится квадратическая

Рассмотрим простой пример для $n = 1$. Пусть

$$f_1 = x(x^2 - \alpha)[(x-1)^2 + \alpha - 4](1 - k + k(x - \alpha)) = 0. \tag{5.4.9}$$

Диаграмма решений для этого случая изображена на рис. 5.7. Параметр k может принимать два значения $k=0$ и $k=1$ (для

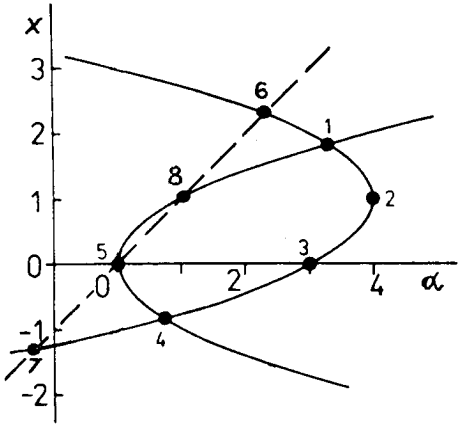


Рис. 5.7. Диаграмма решения примера (5.4.9).

Номер	x	α	$k=0$*	$k=1$
1	1,8229	3,3229	ТВ	ТВ
2	1	4	ТП	ТП
3	0	3	ТВ	ТВ
4	−0,8229	0,6771	ТВ	ТВ
5	0	0	ТП	ТВ
6	2,3028	2,3028	РТ	ТВ
7	−1,3028	−1,3028	РТ	ТВ
8	1	1	РТ	ТВ

ТВ — точка ветвления, ТП — точка поворота,
РТ — регулярная точка.
* При $k=0$ рассматривать лишь сплошные линии.

$k=1$ мы имеем двойную точку бифуркации № 5). Конкретная форма уравнений (5.4.1) и (5.4.2) в данном случае очевидна:

$$\begin{aligned} f_2 = {} & 6kx^5 + 5(1-3k-k\alpha)x^4 + 4(2k\alpha - k - 2)x^3 + \\ & + 3(5k\alpha - 3 + 3k)x^2 + 2(-3k\alpha^2 + \alpha(k+2))x + \\ & + k\alpha^3 - (2k+1)\alpha^2 + 3(1-k)\alpha, \end{aligned} \tag{5.4.10}$$

$$\begin{aligned} f_3 = {} & -kx^5 + 2kx^4 + 5kx^3 + (k+2-6k\alpha)x^2 + \\ & + (3k\alpha^2 - 2(2k+1)\alpha + 3(1-k))x. \end{aligned}$$

В табл. 5.6 указано число итераций, необходимых для обеспечения неравенства

$$\max(|x^k - x^*|, |\alpha^k - \alpha^*|) \leqslant \varepsilon \tag{5.4.11}$$

Таблица 5.6. Исследование примера (5.4.9). Показано число итераций, необходимое для выполнения неравенства (5.4.1).

k	Начальное приближение (x, α)		Метод (5.4.5), (5.4.6)				Метод (5.4.8), (5.4.6)			
			ε			сходится к точке [1]	ε			сходится к точке [1]
			10^{-2}	10^{-4}	10^{-6}		10^{-2}	10^{-4}	10^{-6}	
0	0,01	0,01	0	11	20	5	0	2	2	5
	1,1	4,1	2	3	3	2	9	19	28	(1,02; 3,07)[2]
	1,5	3,0	8	15	21	1	3	4	4	1
	0,1	3,1	6	13	20	3	2	2	3	3
	−1,0	0,5	7	14	21	4	2	4	4	4
	1,0	1,0	7	15	25	5	4	5	5	5
	2,2	2,0	7	14	21	1	3	4	5	1
	10	10	19	26	> 31	1	12	12	13	1
	−10	−10	19	26	> 31	4	13	14	15	4
1	−0,5	0,5	9	20	> 31	5	7	14	20	5
	−1	−2	13	25	> 31	5	8	15	22	5
	−2	−1	9	16	22	4	8	9	10	7
	3	2	10	17	23	6	5	6	7	6
	1,1	1,2	3	10	17	8	2	3	4	8

[1] Точки, отмеченные цифрами на рис. 5.7. [2] Стационарная точка φ.

при различных начальных приближениях. Из таблицы видно, что итерационный процесс (5.4.5), (5.4.6) сходится квадратично к точке поворота и линейно (если он вообще сходится) к точке ветвления[1]. Итерационный процесс (5.4.8) сходится квадратично к точке ветвления. Точка № 5 на рис. 5.7 при $k = 1$ представляет собой точку ветвления (в ней пересекаются три ветви решения). Характер обоих итерационных процессов можно проследить в нижней части табл. 5.6. Отметим, что процесс (5.4.8) сходится к упомянутой точке лишь линейно.

Для систем больших размеров точное вычисление соответствующих определителей может оказаться довольно трудным делом из-за накопления погрешностей округления. Условие

[1] Итерационный процесс в $\mathbf{R}^n$ $u^{k+1} = \Phi(u^k)$ сходится «линейно» (т. е. так, как при линейном отображении Φ), если $r_k \leqslant Cq^k$, $0 < q < 1$. Здесь $r_k = \| u^k - u^* \|$, $u^* = \lim\limits_{k \to \infty} u^k$. Обычно при этом $r_k = Cq^k + o(q^k)$.

Процесс сходится «квадратично», если

$$r_{k+1} \leqslant Cr_k^2. \quad \text{— Прим. ред.}$$

$\det \mathbf{J} = 0$ можно записать иначе: должен существовать не равный нулю вектор $\mathbf{v}$, такой, что

$$\mathbf{J}(\mathbf{x}, \alpha)\mathbf{v} = 0. \tag{5.4.12}$$

Этот вектор определен с точностью до постоянного множителя, и поэтому к соотношению (5.4.12) добавляется еще условие «нормировки» вектора $\mathbf{v}$, например,

$$\sum_{i=1}^{n} v_i^2 = 1 \tag{5.4.13}$$

или

$$v_k = 1 \tag{5.4.14}$$

при заданном k. Уравнения (5.4.0), (5.4.12) и (5.4.13) (или (5.4.14)) образуют систему $2n+1$ нелинейных уравнений относительно $2n+1$ неизвестных составляющих $\mathbf{x}$, $\mathbf{v}$, α. Решение этой системы можно искать, например, с помощью метода Ньютона. Построение матрицы Якоби для применения метода Ньютона требует вычисления вторых производных функций f_i или использования соответствующих разностных формул. Заметим, что в случае $n = 1$ метод, описываемый формулами (5.4.12), (5.4.14), оказывается тождественным подходу (5.4.5), поскольку условие для функции f_{n+1} (5.4.1) идентично соотношению (5.4.12).

Другой метод нахождения точек поворота основан на использовании условия

$$\frac{\partial \alpha}{\partial x_k} = 0 \tag{5.4.15}$$

при соответствующим образом выбранном k. Условие (5.4.15) вместе с системой (5.4.0) вновь образует систему $n+1$ нелинейных уравнений относительно неизвестных $x_1, x_2, \ldots, x_n, \alpha$. Левую часть формулы (5.4.15) можно найти как последнюю составляющую вектора $\mathbf{v}$, т. е. решая систему линейных алгебраических уравнений

$$\mathbf{J}_k(\mathbf{x}, \alpha) \cdot \mathbf{v} = -\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial x_k},$$

где матрица $\mathbf{J}_k$ определяется формулой (5.2.12). При $n = 1$ условие (5.4.15) вновь оказывается эквивалентным соотношению (5.4.5).

Более просто определяются точки поворота в тех случаях, когда мы можем воспользоваться методом отображения параметра (см. п. 5.2.1). Продемонстрируем эту процедуру на примере нахождения точек поворота в *задаче* 1. (В этом примере

одна переменная Θ и один «живой» параметр Da. — *Ред.*) В п. 5.2.1 мы вывели соотношение (5.2.4), из которого находим

$$\mathrm{Da} = \left[B - \Theta - \frac{\beta(\Theta - \Theta_c)}{\Lambda}\right]^{-1} [\Lambda\Theta + \beta(\Theta - \Theta_c)] \cdot \exp\frac{-\Theta}{1+\Theta/\gamma} = \\ = g(\Theta, \Lambda, \gamma, B, \beta, \Theta_c). \qquad (5.4.16)$$

В точке поворота имеет место условие $d\mathrm{Da}/d\Theta = 0$, или

$$\frac{\partial g(\Theta, \Lambda, \gamma, B, \beta, \Theta_c)}{\partial\Theta} = 0. \qquad (5.4.17)$$

Если мы найдем корень Θ^* уравнения (5.4.17) при фиксированных значениях параметров Λ, γ, B, β и Θ_c, то из формулы (5.4.16) получим значение Da^* в точке поворота. Проведя дифференцирование в (5.4.17), после некоторых преобразований мы получаем квадратное уравнение относительно неизвестной Θ. Тем самым можно найти максимум два положительных корня Θ, которые соответствуют точкам поворота на диаграмме решений — зависимости от Da (см. также данные табл. 5.3).

5.4.2. Продолжение решения из точки ветвления

В предыдущем пункте мы рассмотрели некоторые методы нахождения точек ветвления на диаграмме решений. В § 3.4 были получены соотношения для определения касательных векторов ветвей решения, отходящих из данной точки ветвления. В то время как процедуры для определения точек ветвления носили итерационный характер, угловые коэффициенты ветвей разыскивались с помощью различных финитных подходов, основанных на методе исключения Гаусса (точка ветвления предполагалась известной заранее). В настоящем пункте мы опишем, как используются эти сведения для процесса продолжения по параметру, т. е. построения диаграммы стационарных решений (см. [5.12]).

При этом мы будем предполагать, что имеет место случай «общего положения»: ранг матрицы Якоби $\mathbf{J}$ и расширенной матрицы $\tilde{\mathbf{J}}$ понижается только на 1:

$$\operatorname{rank}\mathbf{J} = \operatorname{rank}\tilde{\mathbf{J}} = n - 1.$$

Указанный алгоритм состоит из 9 шагов:

1. Нахождение точки ветвления (x^{**}, α^{**}), см. п. 5.4.1.
2. Вычисление частных производных функций f_i в этой точке, построение матрицы $\tilde{\mathbf{J}}$ по формуле (3.3.3).

3. Решение двух систем линейных алгебраических уравнений (3.4.2) и (3.4.3) с целью нахождения частных производных

$$\frac{\partial \varphi_i}{\partial x_1}, \quad \frac{\partial \varphi_i}{\partial \alpha}, \quad i=2, 3, \ldots, n. \tag{5.4.18}$$

Это решение можно получить, применяя метод исключения Гаусса для двух различных правых частей одновременно, поскольку системы (3.4.2) и (3.4.3) имеют одну и ту же матрицу.

4. Нам потребуются частные производные второго порядка от функции $F(x_1, \alpha)$, даваемой формулой (3.3.11а). С этой целью вычислим производные функции f_i в точке (x^{**}, α^{**}):

$$f'_{ij}=\frac{\partial f_i}{\partial x_j}, \quad f'_{i\alpha}=\frac{\partial f_i}{\partial \alpha}, \quad f'_{ijk}=\frac{\partial^2 f_i}{\partial x_j \partial x_k}, \quad f'_{ij\alpha}=\frac{\partial^2 f_i}{\partial x_j \partial \alpha}. \tag{5.4.19}$$

Значения частных производных первого порядка мы уже нашли на шаге 2. Обозначим аналогично производные функций φ_i:

$$\begin{gathered}\varphi'_{i1}=\frac{\partial \varphi_i}{\partial x_1}, \quad \varphi'_{i\alpha}=\frac{\partial \varphi_i}{\partial \alpha}, \quad \varphi'_{i11}=\frac{\partial^2 \varphi_i}{\partial x_1^2}, \\ \varphi'_{i1\alpha}=\frac{\partial^2 \varphi_i}{\partial x_1 \partial \alpha}, \quad \varphi'_{i\alpha\alpha}=\frac{\partial^2 \varphi_i}{\partial \alpha^2}.\end{gathered} \tag{5.4.20}$$

В этих обозначениях системы (3.4.2) и (3.4.3) переписываются в виде

$$\sum_{j=2}^{n} f'_{ij}\varphi'_{j1}=-f'_{i1}, \quad i=1, 2, \ldots, n-1, \tag{3.4.2а}$$

$$\sum_{j=2}^{n} f'_{ij}\varphi'_{j\alpha}=-f'_{i\alpha}, \quad i=1, 2, \ldots, n-1. \tag{3.4.3а}$$

Дифференцируя соотношение (3.4.2а) по x_1, находим

$$\sum_{j=2}^{n} f'_{ij}\varphi'_{j11}=-\sum_{j=2}^{n}\left[2f'_{ij1}\varphi'_{j1}+\sum_{k=2}^{n}\left(f'_{ijk}\varphi'_{k1}\right)\varphi'_{j1}\right]-f'_{i11},$$
$$i=1, 2, \ldots, n-1. \tag{5.4.21}$$

Аналогичным образом, дифференцируя формулу (3.4.2а) по α, получаем

$$\sum_{j=2}^{n} f'_{ij}\varphi'_{j1\alpha}=-\sum_{j=2}^{n}\left[f'_{ij\alpha}\varphi'_{j1}+f'_{ij1}\varphi'_{j\alpha}+\sum_{k=2}^{n}\left(f'_{ijk}\varphi'_{k\alpha}\right)\varphi'_{j1}\right]-f'_{i1\alpha},$$
$$i=1, 2, \ldots, n-1. \tag{5.4.22}$$

Наконец, дифференцирование (3.4.3а) по α дает

$$\sum_{j=2}^{n} f'_{ij}\varphi'_{j\alpha\alpha} = -\sum_{j=2}^{n}\left[2f'_{ij\alpha}\varphi'_{j\alpha} + \sum_{k=2}^{n}(f'_{ijk}\varphi'_{k\alpha})\varphi'_{j\alpha}\right] - f'_{i\alpha\alpha},$$
$$i = 1, 2, \ldots, n-1. \qquad (5.4.23)$$

Соотношения (5.4.21), (5.4.22) и (5.4.23) представляют собой 3 системы линейных алгебраических уравнений относительно неизвестных φ'_{j11}, $\varphi'_{j1\alpha}$, $\varphi'_{j\alpha\alpha}$, обладающие одинаковой матрицей. Тем самым, с помощью метода исключения Гаусса их можно решать одновременно. (Правые части систем составлены из величин, численные значения которых уже определены на предыдущих шагах алгоритма.)

5. Находим частные производные второго порядка для функции F, задаваемой формулой (3.3.11а):

$$A = \frac{\partial^2 F}{\partial x_1^2} = f'_{n11} + \sum_{j=2}^{n}\left[2f'_{nlj}\varphi'_{jl} + f'_{nj}\varphi'_{j11} + \sum_{k=2}^{n}(f'_{njk}\varphi'_{kl})\varphi'_{jl}\right],$$
$$B = \frac{\partial^2 F}{\partial x_1\,\partial\alpha} = f'_{n1\alpha} + \sum_{j=2}^{n}\left[f'_{n1j}\varphi'_{j\alpha} + f'_{nj\alpha}\varphi'_{jl} + f'_{nj}\varphi'_{j1\alpha} + \right.$$
$$\left. + \sum_{k=2}^{n}(f'_{njk}\varphi'_{k\alpha})\varphi'_{jl}\right], \qquad (5.4.24)$$
$$C = \frac{\partial^2 F}{\partial\alpha^2} = f'_{n\alpha\alpha} + \sum_{j=2}^{n}\left[2f'_{nj\alpha}\varphi'_{j\alpha} + f'_{nj}\varphi'_{j\alpha\alpha} + \sum_{k=2}^{n}(f'_{njk}\varphi'_{k\alpha})\varphi'_{j\alpha}\right].$$

6. Строим стартовые точки для алгоритма продолжения, например, алгоритма DERPAR (см. п. 5.2.3). Выбираем две малые числовые постоянные

$$h_1 > 0, \quad h_\alpha > 0. \qquad (5.4.25)$$

7. По крайней мере одно из двух искомых направлений ответвления характеризуется конечным значением производной $dx_1/d\alpha$ (см. (3.2.4)). Если оба значения производной оказываются конечными, то, выбирая меньшее из этих двух значений, полагаем

направление 1:

$$\frac{dx_1}{d\alpha} = S_1, \qquad (5.4.26)$$

где S_1 вычисляется согласно формуле (3.2.6). Другое направление характеризуется конечным значением производной $d\alpha/dx_1$ и, следовательно,

направление 2:

$$\frac{d\alpha}{dx_1} = S_2. \tag{5.4.27}$$

8. С помощью полученных таким образом двух характеристических направлений мы находим четыре исходных точки для

Таблица 5.7. Стартовые точки для процесса продолжения. Для каждого направления мы получаем две точки, одну для $P = 1$ и другую для $P = -1$. Здесь N_i — параметры направления для процесса продолжения, k — индекс переменной, которая остается фиксированной в ходе ньютоновских итераций для уточнения стартовой точки.

Направление	Стартовая точка	N_i	k
1	$\alpha = \alpha^{**} + Ph_\alpha$ $x_1 = x_1^{**} + Ph_\alpha S_1$ $x_i = x_i^{**} + Ph_\alpha \left[\varphi'_{i1} S_1 + \varphi'_{i\alpha}\right]$ $i = 2, \ldots, n$	$N_{n+1} = P$ $N_1 = P \operatorname{sign}(S_1)$ $N_i = P \operatorname{sign}\left(\varphi'_{i1} S_1 + \varphi'_{i\alpha}\right)$ $i = 2, \ldots, n$	$n+1$
2	$x_1 = x_1^{**} + Ph_1$ $\alpha = \alpha^{**} + Ph_1 S_2$ $x_i = x_i^{**} + Ph_1 \left[\varphi'_{i1} + \varphi'_{i\alpha} S_2\right]$ $i = 2, \ldots, n$	$N_1 = P$ $N_{n+1} = P \operatorname{sign}(S_2)$ $N_i = P \operatorname{sign}\left(\varphi'_{i1} + \varphi'_{i\alpha} S_2\right)$ $i = 2, \ldots, n$	1

процесса продолжения решения (см. табл. 5.7). Здесь использовано то, что изменение остальных переменных подчиняется соотношениям

$$\frac{dx_i}{d\alpha} = \varphi'_{i1} \frac{dx_1}{d\alpha} + \varphi'_{i\alpha} \tag{5.4.28}$$

или

$$\frac{dx_i}{dx_1} = \varphi'_{i1} + \varphi'_{i\alpha} \frac{d\alpha}{dx_1}. \tag{5.4.29}$$

В таблице приведены также направляющие параметры N_i для каждой из переменных (см. алгоритм в п. 5.2.3) и индекс k переменной, которая не изменяется в ходе итераций метода Ньютона для уточнения стартовой точки.

9. По окончании проведения ньютоновских итераций мы можем проконтролировать, соответствуют ли найденные стартовые

точки $(x_1, \ldots, x_n, \alpha)$ предсказанным точкам; например, для направления 1 это можно сделать с помощью оценок

$$\left|\frac{x_i - x_i^{**}}{\alpha - \alpha^{**}} - \varphi'_{i1}S_1 - \varphi'_{i\alpha}\right| < \varepsilon, \quad i = 2, \ldots, n,$$
$$\left|\frac{x_1 - x_1^{**}}{\alpha - \alpha^{**}} - S_1\right| < \varepsilon. \tag{5.4.30}$$

Для направления 2 тестовая оценка производится аналогично.

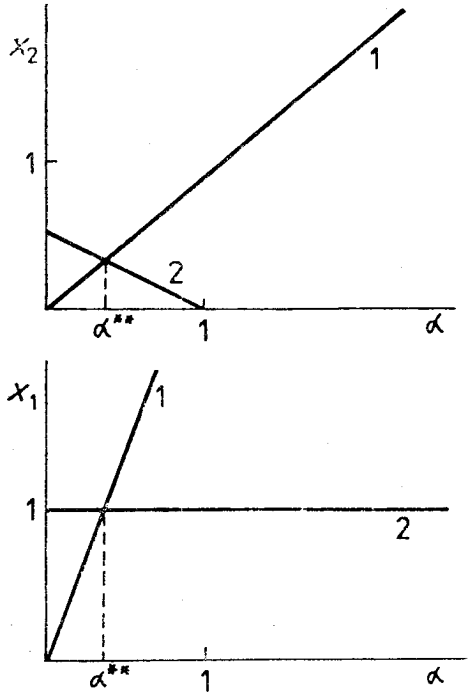


Рис. 5.8. Диаграмма решений задачи (5.4.31) в окрестности точки бифуркации.

Проиллюстрируем применение описанного алгоритма на следующем примере:

$$f_1 = x_1 - 2x_2 - \alpha - x_1x_2 - 3x_2\alpha + x_1^2 - 2x_2^2 - \alpha^2 = 0,$$
$$f_2 = x_2^2 - x_2^2x_1^2 + \alpha^2x_1^2 - \alpha^2 = 0. \tag{5.4.31}$$

Сходимость метода Гаусса—Ньютона (5.4.8) к точке ветвления $\mathbf{x}^{**} = (1, 1/3)$, $\alpha^{**} = 1/3$ показана в табл. 5.8. Ход вычислений представлен в табл. 5.9, а поведение ветвей решения изображено графически на рис. 5.8.

Таблица 5.8. Сходимость метода Гаусса — Ньютона к точке ветвления для системы (5.4.31).

Итерация	x_1	x_2	α
0	1,000	1.000	1,000
1	0,992	0,497	0,502
2	0,996	0,348	0,349
3	1,000	0,333	0,333
4	1,000	0,333	0,333

Исследуем теперь характер разветвления в точках первичной бифуркации для задачи о двух реакторах с модельной реакцией типа «брюсселятор» (см. *задачу* 8). В качестве параметра α выберем параметр D_1, полагая $D_2 = D_1/\rho$, $\rho = 0, 1$. Независимо от D_1 в задаче существует тривиальное стационарное решение $X_1 = X_2 = A$, $Y_1 = Y_2 = B/A$. Матрица Якоби для правых частей оказывается равной (если расположить переменные в порядке X_1, Y_1, X_2, Y_2)

$$\mathbf{J} = \begin{bmatrix} -(B+1)+2X_1Y_1-\alpha & X_1^2 & \alpha & 0 \\ B-2X_1Y_1 & -X_1^2-10\alpha & 0 & 10\alpha \\ \alpha & 0 & -(B+1)+2X_2Y_2-\alpha & X_2^2 \\ 0 & 10\alpha & B-2X_2Y_2 & -X_2^2-10\alpha \end{bmatrix}$$

и, следовательно, в случае тривиального решения мы имеем

$$\mathbf{J} = \begin{bmatrix} B-1-\alpha & A^2 & \alpha & 0 \\ -B & -A^2-10\alpha & 0 & 10\alpha \\ \alpha & 0 & B-1-\alpha & A^2 \\ 0 & 10\alpha & -B & -A^2-10\alpha \end{bmatrix}.$$

Положим $A = 2$, $B = 6$. После соответствующих вычислений находим, что значения параметра α, при которых матрица Якоби имеет нулевое собственное число, равны 0,0443 и 2,256. Таким образом, мы имеем две точки бифуркации (2; 3; 2; 3; 0,0443) и (2; 3; 2; 3; 2,256). Направления ветвей решения в первой из них, полученные с помощью описанного выше алгоритма, приведены в табл. 5.9. Эти результаты хорошо согласуются с диаграммой решений, представленной на рис. 5.9; точка

Таблица 5.9.

a) Ход вычислений для точки ветвления (1; 0,3333; 0,3333) из примера (5.4.31).

$$\tilde{J} = \begin{bmatrix} 2{,}6667 & -5{,}3333 & -2{,}6667 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \varphi'_{21} = 0{,}5, \quad \varphi'_{2\alpha} = 0{,}5.$$

	$j=1$	$j=2$	$j=\alpha$
f'_{11j}	2	−1	0
f'_{12j}	−1	−4	−3
$f'_{1\alpha j}$	0	−3	−2
f'_{21j}	0	−1,3333	1,3333
f'_{22j}	−1,3333	0	0
$f'_{2\alpha j}$	1,3333	0	0

$A = -1{,}3333$, $B = 2$, $C = 0$; $S_1 = dx_1/d\alpha = 0$, $dx_2/d\alpha = -0{,}5$; $S_2 = d\alpha/dx_1 = 0{,}3333$, $dx_2/dx_1 = 0{,}3333$.

Стартовые точки ($h_1 = h_\alpha = 0{,}01$):

x_1	x_2	α	N_1	N_2	N_3	k
1,000	0,328	0,343	0	−1	1	3
1,000	0,338	0,323	0	1	−1	3
1,010	0,336	0,336	1	1	1	1
0,990	0,330	0,330	−1	−1	−1	1

b) Направления разветвления в точке первичной бифуркации (2, 3, 2, 3, 0,04433) для *задачи* 8. $A = 2$, $B = 6$, $\rho = 0{,}1$.

Направление 1:

$$\frac{dX_1}{d\alpha} = \frac{dY_1}{d\alpha} = \frac{dX_2}{d\alpha} = \frac{dY_2}{d\alpha} = 0$$

Направление 2:

$$\frac{dY_1}{dX_1} = -1{,}2278, \quad \frac{dX_2}{dX_1} = -1, \quad \frac{dY_2}{dX_1} = 1{,}2278, \quad \frac{d\alpha}{dX_1} = 0$$

бифуркации является здесь одновременно и точкой ветвления, и «точкой поворота».

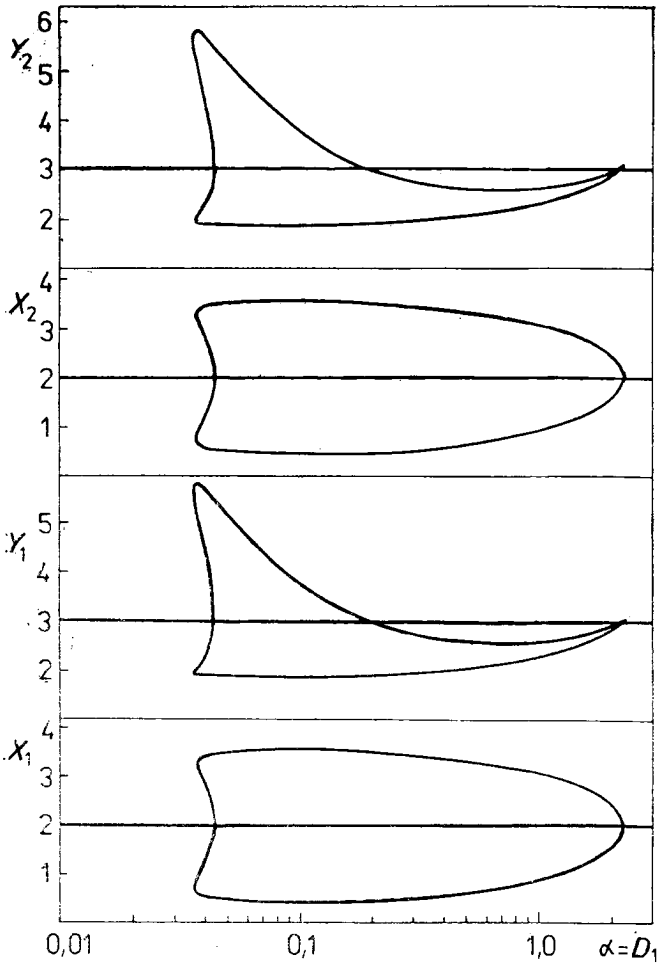


Рис. 5.9. Диаграмма стационарных решений *задачи* 8, $N = 2$; $A = 2$, $B = 6$, $\rho = 0{,}1$.

При построении диаграммы решений важной проблемой является отыскание всех ветвей решения. Наряду со случайным выбором начальных приближений для метода Ньютона (см. § 5.1) мы можем теперь воспользоваться еще одной возможностью.

С помощью генератора случайных чисел будем формировать начальные приближения для алгоритмов нахождения точек поворота и особенно точек ветвления. К каждой найденной точке поворота или точке ветвления мы применяем алгоритм продолжения по каждой ветви, отходящей от этой точки, заканчивая процесс продолжения по достижении уже известной точки ветвления или точки поворота. Основная трудность здесь состоит в том, чтобы с помощью данного алгоритма не просчитывать некоторые ветви решения дважды или четырежды.

5.4.3. Возникновение изол на диаграмме решений

Возникновение и существование изол на диаграмме решений мы попытаемся объяснить с помощью двухпараметрической системы уравнений

$$f_i(x_1, x_2, \ldots, x_n, \alpha_1, \alpha_2) = 0, \quad i = 1, 2, \ldots, n. \qquad (5.4.32)$$

Принимая во внимание сложности графического представления такой системы, будем полагать в ней $n = 1$, т. е. рассматривать уравнение вида

$$f_1(x_1, \alpha_1, \alpha_2) = 0. \qquad (5.4.32а)$$

Множество $S(f_1) = \{(x_1, \alpha_1, \alpha_2) \in R^3, f_1(x_1, \alpha_1, \alpha_2) = 0\}$ представляет собой в общем случае некоторую поверхность в R^3. Предположим, что эта поверхность имеет вид параболоида вращения с вершиной в точке P, ось которого параллельна оси α_2 (см. рис. 5.10). Зафиксируем теперь параметр α_2 в формуле (5.4.32а), полагая $\alpha_2 = \tilde{\alpha}_2$. Мы получаем уравнение с одним параметром, диаграмма решений которого представляет собой пересечение множества $S(f_1)$ (параболоида вращения) с плоскостью $\alpha_2 = \tilde{\alpha}_2$. На рис. 5.10 видно, что при $\tilde{\alpha}_2 < \alpha_2^*$ это пересечение пусто, при $\tilde{\alpha}_2 = \alpha_2^*$ оно вырождается в точку P, а при $\tilde{\alpha}_2 > \alpha_2^*$ указанное пересечение представляет собой некоторую замкнутую кривую. Ортогонально проектируя эту замкнутую кривую на плоскость $x_1 - \alpha_1$, мы получаем в этой плоскости искомую изолу. Описанная ситуация схематически представлена на рис. 5.11.

Сформулируем теперь необходимые условия, позволяющие определить точку P[1] для системы общего вида (5.4.32). В окрестности этой точки переменную α_2 можно рассматривать

---

[1] $P = (x^*, \alpha_1^*, \alpha_2^*)$ — точка на двумерной поверхности $S = \{x, \alpha_1, \alpha_2 \in R^{n+2}; f(x, \alpha_1, \alpha_2) = 0\}$, являющаяся изолированной точкой в пересечении S с плоскостью $\alpha_2 = \alpha_2^*$. — *Прим. ред.*

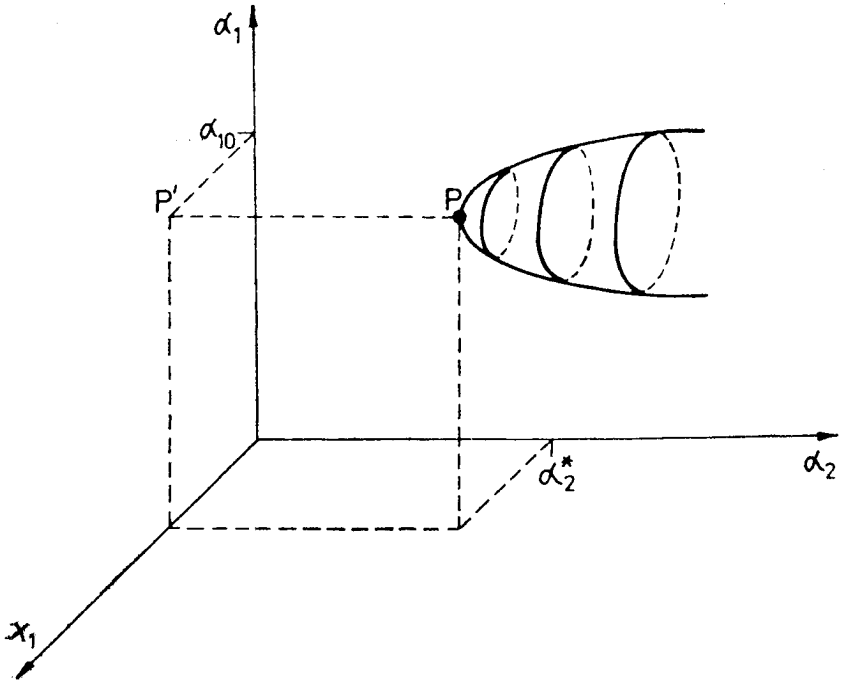


Рис. 5.10. Возникновение изол в двухпараметрической проекции.

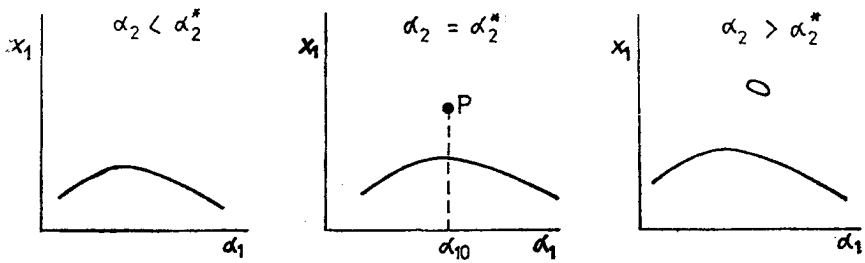


Рис. 5.11. Схематическое изображение возникновения изол на диаграмме решений.

как функцию переменных x_k, α_1 (при некотором фиксированном k)

$$\alpha_2 = \varphi(x_k, \alpha_1). \tag{5.4.33}$$

Действительно, выбрав значения x_k и α_1, из уравнений (5.4.32) можно определить оставшиеся неизвестные $x_1, \ldots, x_{k-1}, x_{k+1}, \ldots, x_n$ и α_2 и таким образом получить функциональные зависимости $x_j = x_j(x_k, \alpha_1)$ и $\alpha_2 = \alpha_2(x_k, \alpha_1)$ $(=\varphi(x_k, \alpha_1))$. Функция φ имеет экстремум в точке P и, следовательно, для нее должны выполняться соотношения

$$\frac{\partial\varphi}{\partial x_k} = 0, \quad \frac{\partial\varphi}{\partial\alpha_1} = 0. \tag{5.4.34}$$

Положим $x_{n+1} = \alpha_2$, считая, что матрица $\mathbf{J}_k$ задана выражением (5.2.12). Дифференцируя систему (5.4.32) по переменной x_k, мы получаем систему линейных алгебраических уравнений

$$\mathbf{J}_k \cdot \mathbf{r} = -\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial x_k} \tag{5.4.35}$$

относительно составляющих вектора

$$\mathbf{r} = (r_1, \ldots, r_n) = \left(\frac{\partial x_1}{\partial x_k}, \ldots, \frac{\partial x_{k-1}}{\partial x_k}, \frac{\partial x_{k+1}}{\partial x_k}, \ldots, \frac{\partial x_n}{\partial x_k}, \frac{\partial \alpha_2}{\partial x_k}\right). \tag{5.4.36}$$

Первое из условий (5.4.34) можно при этом записать в виде

$$r_n(x_1, x_2, \ldots, x_n, \alpha_1, \alpha_2) = 0 \text{ [1]}. \tag{5.4.37}$$

Дифференцируя (5.4.32) по α_1, получим систему

$$\mathbf{J}_k \cdot \mathbf{s} = -\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \alpha_1}, \tag{5.4.38}$$

где использовано обозначение

$$\mathbf{s} = (s_1, \ldots, s_n) = \left(\frac{\partial x_1}{\partial \alpha_1}, \ldots, \frac{\partial x_{k-1}}{\partial \alpha_1}, \frac{\partial x_{k+1}}{\partial \alpha_1}, \ldots, \frac{\partial x_n}{\partial \alpha_1}, \frac{\partial \alpha_2}{\partial \alpha_1}\right) \tag{5.4.39}$$

и, следовательно, второе из условий (5.4.34) записывается в виде

$$s_n(x_1, x_2, \ldots, x_n, \alpha_1, \alpha_2) = 0. \tag{5.4.40}$$

---

[1] Компоненты $\mathbf{r}$ имеют смысл производных $\frac{\partial x_j}{\partial x_k}$ $\left(\text{или } \frac{\partial \alpha_2}{\partial x_k}\right)$ на поверхности $\mathbf{f} = 0$. Однако систему (5.4.35) можно рассматривать и вне этой поверхности; тогда $\mathbf{r} = \mathbf{r}(\mathbf{x}, \alpha_1, \alpha_2)$. Именно так понимается r_n в (5.4.37). — *Прим. ред.*

Отметим, что системы (5.4.35) и (5.4.38) имеют одну и ту же матрицу и, следовательно, решение их может быть найдено с помощью метода исключения Гаусса для обеих правых частей одновременно.

Итак, для определения координат точки P мы имеем в самом общем случае $n+2$ уравнений (5.4.32), (5.4.37) и (5.4.40) относительно $n+2$ неизвестных $x_1, x_2, \ldots, x_n, \alpha_1, \alpha_2$ [5.13]. Задавая значения этих неизвестных, мы можем найти левые части указанных $n+2$ уравнений и затем использовать для нахождения решений этой системы соответствующие итерационные процедуры, например обобщенный метод секущих или метод Ньютона с матрицей Якоби, подсчитываемой с помощью разностных формул (при аналитическом вычислении производных для соотношений (5.4.37) и (5.4.40) нам потребовалось бы вычислять частные производные второго порядка от функций f_i).

Изолы могут существовать либо при $\alpha_2 > \alpha_2^*$, либо при $\alpha_2 < \alpha_2^*$. Различить между собой эти два случая можно опытным путем, используя метод Ньютона для $\alpha_2 > \alpha_2^*$ и $\alpha_2 < \alpha_2^*$, причем существование решения доказывается сходимостью к этому решению на изоле[1]. Другая возможность заключается в том, чтобы вычислить частные производные второго порядка $\partial^2\varphi/\partial x_k^2$, $\partial^2\varphi/\partial x_k\,\partial\alpha_1$, $\partial^2\varphi/\partial\alpha_1^2$ и использовать условия Сильвестра для минимума и максимума функции $\varphi(x_k, \alpha)$. Так, если

$$\frac{\partial^2\varphi}{\partial x_k^2} > 0 \quad \text{и} \quad \frac{\partial^2\varphi}{\partial x_k^2}\cdot\frac{\partial^2\varphi}{\partial\alpha_1^2} - \left[\frac{\partial^2\varphi}{\partial x_k\,\partial\alpha_1}\right]^2 > 0, \tag{5.4.41}$$

то функция φ имеет минимум и, следовательно, изолы существуют при $\alpha_2 > \alpha_2^*$. Если же первое из неравенств (5.4.41) имеет обратный знак, то изолы существуют при $\alpha_2 < \alpha_2^*$.

Рассмотрим пример использования описанного выше алгоритма для нахождения точки возникновения изол. Обратимся вновь к *задаче* 1 в формулировке с использованием времени задержки τ, которое в данном случае играет роль параметра α_1. Обращаясь к рис. 5.2, мы видим, что критическое значение параметра a (выступающего здесь в роли параметра α_2) приблизительно равно 5. Воспользуемся соотношением (5.2.3). Стационарные состояния при этом описываются уравнением (5.2.4).

---

[1] Имеется в виду решение системы $\mathbf{f}(\mathbf{x}, \alpha_1, \alpha_2) = 0$ при фиксированных α_1 и α_2. — *Прим. ред.*

Используя формулы $\mathrm{Da} = k_0\tau$, $\beta = \alpha\tau$, имеем из (5.2.4)

$$f_1(\Theta, \tau, a) = -\Lambda\Theta + k_0\tau\left(B - \Theta - \frac{a\tau(\Theta - \Theta_c)}{\Lambda}\right) \times$$
$$\times \exp\frac{\Theta}{1 + \Theta/\gamma} - a\tau(\Theta - \Theta_c) = 0. \qquad (5.4.42)$$

Поскольку $n = 1$, мы получаем $x_k = x_1 = \Theta$. Уравнение (5.4.35) принимает вид

$$\frac{\partial f_1}{\partial a} \cdot r_1 = -\frac{\partial f_1}{\partial \Theta} \qquad (5.4.43)$$

и, следовательно, соотношение (5.4.37) эквивалентно условию

$$\frac{\partial f_1}{\partial \Theta} = -\Lambda + \left[-\left(1 + \frac{a\tau}{\Lambda}\right) + \left(B - \Theta - \frac{a\tau(\Theta - \Theta_c)}{\Lambda}\right)\frac{1}{(1 + \Theta/\gamma)^2}\right] \times$$
$$\times k_0\tau \exp\frac{\Theta}{1 + \Theta/\gamma} - a\tau = 0. \qquad (5.4.44)$$

Аналогичным образом, уравнение (5.4.38) записывается в виде

$$\frac{\partial f_1}{\partial a} \cdot s_1 = -\frac{\partial f_1}{\partial \tau}, \qquad (5.4.45)$$

а условие (5.4.40) дает

$$\frac{\partial f_1}{\partial \tau} = k_0\left[B - \Theta - \frac{2a\tau(\Theta - \Theta_c)}{\Lambda}\right]\exp\frac{\Theta}{1 + \Theta/\gamma} - a(\Theta - \Theta_c) = 0. \qquad (5.4.46)$$

Таким образом, мы имеем три уравнения (5.4.42), (5.4.44) и (5.4.46) для трех неизвестных Θ, τ и a. Ход итераций, полученных при использовании метода Ньютона с матрицей Якоби, которая вычислялась с помощью соответствующих разностных формул, представлен в табл. 5.10. Полученные результаты соответствуют диаграмме решений, изображенной на рис. 5.2.

Таблица 5.10. Расчет точки возникновения изол для *задачи* 1. (Метод Ньютона для системы уравнений (5.4.42), (5.4.44) и (5.4.46); $\gamma = 20$, $B = 10$, $\Lambda = 1$, $\Theta_c = -5$, $k_0 = 1$).

Итерация	Θ	τ	a
0	5,0000	0,04000	5,0000
1	5,6148	0,03739	4,8189
2	5,4867	0,03854	4,7568
3	5,4847	0,03857	4,7507
4	5,4847	0,03857	4,7508

В работе [5.13] был рассмотрен еще один алгоритм для определения точки возникновения изол. Так, на зависимости

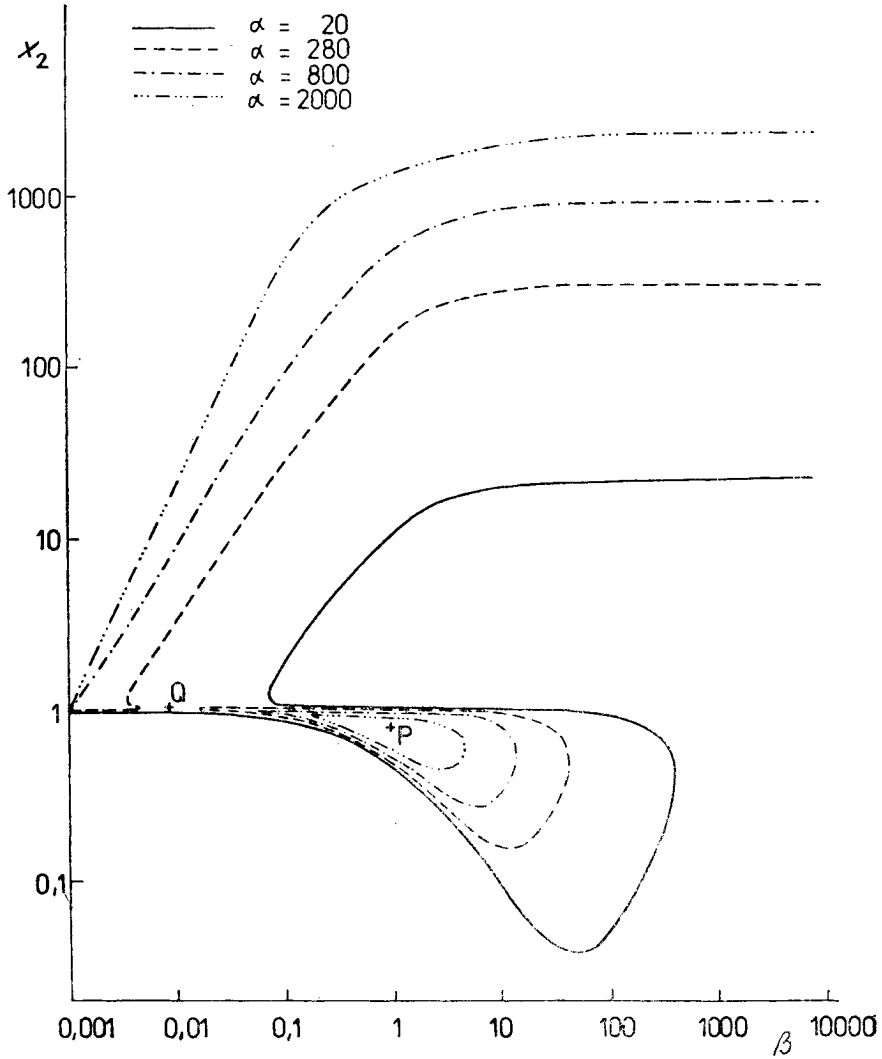


Рис. 5.12. Диаграмма стационарных решений *задачи* 3; $\mu = 8{,}4\cdot10^{-6}$, $f = 2$, $\varepsilon = 6{,}6667\cdot10^{-4}$, $\varepsilon' = 1{,}7778\cdot10^{-5}$. Точка P — см. рис. 5.10, точки P и Q — см. рис. 5.20*b*.

$\mathbf{x}(\alpha_2)$ при $\alpha_1 = \alpha_1^*$ точка P представляет собой точку поворота (см. также рис. 5.10). Необходимое условие для точки P имеет

при этом вид

$$f_{n+1}(x_1, \ldots, x_n, \alpha_1, \alpha_2) = \det \mathbf{J}(x_1, \ldots, x_n, \alpha_1, \alpha_2) = 0, \quad (5.4.47)$$

где $\mathbf{J} = [\partial f_i/\partial x_j]$ — матрица Якоби. При фиксированном $x_k = x_k^*$ зависимость $(x_1, \ldots, x_{k-1}, x_{k+1}, \ldots, x_n, \alpha_1)$ от α_2 также имеет точку поворота, и поэтому должно быть выполнено условие

$$f_{n+2}(x_1, \ldots, x_n, \alpha_1, \alpha_2) = \det \mathbf{J}_k(x_1, \ldots, x_n, \alpha_1, \alpha_2) = 0, \quad (5.4.48)$$

где матрица $\mathbf{J}_k$ определяется по формуле (5.2.12) при $x_{n+1} = \alpha_1$. Объединив (5.4.32), (5.4.47) и (5.4.48), мы вновь получаем $n+2$ нелинейных уравнений относительно $n+2$ неизвестных. Отметим, что уравнения (5.4.47) и (5.4.48) формально тождественны соотношениям (5.4.1) и (5.4.2) для нахождения точек ветвления. Однако здесь мы имеем на одну переменную больше (добавится α_2), и для решения этой системы мы используем метод Ньютона (в отличие от п. 5.4.1, где применялся метод Гаусса — Ньютона). Читатель, который воспользуется вторым методом для нахождения точек возникновения изол в уравнении (5.4.42), получит те же результаты, что и в случае применения первого метода, поскольку здесь $n = 1$.

Применим оба описанных подхода для анализа *задачи* 3, где роль параметра α_1 будет играть параметр β, а роль параметра α_2 — параметр α. Пример расчета итераций по методу Ньютона (матрица Якоби вычисляется с помощью соответ-

Таблица 5.11. Расчет точек возникновения изол в *задаче* 3 ($\mu = 8{,}4 \times 10^{-6}$, $f = 2$, $\varepsilon = 6{,}6667 \times 10^{-4}$, $\varepsilon' = 1{,}7778 \times 10^{-5}$). Ход итераций по методу Ньютона.

Метод	Итерация	x_1	x_2	x_3	α	β
Ф-лы (5.4.32), (5.4.37), (5.4.40)	0	0,200	1,000	0,100	0,300	1,000
	1	0,251	0,797	0,125	2022	1,018
	2	0,251	0,748	0,125	3496	1,010
	3	0,249	0,750	0,125	3508	0,997
	4	0,249	0,750	0,125	3508	0,997
Ф-лы (5.4.32), (5.4.47), (5.4.48)	0	0,200	1,000	0,100	0,300	1,000
	1	0,156	0,889	0,106	1562	0,444
	2	0,216	0,789	0,129	3737	0,704
	3	0,257	0,741	0,127	3569	1,019
	4	0,250	0,750	0,125	3511	0,998
	5	0,249	0,750	0,125	3508	0,997
	6	0,249	0,750	0,125	3508	0,997

ствующих разностных формул) приведен в табл. 5.11. Соответствующая диаграмма решений для различных значений параметра α изображена на рис. 5.12.

5.5. КОМПЛЕКСНАЯ БИФУРКАЦИЯ (БИФУРКАЦИЯ ХОПФА) [11]

Устойчивость стационарного решения системы (5.1.1) характеризуется собственными числами матрицы Якоби, определяемой правыми частями соответствующих уравнений. Если мы изменяем один из параметров системы, то вдоль ветви решения на соответствующей диаграмме решений характер устойчивости может изменяться лишь в точках, где собственное число переходит из левой половины комплексной плоскости в правую. Переход вещественного собственного числа через нуль обсуждался нами в § 5.2. Если пара комплексно-сопряженных собственных чисел пересекает мнимую ось, то матрица Якоби все время остается невырожденной, и на диаграмме стационарных решений мы имеем регулярную точку данной ветви. Однако характер стационарного решения при этом переходе может измениться: устойчивое решение может стать неустойчивым (или наоборот). Точки диаграммы стационарных решений, в которых пара комплексно-сопряженных собственных чисел пересекает мнимую ось, называются точками комплексной бифуркации[1] или точками бифуркации Хопфа, по имени математика, опубликовавшего одну из основополагающих работ о характере решений в окрестности таких точек. Следующий существенный факт мотивирует разработку алгоритмов для нахождения точек комплексной бифуркации: в указанных точках (при выполнении определенных условий) от ветви стационарных решений отходит ветвь периодических решений. Этот параграф мы посвятим методам определения этих точек; алгоритмам для расчета и продолжения периодических решений будет посвящен § 5.8.

5.5.1. Аналитические подходы

В случае некоторых задач невысокой размерности для нахождения точек комплексной бифуркации нет необходимости обращаться к численным методам. Можно воспользоваться аналитическими подходами, основанными на том, что мы легко раскрываем определители матриц порядка 2 и 3 и находим корни многочленов такой же степени[2].

[1] Этот термин не является общепринятым. — *Прим. ред.*

[2] Корни многочлена третьей степени легко находятся, если среди них есть чисто мнимые.

Проиллюстрируем сказанное на примере двух задач: модели Лоренца (см. *задачу* 10) и модели реактора с перемешиванием для реакции 1-го порядка (см. *задачу* 1).

Модель Лоренца описывается системой уравнений

$$\begin{aligned} \dot{x} &= -\sigma x + \sigma y, \\ \dot{y} &= -xz + rx - y, \\ \dot{z} &= xy - bz, \end{aligned} \tag{5.5.1}$$

правые части которых имеют матрицу Якоби вида

$$\mathbf{J} = \begin{bmatrix} -\sigma & \sigma & 0 \\ r - z & -1 & -x \\ y & x & -b \end{bmatrix}. \tag{5.5.2}$$

Для нетривиального стационарного решения (см. формулу (P10-5))

$$x = y = \pm [b(r-1)]^{1/2}, \quad z = r - 1, \quad r > 1 \tag{5.5.3}$$

построим характеристический многочлен матрицы $\mathbf{J}$

$$P(\lambda) = \lambda^3 + (\sigma + b + 1)\lambda^2 + b(r + \sigma)\lambda + 2\sigma b(r - 1). \tag{5.5.4}$$

В точке бифуркации Хопфа этот многочлен должен иметь два взаимно сопряженных чисто мнимых корня, которые мы обозначим как $\pm i\lambda_0$. Третий (вещественный) корень обозначим λ_1. Тогда

$$P(\lambda) = (\lambda + i\lambda_0)(\lambda - i\lambda_0)(\lambda - \lambda_1) = \lambda^3 - \lambda_1\lambda^2 + \lambda_0^2\lambda - \lambda_1\lambda_0^2. \tag{5.5.5}$$

Сравнивая формулы (5.5.4) и (5.5.5), получим

$$\begin{aligned} \sigma + b + 1 &= -\lambda_1, \\ b(r + \sigma) &= \lambda_0^2, \\ 2\sigma b(r - 1) &= -\lambda_1\lambda_0^2. \end{aligned} \tag{5.5.6}$$

Считая σ и b фиксированными, имеем систему трех уравнений относительно неизвестных λ_0, λ_1 и r. Если учесть, что $r > 1$, то из уравнений (5.5.6) следует, что $\lambda_1 < 0$ и $\lambda_0 \neq 0$. Перемножая левые и правые части первых двух уравнений системы (5.5.6) и вычитая полученный результат из последнего уравнения (5.5.6), мы получаем соотношение [1]

$$(\sigma + b + 1)\, b(r + \sigma) = 2\sigma b(r - 1),$$

[1] Если вещественный многочлен $\lambda^3 + A_2\lambda^2 + A_1\lambda + A_0$ имеет чисто мнимый корень, то $A_0 = A_1A_2$. — *Прим. ред.*

в которое входит только неизвестная r. Отсюда

$$r^+ = \frac{\sigma(\sigma + b + 3)}{(\sigma - b - 1)}, \tag{5.5.7}$$

где r^+ — значение параметра r в точке комплексной бифуркации; значения переменных x^+, y^+, z^+ подсчитываются по формулам (5.5.3).

Для системы двух дифференциальных уравнений с матрицей Якоби

$$\mathbf{J} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix}, \tag{5.5.8}$$

характеристический многочлен $\mathbf{J}$ имеет вид

$$P(\lambda) = \lambda^2 - (a_{11} + a_{22})\lambda + (a_{11}a_{22} - a_{21}a_{12}). \tag{5.5.9}$$

В точке комплексной бифуркации этот многочлен имеет два чисто мнимых корня:

$$P(\lambda) = (\lambda - i\lambda_0)(\lambda + i\lambda_0) = \lambda^2 + \lambda_0^2. \tag{5.5.10}$$

Сравнение (5.5.9) и (5.5.10) дает

$$\begin{gathered} a_{11} + a_{22} = 0, \\ a_{11}a_{22} - a_{21}a_{12} = \lambda_0^2 > 0. \end{gathered} \tag{5.5.11}$$

Используем теперь описанный подход для отыскания точек комплексной бифуркации в *задаче* 1. Матрица Якоби для правых частей уравнений (P1-6) и (P1-7) имеет вид

$$\mathbf{J} = \begin{bmatrix} -\Lambda - \mathrm{Da}\,E(\Theta) & \mathrm{Da}\,(1-x)\,E_1(\Theta) \\ -\mathrm{Da}\,BE(\Theta) & -\Lambda + \mathrm{Da}\,B(1-x)\,E_1(\Theta) - \beta \end{bmatrix}, \tag{5.5.12}$$

где введены обозначения $E(\Theta) = \exp(\Theta/(1 + \Theta/\gamma))$ и $E_1(\Theta) = E(\Theta)/(1 + \Theta/\gamma)^2$.

Первое из условий (5.5.11) приводит нас к уравнению

$$-2\Lambda - \mathrm{Da}\,E(\Theta) + \mathrm{Da}\left(B - \Theta - \frac{\beta}{\Lambda}(\Theta - \Theta_c)\right)E_1(\Theta) - \beta = 0, \tag{5.5.13}$$

где мы подставили $x = \Theta/B + \beta(\Theta - \Theta_c)/B\Lambda$ (см. формулу (5.2.3)). Уравнения, описывающие стационарное состояние, дают еще соотношение между Θ и Da (см. (5.4.16):

$$\mathrm{Da} = \frac{\beta(\Theta - \Theta_c) + \Lambda\Theta}{\left(B - \Theta - \dfrac{\beta(\Theta - \Theta_c)}{\Lambda}\right)E(\Theta)}. \tag{5.5.14}$$

Подставляя выражение для Da в уравнение (5.5.13), мы получаем кубическое уравнение относительно Θ (при фиксированных B, Λ, β, Θ_c) следующего вида:

$$\left(\beta(\Theta-\Theta_c)+\Lambda\Theta-(2\Lambda+\beta)(1+\Theta/\gamma)^2\right)\left(B-\Theta-\frac{\beta(\Theta-\Theta_c)}{\Lambda}\right)-$$
$$-\left(\beta(\Theta-\Theta_c)+\Lambda\Theta\right)(1+\Theta/\gamma)^2=0. \quad (5.5.15)$$

Решение этого уравнения дает нам значения переменной Θ^+, после чего по формуле (5.5.14) нетрудно найти значения параметра Da^+, отвечающие точке комплексной бифуркации. В табл. 5.12 приведен пример такого расчета для двух значений параметра B в предельном случае $\gamma\to\infty$ (когда (5.5.15) сводится к квадратному уравнению).

Таблица 5.12. Нахождение точек комплексной бифуркации для *задачи* 1 ($\gamma\to\infty$, $\Lambda=0{,}5$, $\beta=0{,}8$, $\Theta_c=0$).

B	Θ^+	Da^+
9	1,80248	0,08957
9	2,65906	0,11600
10	1,68425	0,07229
10	3,16190	0,09784

В приведенных примерах мы определяли точки бифуркации Хопфа для задач, размерность которых не превышала 3. Для задач, описываемых системами более чем из 3 дифференциальных уравнений, исследователям приходится обычно использовать различного рода численные подходы. Часть из них будет рассмотрена в следующих двух пунктах [5.14, 5.15, 5.16].

5.5.2. Методы декомпозиции

В точке комплексной бифуркации (бифуркации Хопфа) $(x_1^+, \ldots, x_n^+, \alpha^+)$ матрица Якоби $\mathbf{J}$ имеет два (взаимно) сопряженных чисто мнимых собственных числа λ_1 и λ_2, т. е.

$$\lambda_{1,2}=\pm i\sqrt{\omega^+}, \quad \omega^+>0. \quad (5.5.16)$$

Запишем характеристический многочлен матрицы $\mathbf{J}$,

$$P(\lambda)=\lambda^n+a_1\lambda^{n-1}+\ldots+a_{n-1}\lambda+a_n, \quad (5.5.17)$$

и представим его в виде

$$P(\lambda)=(\lambda^2+\omega^+)P_{n-2}(\lambda), \quad (5.5.18)$$

где $P_{n-2}(\lambda)$ — многочлен степени $n-2$. Для нахождения величины ω^+ (заранее неизвестной) перепишем $P(\lambda)$ в форме

$$P(\lambda)=(\lambda^2+\omega)(\lambda^{n-2}+p_1\lambda^{n-3}+\ldots+p_{n-3}\lambda+p_{n-2})+A\lambda+B.$$

Коэффициенты $p_1, \ldots, p_n$, A и B могут быть вычислены по рекуррентным формулам

$$\begin{gathered} p_{-1}=0, \quad p_0=1, \quad p_k=a_k-\omega p_{k-2}, \quad k=1, 2, \ldots, n-2 \\ A=a_{n-1}-\omega p_{n-3}, \quad B=a_n-\omega p_{n-2}. \end{gathered} \tag{5.5.19}$$

Величины p_i, A и B зависят от $\mathbf{x}$, α и ω. При этом для точки комплексной бифуркации выполняются соотношения

$$\begin{aligned} f_{n+1}(x_1, \ldots, x_n, \alpha, \omega)&=A(x_1, \ldots, x_n, \alpha, \omega)=0, \\ f_{n+2}(x_1, \ldots, x_n, \alpha, \omega)&=B(x_1, \ldots, x_n, \alpha, \omega)=0. \end{aligned} \tag{5.5.20}$$

Таким образом, в общем случае мы имеем $(n+2)$ нелинейных уравнений (5.1.3), (5.5.20) относительно $(n+2)$ неизвестных $x_1, \ldots, x_n$, α, ω. Решение этих уравнений позволяет нам найти точку комплексной бифуркации. Для нахождения решения можно воспользоваться методом Ньютона, а для вычисления элементов матрицы Якоби в методе Ньютона можно частично (для нахождения производных от f_{n+1} и f_{n+2}) использовать разностные формулы. Можно использовать и аналитические выражения, однако в случае больших n это может оказаться весьма трудоемким.

Отметим, что коэффициенты $p_1, \ldots, p_{n-2}$ несут информацию об устойчивости стационарного решения в окрестности точки комплексной бифуркации (бифуркации Хопфа). Если все корни многочлена с указанными коэффициентами располагаются в левой полуплоскости (см. § 5.3), то стационарное решение будет устойчивым либо при $\alpha<\alpha^+$, либо при $\alpha>\alpha^+$.

Примеры применения описанного метода для трех различных точек комплексной бифуркации в случае *задачи* 2 представлены в табл. 5.13. При этом в качестве параметра α использовалось число Дамкелера в первом реакторе каскада Da_1.

Если матрица $\mathbf{J}$ имеет собственное число λ, то матрица $\mathbf{J}^2$ обладает собственным числом λ^2. Для собственных чисел (5.5.16) мы имеем $\lambda_{1,2}^2=-\omega^+$. Итак, матрица $\mathbf{J}^2$ имеет отрицательное вещественное собственное число $-\omega^+$ кратности два. Обозначим характеристический многочлен матрицы $\mathbf{J}^2$ через $Q(\omega)$. Тогда в точке бифуркации Хопфа имеют место условия

Таблица 5.13. Сходимость метода Ньютона для системы (5.1.3), (5.5.20) к точкам бифуркации Хопфа в случае *задачи* 2 ($\gamma = 1000$, $B = 12$, $\beta_1 = \beta_2 = 2$, $\Theta_{c1} = \Theta_{c2} = 0$, $\Lambda = 0{,}8$, $\mathrm{Da}_2 = 0{,}2$, $\alpha = \mathrm{Da}_1$)

Итерация	x_1	Θ_1	x_2	Θ_2	α	ω	$\left(\sum_{i=1}^{6} f_i^2\right)^{1/2}$
0	0,4000	1,0000	0,7000	1,8000	0,1000	0,5000	8,7E—1
1	0,2740	0,6766	0,6788	1,8553	0,0961	0,4542	2,2E—2
2	0,2713	0,6651	0,6794	1,8543	0,0956	0,4492	1,8E—4
3	0,2712	0,6651	0,6794	1,8543	0,0956	0,4491	
0	0,4000	1,0000	0,8000	1,5000	0,2000	5,0000	1,4E—1
3	0,5335	1,6347	0,7374	1,3617	0,1619	0,7836	4,9E—1
5	0,5051	1,5328	0,7257	1,3931	0,1574	0,8851	2,9E—4
6	0,5051	1,5328	0,7257	1,3931	0,1574	0,8851	
0	0,5000	0,5000	0,5000	2,0000	0,1000	1,0000	8,2E0
1	0,2946	0,6751	0,8303	2,4168	0,0973	0,9234	2,1E0
2	1,1108	4,0803	0,2672	—2,2388	0,5450	3,1930	2,8E3
8	0,8252	2,6636	0,8931	1,1595	0,2541	4,7451	9,6E0
10	0,8384	2,7097	0,9010	1,1538	0,2730	7,1047	9,6E—2
11	0,8383	2,7093	0,9010	1,1539	0,2730	7,0957	2,4E—4
12	0,8383	2,7093	0,9010	1,1539	0,2730	7,0957	

$Q(-\omega^+) = 0$, $Q'(-\omega^+) = 0$. Соотношения (5.5.20) заменяются при этом соотношениями

$$f_{n+1}(x_1, \ldots, x_n, \alpha, \omega) = Q(\omega) = 0,$$
$$f_{n+2}(x_1, \ldots, x_n, \alpha, \omega) = \frac{dQ(\omega)}{d\omega} = 0. \qquad (5.5.21)$$

Систему $f_j(\mathbf{x}, \alpha, \omega) = 0$ ($j = 1, \ldots, n+2$; см. (5.1.3) и (5.5.21)) можно решать методом Ньютона. Если этот метод дает сходимость к точке $(\mathbf{x}^+, \alpha^+, -\omega^+)$, где $\omega^+ < 0$, то она не является точкой бифуркации Хопфа, поскольку тогда матрица $\mathbf{J}$ имеет два вещественных собственных числа

$$\lambda_{1,2} = \pm\sqrt{-\omega^+}.$$

5.5.3. Прямые итерационные процедуры

Описываемые здесь методы не требуют вычисления характеристического многочлена, как в предыдущем пункте.

Пусть $\mathbf{u}$ — собственный вектор матрицы Якоби $\mathbf{J}$, соответствующий собственному числу λ:

$$\mathbf{J}\mathbf{u} = \lambda\mathbf{u}. \qquad (5.5.22)$$

В точке комплексной бифуркации мы имеем $\lambda = is$, $s \in R^1$ и $\mathbf{u} = \mathbf{v} + i\mathbf{w}$, где $\mathbf{v}$ и $\mathbf{w}$ — вещественные векторы. Разделяя в (5.5.22) вещественные и мнимые части, получаем

$$\mathbf{Jv} + s\mathbf{w} = \mathbf{0}, \tag{5.5.23}$$

$$\mathbf{Jw} - s\mathbf{v} = \mathbf{0}. \tag{5.5.24}$$

Запишем теперь уравнения (5.5.23) и (5.5.24) покомпонентно в виде

$$f_i(x_1, \ldots, x_n, \alpha, s, v_1, \ldots, v_n, w_1, \ldots, w_n) = 0,$$
$$i = n+1, n+2, \ldots, 3n, \tag{5.5.25}$$

где f_i, $i = 1, 2, \ldots, n$, — правые части исходной системы (5.1.1).

Произведение вектора $\mathbf{u}$ на произвольное комплексное число также является собственным вектором матрицы $\mathbf{J}$, соответствую-

	$x_1, \ldots, x_n$	α	s	$\tilde{v}$	$\tilde{w}$
(5.1.3)	⊗	⊗	—	—	—
(5.5.23)	×	×	⊗	⊗	⊗
(5.5.24)	×	×	⊗	⊗	⊗

Рис. 5.13. Матрица размещения для уравнений (5.1.3), (5.5.23), (5.5.24).

щим собственному числу $\lambda = is$. Это означает, что, вообще говоря, мы можем выбрать произвольно две составляющих векторов $\mathbf{v}$ и $\mathbf{w}$. Мы не будем обсуждать здесь условия успешности подобного выбора. Так, могут иметь место ситуации, когда этот выбор окажется неудачным, однако при случайном выборе это маловероятно.

Система уравнений (5.1.3) и (5.5.25) представляет собой систему $3n$ нелинейных уравнений относительно $(3n+2)$ неизвестных $(x_1, x_2, \ldots, x_n, \alpha, s, v_1, v_2, \ldots, v_n, w_1, w_2, \ldots, w_n)$. Из последних $2n$ неизвестных мы, однако, считаем две переменных фиксированными, в результате чего у нас получается система $3n$ уравнений относительно $3n$ неизвестных, решение которой можно вновь строить с помощью метода Ньютона. Часть элементов матрицы Якоби нетрудно найти аналитически, а оставшиеся элементы определить, аппроксимируя частные производные конечными разностями. Таблица вхождения переменных в уравнения решаемой системы представлена на рис. 5.13. Она определяет также отличные от нуля элементы матрицы Якоби (порядка $3n$). Те из них, которые можно определить

аналитически[1]), обозначены на рисунке кружком. С учетом выбора двух компонент векторов $\mathbf{v}$ и $\mathbf{w}$ (которые остаются фиксированными в ходе итераций по методу Ньютона), векторы $\mathbf{v}$ и $\mathbf{w}$ могут иметь размерность в соответствии с одним из следующих трех вариантов:

1. $\dim \tilde{\mathbf{v}} = n - 2$, $\dim \tilde{\mathbf{w}} = n$, фиксированы 2 компоненты вектора $\mathbf{v}$.
2. $\dim \tilde{\mathbf{v}} = n - 1$, $\dim \tilde{\mathbf{w}} = n - 1$, фиксированы по одной компоненте векторов $\mathbf{v}$ и $\mathbf{w}$.
3. $\dim \tilde{\mathbf{v}} = n$, $\dim \tilde{\mathbf{w}} = n - 2$, фиксированы 2 компоненты вектора $\mathbf{w}$.

Пример сходимости метода Ньютона при решении системы уравнений (5.1.3), (5.5.23), (5.5.24) приведен в табл. 5.14. В таблице указано, какие две компоненты векторов $\mathbf{v}$ и $\mathbf{w}$ выбирались фиксированными. Предлагаем читателю сравнить найденную точку комплексной бифуркации с результатами, представленными в табл. 5.13.

Еще один метод, который мы здесь рассмотрим, основан на аналогичном принципе, однако размерность решаемой нелинейной системы оказывается более низкой ($2n$ вместо $3n$).

Из уравнений (5.5.23) и (5.5.24) легко находим

$$\mathbf{J}^2\mathbf{v} + s^2\mathbf{v} = \mathbf{0}. \tag{5.5.26}$$

Запишем (5.5.26) в виде

$$f_i(x_1, \ldots, x_n, \alpha, \omega, v_1, \ldots, v_n) = 0, \quad i = n + 1, \ldots, 2n, \tag{5.5.27}$$

где использовано обозначение $\omega = s^2$. Таким образом, мы имеем систему $2n$ нелинейных уравнений (5.1.3), (5.5.27) относительно $2n + 2$ неизвестных $x_1, \ldots, x_n, \alpha, \omega, v_1, \ldots, v_n$. В векторе $\mathbf{v}$ мы снова можем произвольно задать две его составляющие. На рис. 5.14 представлена «таблица вхождения» неизвестных для решаемой системы. Элементы матрицы Якоби (порядка $2n$), которые можно легко найти аналитически, обозначены кружками. Характер сходимости метода Ньютона хорошо виден из табл. 5.15.

В заключение параграфа сравним особенности методов, описанных в пп. 5.5.2 и 5.5.3. Так, если сравнивать ограничения на объем памяти и число операций для каждого из этих мето-

[1]) В предположении, что производные правых частей исходной системы по x_i и α находятся аналитически. — *Прим. ред.*

Таблица 5.14. Сходимость метода Ньютона к точке бифуркации для системы (5.1.3), (5.5.23), (5.5.24) в случае *задачи* 2 ($\gamma = 1000$, $B = 12$, $\beta_1 = \beta_2 = 2$, $\Theta_{c1} = \Theta_{c2} = 0$, $\Lambda = 0{,}8$, $\mathrm{Da}_2 = 0{,}2$, $\alpha = \mathrm{Da}_1$).

Номер итерации	x_1	Θ_1	x_2	Θ_2	α	s	v_1	v_2	v_3	v_4	w_1	w_2	w_3	w_4	$\left(\sum_{i=1}^{12} f_i^2\right)^{1/2}$
0	0,5000	1,0000	0,7000	1,9000	0,1000	0,7000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,2 E1
1	0,3531	0,9915	0,6149	1,0634	0,1410	0,7346			4,5930	11,7247	0,2824	3,4724	3,1896	33,0158	3,0 E1
2	0,2917	0,7728	0,6178	1,5015	0,1139	0,6250			3,9275	8,2677	0,4104	3,2657	3,0732	26,8698	5,6 E0
3	0,2713	0,6701	0,6696	1,8082	0,0980	0,6619			3,8409	6,8199	0,4261	3,3781	3,5048	30,7556	9,6 E−1
4	0,2714	0,6658	0,6793	1,8533	0,0957	0,6710	↓	↓	3,7973	6,4110	0,4341	3,4675	3,5808	32,0305	4,0 E−2
5	0,2712	0,6651	0,6794	1,8543	0,0956	0,6702	1,0000	1,0000	3,7990	6,4239	0,4339	3,4648	3,5813	32,0553	9,0 E−6
0	0,40000	1,0000	0,7000	1,8000	0,1000	0,5000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,1 E1
8	0,2712	0,6651	0,6794	1,8543	0,0956	0,6702	1,0000	1,0000	3,7990	6,4239	0,4339	3,4648	3,5813	32,0553	6,2 E−6

Таблица 5.15. Сходимость метода Ньютона при определении точки бифуркации Хопфа из системы (5.1.3), (5.5.27) в *задаче* 2 ($\gamma = 1000$, $B = 12$, $\Theta_{c1} = \Theta_{c2} = 0$, $\beta_1 = \beta_2 = 2$, $\Lambda = 0{,}8$, $\mathrm{Da}_2 = 0{,}2$, $\alpha = \mathrm{Da}_1$).

Номер итерации	x_1	Θ_1	x_2	Θ_2	α	s^2	v_1	v_2	v_3	v_4	$\left(\sum_{i=1}^{8} f_i^2\right)^{1/2}$
0	0,5000	1,0000	0,7000	1,9000	0,1000	0,4900	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	9,3 E0
1	0,2715	0,6620	0,7016	2,0588	0,0847	0,4574			2,9591	1,9184	4,6 E0
2	0,2687	0,6573	0,6738	1,8255	0,0949	0,4166			3,8157	6,9071	8,5 E−2
3	0,2712	0,6647	0,6795	1,8550	0,0955	0,4485	↓	↓	3,8019	6,4398	1,2 E−2
4	0,2712	0,6651	0,6794	1,8543	0,0956	0,4491	1,0000	1,0000	3,7990	6,4239	1,0 E−5

дов (приведены только главные члены в оцениваемых величинах), то из данных табл. 5.16 следует, что метод, основанный на решении системы (5.1.3), (5.5.23), (5.5.24), оказывается более предпочтительным для тех ЭВМ, у которых объем памяти достаточно велик.

Дальнейшие выводы мы можем сделать из рассмотрения данных табл. 5.17. Исходные значения всех переменных формировались случайным образом (с помощью генератора случайных чисел) из следующих промежутков: $x_1, x_2 \in (0, 1)$, Θ_1, $\Theta_2 \in (0, 4)$, $\alpha \in (0, 1)$, $s \in (0, 10)$, v_i, $w_i \in (-20, 20)$, где $s^2 = \omega$.

	$x_1, \ldots, x_n$	α	s^2	$\tilde{v}$
(5.1.3) (5.5.26)	$\otimes$ $\times$	$\otimes$ $\times$	— $\otimes$	— $\otimes$

Рис. 5.14. Матрица размещения для уравнений (5.1.3), (5.5.26), $\dim \tilde{v} \neq n - 2$.

Случайно выбирались также индексы и величины составляющих векторов **v** и **w**, которые остаются фиксированными в ходе решения. Выбранные исходные значения для каждого из четырех рассмотренных методов использовались в качестве начальной аппроксимации для метода Ньютона. При этом оказалось, что с точки зрения сходимости наихудшие результаты дает метод с использованием уравнений (5.1.3), (5.5.21).

Таблица 5.16. Скорость роста объема памяти и числа операций при увеличении n для разных методов отыскания точки комплексной бифуркации.

Метод (система)	Объем памяти	Число операций
(5.1.3) (5.5.20)	$2n^2$	n^4
(5.1.3) (5.5.21)	$3n^2$	n^4
(5.1.3) (5.5.23) (5.5.24)	$10n^2$	n^3
(5.1.3) (5.5.26)	$6n^2$	n^4

Таблица 5.17. Эффективность различных методов для *задачи* 2. Здесь же указано число начальных приближений (из общего числа 1000 приближений, выбранных случайным образом), при которых метод Ньютона сходится к какому-либо из трех решений. Значения параметров: $\gamma = 1000$, $B = 12$, $\beta_1 = \beta_2 = 2$, $\Theta_{c1} = \Theta_{c2} = 0$, $\Lambda = 0{,}8$, $\mathrm{Da}_1 = 0{,}2$, $\alpha = \mathrm{Da}_1$.

Решения						Система (5.1.3) совместно с			
x_1^+	θ_1^+	x_2^+	θ_2^+	α^+	s^+	(5.5.20)	(5.5.21)	(5.5.23, 24)	(5.5.26)
0,2712	0,6651	0,6794	1,8543	0,0956	0,6702	0	0	30	32
0,5051	1,5328	0,7257	1,3931	0,1574	0,9408	44	0	56	44
0,8383	2,7093	0,9010	1,1539	0,2730	2,6638	145	1	26	46

Методы, рассмотренные в данном пункте, легко обобщаются на случай нахождения точек комплексной бифуркации для дифференциальных уравнений с частными производными параболического типа. Это обобщение будет проведено в гл. 6.

5.6. БИФУРКАЦИОННАЯ ДИАГРАММА

Рассмотрим нелинейную динамическую модель (5.1.1) с двумя параметрами

$$\frac{dx_i}{dt} = f_i(x_1, \ldots, x_n, \alpha, \beta), \quad i = 1, 2, \ldots, n. \tag{5.6.1}$$

Будем исследовать поведение стационарных состояний системы (5.6.1) и их устойчивость в «параметрической плоскости $\beta - \alpha$». В частности, нас будут интересовать критические значения этих параметров, при которых возникают бифуркации — изменения числа решений или изменения характера устойчивости отдельных решений.

В § 5.4 мы научились определять координаты точки поворота $(x_1^*, \ldots, x_n^*, \alpha^* = \alpha_0)$ при выбранном значении параметра $\beta = \beta_0$. Используя алгоритм продолжения, можно найти зависимость координат точки поворота от параметра β. Таким образом, в параметрической плоскости $(\beta - \alpha)$ мы получаем некоторую кривую, которую в дальнейшем мы будем называть кривой точек поворота или линией кратности. Схематически эта кривая изображена на рис. 5.15. Если мы непрерывно изменяем значения параметров α и β, то при каждом переходе через линию кратности число стационарных решений изменяется на два. Следовательно, если известны все линии кратности, то они

делят параметрическую плоскость $\beta - \alpha$ на некоторые области, в каждой из которых число стационарных решений остается постоянным. Точно так же, как и кривые точек поворота, мы можем построить кривую точек ветвления.

Аналогично мы можем находить точки комплексной бифуркации (бифуркации Хопфа) $(x_1^+, \ldots, x_n^+, \alpha^+)$ при изменении значений параметра β (см. рис. 5.16). Построенную таким образом кривую в параметрической плоскости $\beta - \alpha$ мы будем

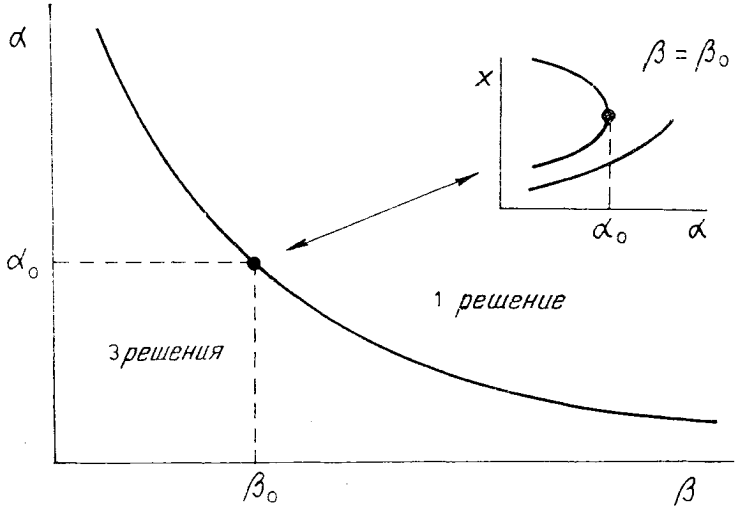


Рис. 5.15. Схематическое изображение процесса построения кривой точек поворота на бифуркационной диаграмме.

называть кривой точек комплексной бифуркации, или бифуркации Хопфа (их называют также «линии нейтральности». — *Ред.*). Наиболее интересными представляются те точки комплексной бифуркации, в которых (при изменении одного параметра) меняется устойчивость стационарного решения. Если мы изменяем параметры β и α таким образом, что пересекаем указанную кривую точек комплексной бифуркации, то при этом изменяется устойчивость одного из имеющихся стационарных решений задачи. Мы можем построить также кривые точек комплексной бифуркации, в которых устойчивость стационарного решения не меняется — эти кривые позволяют судить о рождении неустойчивых периодических решений.

Построив в параметрической плоскости $\beta - \alpha$ кривые точек поворота и кривые точек комплексной бифуркации, мы получаем так называемую бифуркационную диаграмму. При этом

плоскость $\beta - \alpha$ оказывается разделенной на области, в которых число стационарных решений и их устойчивость остаются неизменными.[12]

Рассмотрим сначала построение бифуркационной диаграммы в простом случае, когда мы могли воспользоваться методом

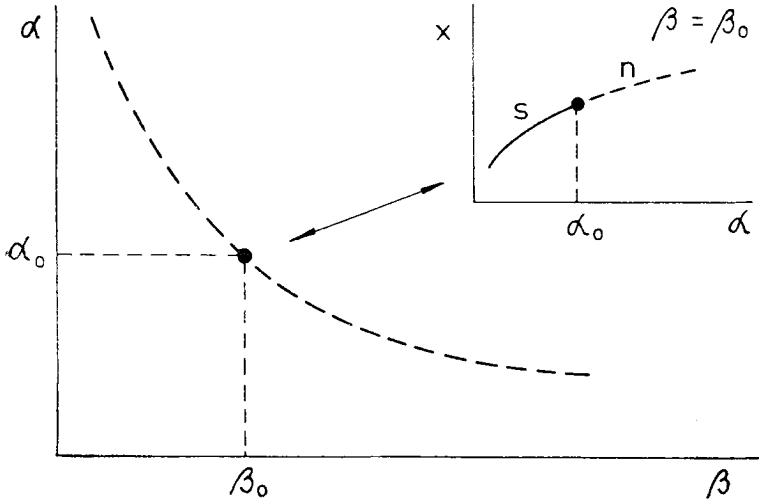


Рис. 5.16. Схематическое изображение процесса построения кривой точек комплексной бифуркации (бифуркации Андронова — Хопфа) на бифуркационной диаграмме; s — устойчивое стационарное решение, n — неустойчивое.

отображения параметра. Так, для *задачи* 1, согласно формуле (5.2.4) из § 5.2, мы имели

$$\mathrm{Da} = \frac{\beta(\Theta - \Theta_c) + \Lambda\Theta}{\left(B - \Theta - \dfrac{\beta(\Theta - \Theta_c)}{\Lambda}\right)\exp\dfrac{\Theta}{1 + \Theta/\gamma}}. \tag{5.6.2}$$

Далее, в § 5.4 для нахождения точки поворота на зависимости $\Theta(\mathrm{Da})$ из условия $d\mathrm{Da}/d\Theta = 0$ мы получили квадратное уравнение относительно Θ следующего вида:

$$a(\Lambda, \gamma, B, \beta, \Theta_c)\Theta^2 + b(\Lambda, \gamma, B, \beta, \Theta_c)\Theta + c(\Lambda, \gamma, B, \beta, \Theta_c) = 0. \tag{5.6.3}$$

Таким образом, для нахождения точки поворота $(\Theta^*, \mathrm{Da}^*)$ мы имеем два уравнения (5.6.2) и (5.6.3). Для построения бифуркационной диаграммы в плоскости параметров B — Da нам нужно было бы теперь продолжить решение (Θ, Da) уравнений (5.6.2) и (5.6.3) в зависимости от параметра B. Однако здесь

мы можем воспользоваться следующим более простым способом:

a) Выберем значение $\Theta \in (\Theta_c, B)$.

b) Из уравнения (5.6.3) найдем значение параметра B (это уравнение линейно относительно B).

c) Из уравнения (5.6.2) подсчитаем значение параметра Da.

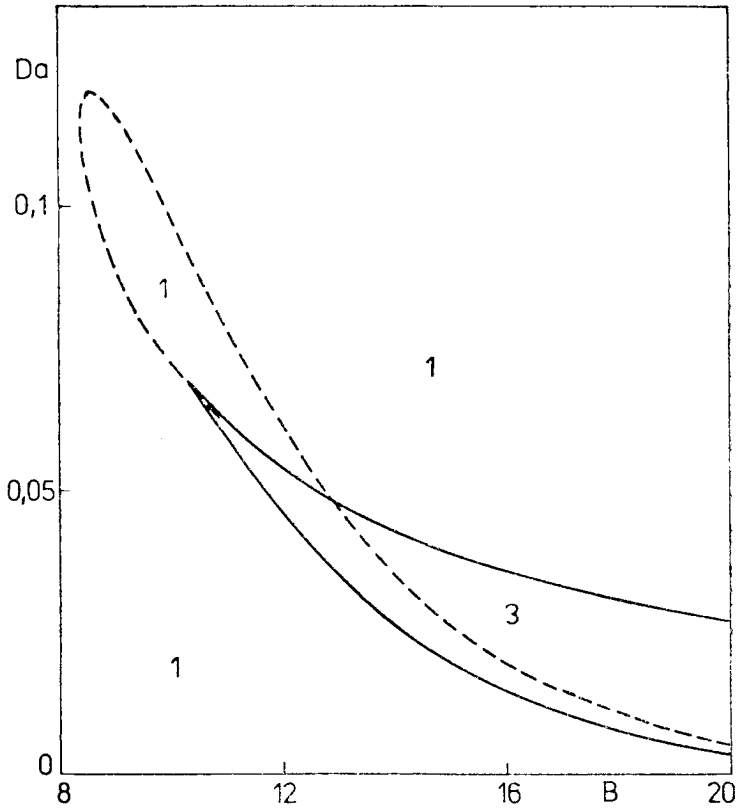


Рис. 5.17. Бифуркационная диаграмма *задачи* 1; $\gamma \to \infty$, $\Lambda = 0{,}5$, $\beta = 0{,}8$, $\Theta_c = 0$; сплошная линия — кривая точек поворота, штриховая линия — кривая точек бифуркации Андронова — Хопфа. В отдельных областях указано число стационарных решений.

Если мы получим физически разумные значения параметров B и Da (в данном случае положительные), то найденная пара чисел будет задавать точку на линии кратности (кривой точек поворота) бифуркационной диаграммы (см. рис. 5.17). На рис. 5.18 приведены несколько различных диаграмм решений.

Для нахождения точки комплексной бифуркации (бифуркации Хопфа) в случае *задачи* 1 в § 5.5 мы вывели уравнение (5.5.15), которое в общем виде записывается как

$$B\varphi_1(\Theta, \Lambda, \beta, \gamma, \Theta_c) + \varphi_2(\Theta, \Lambda, \beta, \gamma, \Theta_c) = 0. \qquad (5.6.4)$$

Конкретный вид функций φ_1 и φ_2 читатель легко может найти из формулы (5.5.15). Это уравнение вновь оказывается линей-

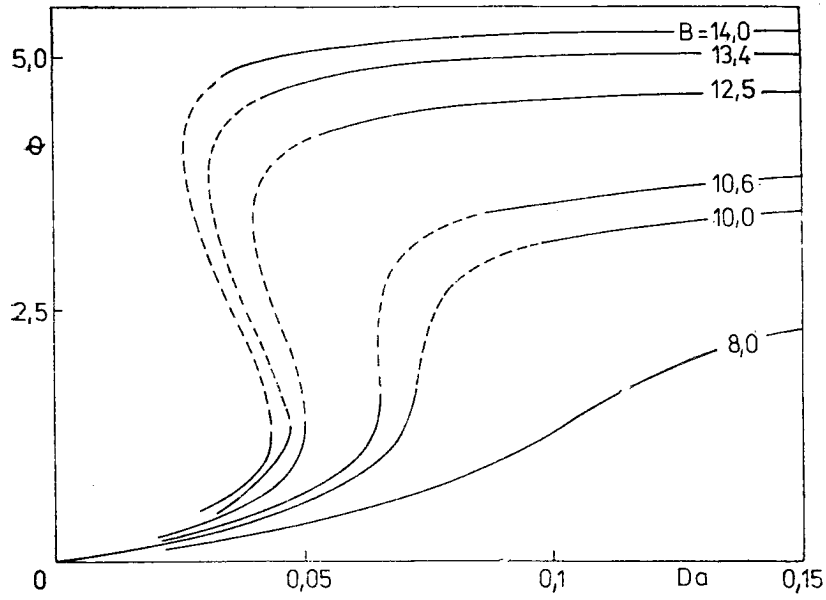


Рис. 5.18. Диаграмма стационарных решений *задачи* 1 для нескольких значений параметра B, $\gamma \to \infty$, $\Lambda = 0{,}5$, $\beta = 0{,}8$, $\Theta_c = 0$; сплошные линии — устойчивые решения, штриховые линии — неустойчивые решения.

ным относительно параметра B, в связи с чем мы можем применить использованный выше подход и для построения линии нейтральности (кривой точек комплексной бифуркации). Полученная кривая также изображена на бифуркационной диаграмме (рис. 5.17). Читатель может сопоставить кривую точек комплексной бифуркации и точки потери устойчивости на диаграммах решений, представленных на рис. 5.18. Далее, на рис. 5.19 изображены фазовые портреты системы двух дифференциальных уравнений (P1-6), (P1-7) *задачи* 1 для нескольких выбранных значений параметров B и Da с диаграммы бифуркаций. Здесь рассмотрены следующие качественно различные случаи:

a) предельный цикл вокруг одного неустойчивого стационарного состояния;
b) предельный цикл вокруг трех неустойчивых стационарных состояний;
c) три стационарных состояния, одно из которых устойчиво, а также предельный цикл вокруг неустойчивого стационарного состояния;

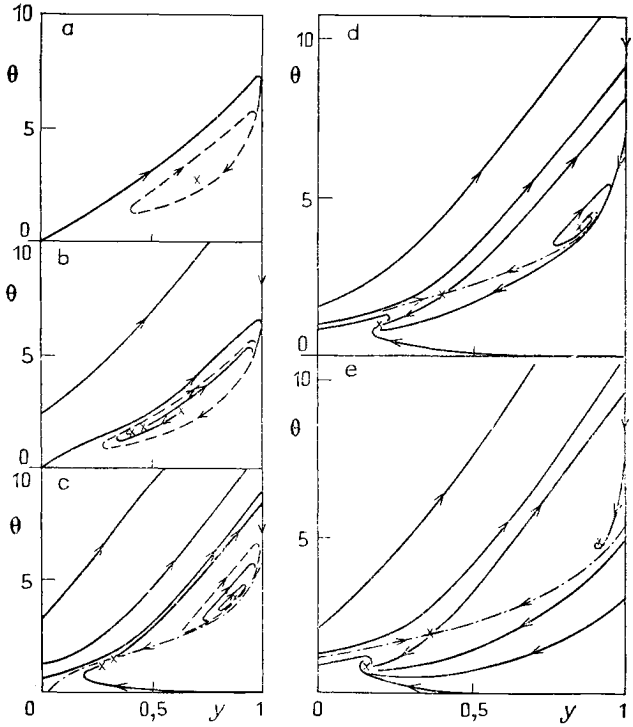


Рис. 5.19. Фазовые портреты *задачи* 1, $\gamma \to \infty$, $\beta = 0{,}8$, $\Lambda = 0{,}5$, $\Theta_c = 0$. *a*) $B = 10$, $\mathrm{Da} = 0{,}08$, *b*) $B = 10{,}6$, $\mathrm{Da} = 0{,}0653$, *c*) $B = 12{,}5$, $\mathrm{Da} = 0{,}0505$, *d*) $B = 12{,}6$; $\mathrm{Da} = 0{,}0475$, *e*) $B = 14$, $\mathrm{Da} = 0{,}04$; сплошная линия — траектория, штриховая линия — предельный цикл, штрихпунктирная линия — сепаратриса.

d) три стационарных состояния, одно из которых устойчиво;
e) три стационарных состояния, два из которых устойчивы.

Эти примеры были выбраны нами для того, чтобы читатель мог более четко уяснить зависимость между бифуркационной диаграммой, диаграммой решений и динамическим поведением системы (её фазовым портретом).

На рис. 5.20 приведены бифуркационные диаграммы для некоторых задач из гл. 4. При этом бифуркационная диаграмма для модели Лоренца (*задача* 10, рис. 5.20a) может быть построена аналитически.

Бифуркационная диаграмма для *задачи* 3 представлена на рис. 5.20b. Здесь изображены лишь кривые точек поворота, которые ограничивают область трех решений. Отметим, что точка возникновения изол (п. 5.4.3) отвечает «крайней» точке P на кривой точек поворота. Тот же вывод можно сделать из сравнения бифуркационной диаграммы с геометрической схемой, изображенной на рис. 5.10.

На рис. 5.20c приведена бифуркационная диаграмма для *задачи* 2. На ней изображены лишь кривые комплексной бифуркации (бифуркации Хопфа), причем стационарное решение остается единственным во всей плоскости параметров $Da_1 - Da_2$. Выделенные точки на бифуркационной диаграмме соответствуют точкам бифуркации Хопфа, вычисленным в § 5.5 (см. также табл. 5.13). При этом стационарное решение оказывается устойчивым в областях II и IV и, наоборот, неустойчивым в областях I и III, в которых, как мы увидим в § 5.8, существуют устойчивые периодические решения (предельные циклы).

На рис. 5.20d изображена бифуркационная диаграмма для *задачи* 6. Кривую точек поворота (линию кратности) можно вновь построить с помощью метода отображения параметра, как это сделано для рис. 5.17. Указанная кривая ограничивает область возникновения трех стационарных решений; вне этой области существует одно стационарное решение.

Бифуркационная диаграмма для *задачи* 4 представлена на рис. 5.20e в плоскости параметров $\delta - \alpha$. В области, ограниченной кривыми вещественных бифуркаций, существует три решения, вне этой области — одно решение. Кривые комплексной бифуркации указывают нам на ответвление периодических решений и изменение характера устойчивости стационарных решений. В области единственности стационарных решений эти кривые выделяют область существования устойчивых предельных циклов.

На рис. 5.20f изображена бифуркационная диаграмма для *задачи* 8 в плоскости параметров $B - D_1$. Ввиду симметрии системы некоторые кривые являются фактически сдвоенными, поскольку бифуркация возникает одновременно у двух взаимно симметричных решений при тех же самых значениях параметров (сравните с диаграммой решений на рис. 5.6d). Для каждой области на бифуркационной диаграмме указано общее число стационарных решений.

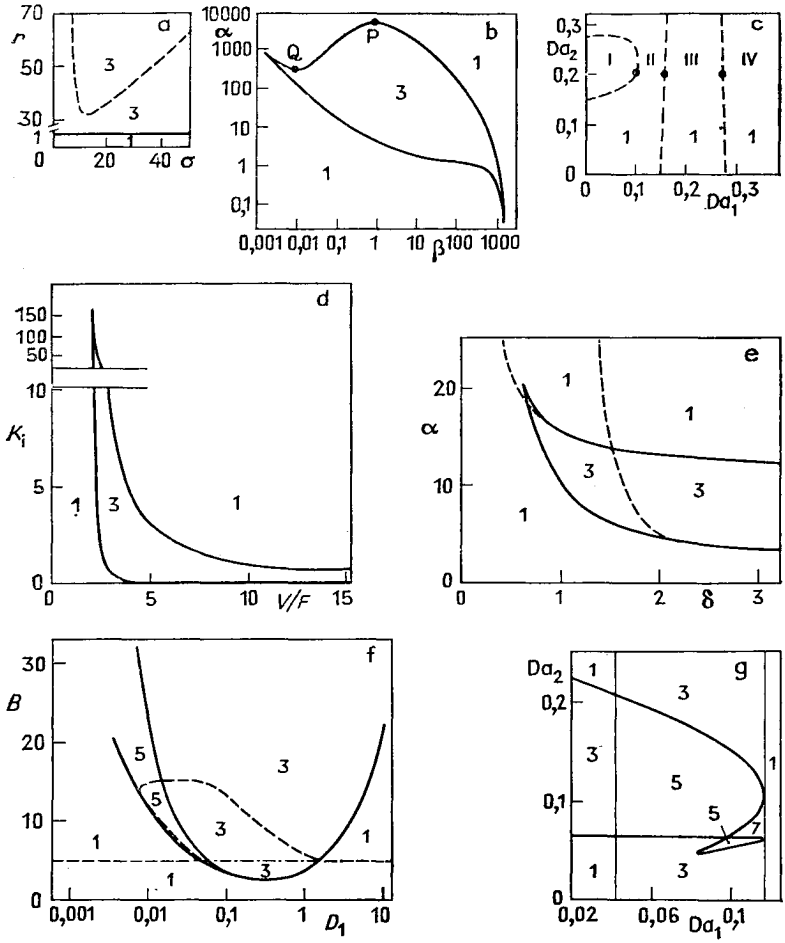


Рис. 5.20. Бифуркационные диаграммы для отдельных *задач*; сплошная линия — кривая предельных точек, штриховая линия — кривая точек комплексной бифуркации (бифуркации Андронова — Хопфа). Числа в отдельных областях указывают число стационарных решений. *a*) *задача* 10, $b = 4$. *b*) *Задача* 3, $\mu = 8{,}4 \cdot 10^{-6}$, $g = 2$, $\varepsilon = 6{,}6667 \cdot 10^{-4}$, $\varepsilon' = 1{,}7778 \cdot 10^{-5}$. Точки P и Q — см. рис. 5.10 и 5.12. *c*) *Задача* 2, $\gamma = 1000$, $B = 12$, $\beta_1 = \beta_2 = 2$, $\Theta_{c_1} = \Theta_{c_2} = 0$, $\Lambda = 1$. *d*) *Задача* 6, $c_{s0} = 5$, $c_{x0} = 0{,}005$, $S_{xs} = 0{,}5$, $K_s = 0{,}03$, $\hat{\mu} = 0{,}5$. *e*) *Задача* 4, $\gamma = 3$, $\beta = 1{,}5$. $\nu_0 = 0$, 01. *f*) *Задача* 8, $N = 2$, уравнения (P8-2)—(P8-5), $A = 2$, $D_2 = 10D_1$, штрихпунктирная линия — кривая точек бифуркации Андронова — Хопфа на ветви неустойчивых стационарных решений. *g*) *Задача* $\gamma = 20$, $\Theta_{c_1} = \Theta_{c_2} = -5$, $\Lambda = 1$, $B = 10$, $\beta_1 = \beta_2 = 0{,}2$.

Более сложная бифуркационная диаграмма имеет место для *задачи* 2 (рис. 5.20g). Здесь также в каждой области параметрической плоскости $Da_1 - Da_2$ указано общее число стационарных решений.

В случае более сложных задач основная проблема заключается в том, чтобы простроить полную бифуркационную диаграмму, т. е. найти ее кривые точек поворота и точек комплексной бифуркации. Если мы сумеем построить такую диаграмму, то тем самым получим полную информацию о поведении стационарных решений системы в зависимости от двух параметров исходной задачи.

5.7. МЕТОДЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ ДИНАМИЧЕСКИХ СИСТЕМ

Решение $\mathbf{x}(t)$ системы обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{f}(t, \mathbf{x}) \tag{5.7.1}$$

с начальным условием $\mathbf{x}(0) = \mathbf{x}^0$ (за редкими исключениями, когда нам удается решить уравнение (5.7.1) аналитически) обычно приходится находить численными методами. За последние 40 лет разработан целый ряд таких методов, позволяющих строить решения задач Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений, и в настоящее время соответствующие программы являются частью математического обеспечения практически любой ЭВМ.

Подчеркнем, что некритическое использование этих программ может в некоторых задачах приводить к неправильным результатам (или вовсе не приводить к результатам). Это может случиться, в частности, при интегрировании систем с сильно неустойчивыми траекториями или систем, содержащих малые параметры.

В этом параграфе будет приведен лишь краткий обзор указанных методов и рассмотрены некоторые практические аспекты их использования. Читателей, которых данная проблематика заинтересует более глубоко, мы отсылаем к обширной библиографии по этому вопросу (см., например, [5.7], [16*], [18*], [19*]).

5.7.1. Одношаговые методы

Общая особенность численных методов решения задачи Коши (или методов численного интегрирования) состоит в том, что решение ищется в виде некоторой дискретно определенной

функции, заданной на сетке, состоящей из узлов $t_0 = 0$, t_1, t_2, ... с шагом $h_j = t_{j+1} - t_j > 0$. Методы интегрирования можно разделить на две группы: одношаговые и многошаговые.

В одношаговых методах для нахождения приближенного решения в точке t_{j+1} используется аппроксимация решения лишь в одной предшествующей узловой точке t_j, т. е.

$$\mathbf{x}^{j+1} = \mathbf{x}^j + h_j \Phi(t_j, \mathbf{x}^j, h_j). \tag{5.7.2}$$

Вид функции Φ зависит от конкретного задания правых частей дифференциальных уравнений (5.7.1) и от выбранного метода. Начиная с $\mathbf{x}^0 = \mathbf{x}(0)$ при вычислениях можно использовать рекуррентную процедуру (5.7.2), продвигаясь шаг за шагом по оси t. Для так называемых неявных методов функция Φ зависит также от вектора $\mathbf{x}^{j+1}$, так что алгоритм перехода от t_j к t_{j+1} должен включать в себя какую-либо итерационную процедуру для решения системы нелинейных уравнений относительно компонент $\mathbf{x}^{j+1}$.

5.7.1.1. Методы с использованием разложения Тейлора

Эти методы используются лишь в случаях, когда правые части уравнений (5.7.1) можно легко продифференцировать аналитически и когда размерность системы не слишком велика. Соотношение (5.7.2) при этом принимает вид

$$\mathbf{x}^{j+1} = \mathbf{x}^j + h_j(\mathbf{x}^j)' + \frac{h_j^2}{2!}(\mathbf{x}^j)'' + \frac{h_j^3}{3!}(\mathbf{x}^j)''' + \ldots + \frac{h_j^p}{p!}(\mathbf{x}^j)^{(p)}, \tag{5.7.3}$$

где использовано обозначение $(\mathbf{x}^j)' = \mathbf{f}(t_j, \mathbf{x}^j)$, а последующие производные получаются путем дифференцирования уравнений (5.7.1) по переменной t и последующей подстановки значений t_j, $\mathbf{x}^j$. Так, для $(\mathbf{x}^j)''$ имеем

$$(\mathbf{x}^j)'' = \frac{\partial \mathbf{f}(t_j, \mathbf{x}^j)}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{f}(t_j, \mathbf{x}^j)}{\partial \mathbf{x}}(\mathbf{x}^j)'.$$

Дальнейшее дифференцирование для конкретного вида уравнений читатель может проделать самостоятельно. Очевидно, что для сложных правых частей, а также в случае системы больших размеров такие вычисления могут оказаться громоздкими и весьма трудоемкими.

Если обозначить через $\tilde{\mathbf{x}}(t)$ точное решение дифференциальных уравнений (5.7.1), удовлетворяющее начальному условию $\mathbf{x}(t_j) = \mathbf{x}^j$, то значение $\tilde{\mathbf{x}}(t_{j+1})$ будет отличаться от $\mathbf{x}^{j+1}$, найденного по формуле (5.7.3), на остаточный член тейлоровского

разложения, т. е. на член вида ($h_j = h$)

$$\frac{h^{p+1}}{(p+1)!}\tilde{\mathbf{x}}^{(p+1)}(\tilde{t}).$$

Эта разность называется погрешностью аппроксимации на одном шаге, или, иначе, локальной погрешностью аппроксимации. Обозначим теперь через $\mathbf{x}(t)$ решение уравнения (5.7.1), удовлетворяющее условию $\mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}^0$. Тогда глобальной погрешностью аппроксимации при фиксированном $t = \bar{t}$ мы называем выражение

$$E = \|\mathbf{x}^j - \mathbf{x}(\bar{t})\|, \tag{5.7.4}$$

где $j = (\bar{t} - t_0)/h$. Если при $h \to 0$ локальная погрешность аппроксимации есть $O(h^{p+1})$, то глобальная погрешность аппроксимации имеет порядок малости на 1 меньше ($E = O(h^p)$). В связи с этим схема (5.7.3) называется схемой p-го порядка. Ниже для всех численных схем мы будем указывать только порядок глобальной погрешности аппроксимации для $h = \text{const}$.

5.7.1.2. Варианты метода Рунге — Кутты

Наиболее распространенными из всех являются различные варианты метода Рунге — Кутты. При этом функция Φ в соотношении (5.7.2) задается с помощью расчетной схемы

$$\mathbf{x}^{j+1} = \mathbf{x}^j + \gamma_1\mathbf{k}_1 + \gamma_2\mathbf{k}_2 + \ldots + \gamma_{m+1}\mathbf{k}_{m+1}, \tag{5.7.5}$$

где векторы $\mathbf{k}_i$ вычисляются рекуррентно по формулам

$$\begin{aligned}
\mathbf{k}_1 &= h\mathbf{f}(t_j, \mathbf{x}^j),\\
\mathbf{k}_2 &= h\mathbf{f}(t_j + \alpha_1 h, \quad \mathbf{x}^j + \beta_{11}\mathbf{k}_1),\\
\mathbf{k}_3 &= h\mathbf{f}(t_j + \alpha_2 h, \quad \mathbf{x}^j + \beta_{21}\mathbf{k}_1 + \beta_{22}\mathbf{k}_2),\\
&\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\\
\mathbf{k}_{m+1} &= h\mathbf{f}(t_j + \alpha_m h, \quad \mathbf{x}^j + \beta_{m1}\mathbf{k}_1 + \ldots + \beta_{mm}\mathbf{k}_m).
\end{aligned} \tag{5.7.6}$$

Для наглядности сопоставим соотношениям (5.7.5), (5.7.6) следующую схему:

$$\begin{array}{c|cccccc}
\alpha_1 & \beta_{11} & & & & & \\
\alpha_2 & \beta_{21} & \beta_{22} & & & & \\
\vdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \\
\alpha_m & \beta_{m1} & \beta_{m2} & \cdots & \beta_{mm} & & \\
\hline
 & \gamma_1 & \gamma_2 & \cdots & \gamma_m & \gamma_{m+1} &
\end{array} \tag{5.7.7}$$

Таблица 5.18. Варианты метода Рунге — Кутты

a) усовершенствованный метод Эйлера, $O(h^2)$

1	1	
	0,5	0,5

b) модифицированный метод Эйлера, $O(h^2)$

0,5	0,5	
	0	1

c) метод Хюна, $O(h^3)$

1/3	1/3		
2/3	0	2/3	
	0,25	0	0,75

d) метод Кутты, $O(h^3)$

0,5	0,5		
1	—1	2	
	1/6	2/3	1/6

e) стандартный вариант метода, $O(h^4)$

0,5	0,5			
0,5	0	0,5		
1	0	0	1	
	1/6	1/3	1/3	1/6

f) метод Мерсона, $O(h^4)$

1/3	1/3				
1/3	1/6	1/6			
0,5	0,125	0	0,375		
1	0,5	0	—1,5	2	
	1/6	0	0	2/3	1/6

g) метод Нюстрёма, $O(h^5)$

1/3	1/3					
0,4	0,16	0,24				
1	0,25	—3	3,75			
2/3	6/81	90/81	—50/81	8/81		
0,8	6/75	36/75	10/75	8/75	0	
	23/192	0	125/192	0	—81/192	125/192

В табл. 5.18 представлены схемы различных вариантов метода Рунге — Кутты, соответствующие разным значениям коэффициентов α, β и γ. Для каждого из них указывается также порядок погрешности аппроксимации (см. п. 5.7.1.1). Наиболее простым вариантом метода Рунге — Кутты является метод Эйлера

$$\mathbf{x}^{j+1} = \mathbf{x}^j + h\mathbf{f}(t_j, \mathbf{x}^j), \tag{5.7.8}$$

имеющий первый порядок точности (одновременно он является методом, основанным на разложении Тейлора). Чтобы получить у метода Рунге — Кутты порядок погрешности $O(h^p)$ для $p = 1, 2, 3, 4$, необходимо выполнить соответственно 1, 2, 3, 4 подстановки в правую часть решаемого дифференциального уравнения. При $p = 5$ требуется уже минимум шесть подстановок; вообще говоря, для $p > 4$ всегда оказывается необходимым использовать больше чем p подстановок. Методы, имеющие порядок погрешности больше 4, используются поэтому достаточно редко — их преимущества проявляются лишь при высоких требованиях к точности вычислений.

5.7.1.3. Апостериорная оценка погрешности аппроксимации

При численном решении нам всегда нужно выяснить, с какой точностью мы нашли решение исследуемой задачи. В большинстве численных методов для оценки погрешностей аппроксимации получены соотношения, основанные на использовании производных высших порядков от решения и правых частей на всем исследуемом промежутке. Однако эти так называемые априорные оценки погрешностей аппроксимации часто получаются чересчур пессимистичными: фактическая погрешность аппроксимации оказывается существенно меньше оценки. Вдобавок они требуют громоздких вычислений. Поэтому в подавляющем большинстве случаев используются апостериорные (т. е. осуществляемые после проведения вычислений) оценки погреш-

ностей. Для решения задачи Коши $\mathbf{x}(t)$ при фиксированном t (см. формулу (5.7.4)) погрешность аппроксимации зависит от:

а) характера исследуемой задачи (вида дифференциальных уравнений, начальных условий и т. д.),

б) применяемого метода и его порядка,

в) используемого шага h — в данном случае мы считаем его постоянным.

Если же мы фиксировали задачу и метод расчета, то в таком случае погрешность аппроксимации решения (при фиксированном t) зависит только от величины шага h. Предположим, что

$$\lim_{h \to +0} \frac{E(h)}{h^p} = C \neq 0.$$

Более точно, предположим, что

$$E(h) = Ch^p + O(h^{p+1}). \tag{5.7.9}$$

Здесь член $O(h^{p+1})$ убывает быстрее, чем предыдущий, и при достаточно малых h мы можем им пренебречь. Подсчитаем две различных аппроксимации решения Q_1 и Q_2 (при одном t) для двух различных шагов h_1 и h_2, полагая, например, $h_1/h_2 = 2$ (Q_s здесь играют роль переменной $\mathbf{x}^j$ в (5.7.4), однако для различных шагов индекс j также будет различным). Обозначим через Q точное решение задачи. Для вычислений с шагом h_1 мы имеем

$$Q_1 \approx Q + Ch_1^p, \tag{5.7.10}$$

а в случае шага h_2

$$Q_2 \approx Q + Ch_2^p. \tag{5.7.11}$$

Если рассматривать уравнения (5.7.10) и (5.7.11) как точные, то они составляют систему двух линейных алгебраических уравнений относительно неизвестных Q и C. Значение Q, найденное из этой системы, обозначим Q_{12}:

$$Q_{12} = \frac{\left(\frac{h_1}{h_2}\right)^p Q_2 - Q_1}{\left(\frac{h_1}{h_2}\right)^p - 1}. \tag{5.7.12}$$

Величина Q_{12} не равна в точности Q, поскольку мы пренебрегли слагаемым $O(h^{p+1})$ в формуле (5.7.9). Соотношение (5.7.12) и связанный с ним подход называются *экстраполяцией Ричардсона* и используются для апостериорной оценки погрешности аппроксимации:

$$E_1 = \| Q_1 - Q_{12} \|, \quad E_2 = \| Q_2 - Q_{12} \|. \tag{5.7.13}$$

Если принять максимально допустимую погрешность аппроксимации равной ε, то мы можем выбрать решение Q_1, если $E_1 < \varepsilon$, или решение Q_2, если $E_2 < \varepsilon$. Если же не выполнено ни одно из этих условий, то нам придется повторить вычисления для меньшего значения шага h_3, выбираемого в соответствии с оценкой

$$h_3 \lesssim h_1 \left(\frac{\varepsilon}{E_1}\right)^{1/p}. \tag{5.7.14}$$

Всю схему вычислений можно повторить еще раз, либо с определенной долей риска остановиться на решении Q_3, найденном с шагом h_3. В общем случае проблема анализа погрешностей аппроксимации оказывается гораздо более сложной, поэтому читателя, который глубже заинтересуется указанной проблемой, мы отсылаем к оригинальной литературе.

5.7.1.4. Автоматическое изменение шага h

Очень часто случается, что решение $\mathbf{x}(t)$ в разных областях изменения независимой переменной t обладает различными свойствами и, следовательно, для того чтобы выдержать предписанную точность, в каждой из этих областей нужно было бы использовать выбранный метод численного интегрирования с длиной шага, зависящей от области. Наиболее простой путь заключается в том, чтобы для всего промежутка интегрирования выбрать некую минимальную величину шага (найдя ее с помощью апостериорной оценки погрешности аппроксимации на всем рассматриваемом промежутке). Однако в большинстве областей интегрирование будет проводиться с излишней точностью и, следовательно, окажется неэкономичным. Одношаговые методы (см. (5.7.2)) позволяют нужным образом изменять величину шага интегрирования в зависимости от свойств решения. Простой алгоритм автоматического изменения шага можно получить на основе апостериорной оценки погрешности аппроксимации, вычисленной на каждом шаге интегрирования, однако такой путь неэффективен. Впервые эффективная схема вычислений с автоматическим изменением шага была разработана Мерсоном (см. табл. 5.18). В случае метода четвертого порядка нам требуется проводить пять вычислений правых частей дифференциальных уравнений, т. е. на одно больше, чем в случае стандартного метода четвертого порядка. Этот «избыток информации» используется для оценки погрешности на данном шаге:

$$E' = \|(2\mathbf{k}_1 - 9\mathbf{k}_3 + 8\mathbf{k}_4 - \mathbf{k}_5)/30\|. \tag{5.7.15}$$

Пусть ε' — максимальная допустимая погрешность на одном шаге. Если $E' < \varepsilon'$, то полученный результат считается

приемлемым, если же $E' > \varepsilon'$, то результат считается неприемлемым (и алгоритм не увеличивает t). В обоих случаях шаг для дальнейшего интегрирования подсчитывается по формуле

$$h^{\text{новый}} = \omega h^{\text{старый}} \left(\frac{\varepsilon'}{E'}\right)^{0,2}, \tag{5.7.16}$$

которая соответствует оценке (5.7.14) при $p = 5$ ($= 1 +$ порядок метода). Значение параметра «безопасности» ω выбирается между 0,8 и 0,9. Тем самым мы предупреждаем ситуации, при которых выбор шага $h = h^{\text{новый}}$ не обеспечивает предписанную заранее точность. Фактическая погрешность на всем промежутке интегрирования тесно связана с величиной ε в тех случаях, когда дифференциальное уравнение не слишком «увеличивает» величину соответствующих погрешностей, т. е. когда погрешность на M шагах приближенно равняется M-кратной погрешности, полученной на одном шаге.

Целую группу методов, аналогичных методу Мерсона, разработал в последнее время Фелберг. При этом правые части системы приходится вычислять большее число раз, чем минимально необходимо для схемы данного порядка.

5.7.1.5. Погрешности аппроксимации и погрешности округления

В рассматривавшихся до сих пор задачах мы пренебрегали погрешностями округления; при этом неявно предполагалось, что по порядку они меньше, чем погрешности аппроксимации. Это предположение несправедливо в случае повышенных требований к точности решения, т. е. при очень малых значениях шага h. Рассмотрим теперь схематически зависимости этих погрешностей от величины шага h. Если мы выбираем в качестве некоторой характерной величины погрешностей округления погрешности, возникающие при вычислениях на одном шаге метода интегрирования, а число шагов (при фиксированном t) равно t/h, то суммарная погрешность округления оказывается пропорциональной h^{-1}.[1] В то же время зависимость погрешности аппроксимации от шага h определяется формулой (5.7.9). На рис. 5.21а графически изображен случай $p = 1$ (метод Эйлера). Из рисунка видно, что существует нижняя граница итоговой погрешности E^*, меньше которой нельзя получить с помощью выбора шага h. Если мы хотим получить решение с более высокой точностью, чем E^*, то нам нужно либо повысить порядок метода

[1] Предположение, что суммарная погрешность округления пропорциональна числу шагов, не очень реалистично. — *Прим. ред.*

(см. рис. 5.21b), либо уменьшить погрешности округления (перейти к вычислениям с двойной точностью).

Замечание. На рис. 5.21 схематически показано поведение погрешностей при $h \to 0$. В практических расчетах обычно ис-

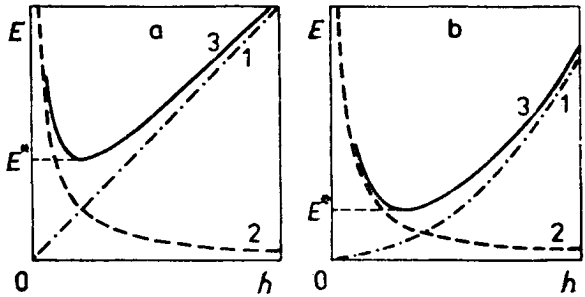


Рис. 5.21. Зависимость погрешности аппроксимации (1), погрешности округления (2) и полной погрешности (3) от шага h. *a*) $p = 1$, *b*) $p = 2$.

пользуются достаточно большие h — такие, чтобы можно было пренебречь погрешностями округления.

5.7.2. Многошаговые методы

Многошаговые методы в отличие от одношаговых используют значения решения и правых частей не в одной, а в нескольких предшествующих узловых точках. Линейный k-шаговый метод в случае постоянного шага h описывается соотношением

$$\alpha_k \mathbf{x}^{j+1} + \alpha_{k-1}\mathbf{x}^j + \ldots + \alpha_0 \mathbf{x}^{j+1-k} = \\ = h\left[\beta_k \mathbf{f}^{j+1} + \beta_{k-1}\mathbf{f}^j + \ldots + \beta_0 \mathbf{f}^{j+1-k}\right], \qquad (5.7.17)$$

где $\alpha_k \neq 0$, $\alpha_0^2 + \beta_0^2 > 0$ и использовано обозначение $\mathbf{f}^s = \mathbf{f}(t_s, \mathbf{x}^s)$. Существует целый ряд различных многошаговых методов. В частном случае $\alpha_k = 1$, $\alpha_{k-1} = -1$, $\alpha_i = 0$ при $i = 0, 1, \ldots, k-2$ соотношение (5.7.17) называется методом Адамса. При $\beta_k = 0$ эти методы называются явными, поскольку (при известных $\mathbf{x}^j, \ldots, \mathbf{x}^{j-k+1}$) мы можем найти $\mathbf{x}^{j+1}$ из формулы (5.7.17) неитерационным способом. Такой вариант метода Адамса называют методом Адамса — Бэшфорта; его коэффициенты приведены в табл. 5.19. В случае $\beta_k \neq 0$ методы, описываемые соотношением (5.7.17), оказываются неявными, поскольку $\mathbf{x}^{j+1}$ входит и в правую часть формулы (5.7.17). Неявный вариант метода Адамса называют методом Адамса — Моултона, а его

Таблица 5.19. Коэффициенты метода Адамса — Бэшфорта в случае погрешности аппроксимации p-го порядка

k	$i=$	0	1	2	3	4	p
1	$\beta_{k-1-i}=$	1					1
2	$2\beta_{k-1-i}=$	3	−1				2
3	$12\beta_{k-1-i}=$	23	−16	5			3
4	$24\beta_{k-1-i}=$	55	−59	37	−9		4
5	$720\beta_{k-1-i}=$	1901	−2774	2616	−1274	251	5

Таблица 5.20. Коэффициенты метода Адамса — Моултона в случае погрешности аппроксимации p-го порядка

k	$i=$	0	1	2	3	4	p
0*	$\beta_{k-i}=$	1					1
1	$2\beta_{k-i}=$	1	1				2
2	$12\beta_{k-i}=$	5	8	−1			3
3	$24\beta_{k-i}=$	9	19	−5	1		4
4	$720\beta_{k-i}=$	251	646	−264	106	−19	5

* Особый случай $x^{j+1}=x^j+hf^{j+1}$ (неявный метод Эйлера).

коэффициенты представлены в табл. 5.20. При этом для нахождения x^{j+1} (по известным $x^j, \ldots, x^{j-k+1}$) мы должны уже использовать какую-нибудь итерационную процедуру, для которой мы располагаем достаточно хорошим начальным приближением x^j, это начальное приближение может определяться с помощью какого-либо явного метода. Так возникает метод типа предиктор — корректор.

Многошаговые методы по сравнению с одношаговыми обладают более высокой эффективностью, заключающейся в необходимости проведения меньшего количества вычислений правых частей за один шаг интегрирования при одном и том же порядке метода. С другой стороны, для их «запуска» приходится использовать какую-либо иную вычислительную схему (например, одношаговый метод), поскольку самих по себе начальных условий недостаточно для начала расчета. Другим недостатком этих методов является трудность реализации алгоритма в случае автоматического изменения шага интегрирова-

ния. Такого рода алгоритм, основанный на методах Адамса — Бэшфорта — Моултона и подробно разработанный Гиром, очень часто используется в приложениях.

5.7.3. Методы интегрирования «жестких» систем

Если вещественные части собственных чисел матрицы Якоби для правых частей дифференциальных уравнений (5.7.1) различаются на несколько порядков, то такие системы обычно называют *жесткими*. Они описывают результат наложения нескольких различных процессов, скорости которых существенно различаются между собой (в частности, быстрых и медленных реакций). Указанное понятие возникло в связи с численным решением дифференциальных уравнений.

Рассмотрим простой пример. Пусть нам нужно решить дифференциальное уравнение

$$x' = -1000x, \quad x(0) = 1 \tag{5.7.18}$$

методом Эйлера. Точное решение этой задачи имеет вид $x(t) = e^{-1000t}$, и, следовательно, при $t > 0{,}01$ оно практически равно нулю. Методом Эйлера (5.7.8) находим

$$x^{j+1} = (1 - 1000h)\, x^j, \quad x^0 = 1, \tag{5.7.19}$$

и, следовательно,

$$x^j = (1 - 1000h)^j.$$

Легко видеть, что при $h > 0{,}002$ получим $|x^j| \to \infty$ при $j \to \infty$, и значит, для аппроксимации практически постоянной (равной нулю) функции нам нужно использовать чрезвычайно малый шаг. В случае «жестких» систем подобными свойствами обладают все явные методы интегрирования, так что их применение весьма неэффективно. При этом оказывается, что с практической точки зрения для интегрирования жестких систем удобны лишь так называемые *A-устойчивые* методы. Относительно A-устойчивости данного метода можно просто судить по его поведению при решении скалярного дифференциального уравнения

$$\frac{dx}{dt} = \lambda x, \tag{5.7.20}$$

где λ — в общем случае комплексное число с отрицательной вещественной частью. Численная схема, с помощью которой строится последовательность значений x^j при постоянном шаге интегрирования h, называется A-устойчивой, если в рекуррентной формуле

$$x^{j+1} = P(h\lambda)\, x^j \tag{5.7.21}$$

множитель P удовлетворяет соотношению

$$|P(h\lambda)| < 1 \tag{5.7.22}$$

при произвольном $h > 0$. Это определение по существу представляет собой требование, чтобы $x^j \to 0$ при произвольном $h > 0$. Указанное требование можно усилить; например, для *L-устойчивой* схемы необходимо потребовать, чтобы $|P(h\lambda)| \to 0$ при $h \to \infty$.

За последние 15 лет был разработан целый ряд численных методов для решения жестких систем дифференциальных уравнений. Эти методы можно ориентировочно разделить на три группы. К первой относится модифицированный алгоритм Гира, основанный на многошаговой схеме типа предиктор — корректор. Этот метод используется очень широко и включается в стандартное программное обеспечение многих ЭВМ. Ко второй группе относятся так называемые полунеявные варианты метода Рунге — Кутты. В случае автономной системы

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{x}) \tag{5.7.23}$$

одна такая группа методов описывается соотношениями (ср. формулы (5.7.5), (5.7.6))

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_1 &= h_j [\mathbf{I} - h_j a_1 \mathbf{J}(\mathbf{x}^j)]^{-1} \mathbf{f}(\mathbf{x}^j), \\ \mathbf{k}_2 &= h_j [\mathbf{I} - h_j a_2 \mathbf{J}(\mathbf{x}^j + c_1 \mathbf{k}_1)]^{-1} \mathbf{f}(\mathbf{x}^j + b_1 \mathbf{k}_1), \\ \mathbf{x}^{j+1} &= \mathbf{x}^j + \gamma_1 \mathbf{k}_1 + \gamma_2 \mathbf{k}_2, \end{aligned} \tag{5.7.24}$$

где через $\mathbf{J} = \frac{d\mathbf{f}}{d\mathbf{x}}$ обозначена матрица Якоби.

Коэффициенты a_1, a_2, b_1, c_1, γ_1 и γ_2 приведены в табл. 5.21.

Таблица 5.21. Коэффициенты полунеявных вариантов метода Рунге — Кутты (5.7.24)

Схема	Розенброка		Калахана
Порядок	2	3	3
a_1	$1-\sqrt{2}/2$	1,40824829	0,788675134
a_2	$1-\sqrt{2}/2$	0,59175171	0,788675134
b_1	$(\sqrt{2}-1)/2$	0,17378667	−1,15470054
c_1	0	0,17378667	0
γ_1	0	−0,41315432	0,75
γ_2	1	1,41315432	0,25

Все эти методы A-устойчивы, в чем можно убедиться непосредственной подстановкой в уравнение (5.7.20). В этих методах не нужно прибегать к итерационным процедурам, но необходимо вычислять матрицу Якоби $\mathbf{J}$. Кроме того, на каждом шаге приходится дважды решать систему линейных алгебраических уравнений относительно неизвестных $\mathbf{k}_1$ и $\mathbf{k}_2$.

К третьей группе принадлежат методы, в которых используются вторые производные решения. Одним из таких методов является схема Линнигера — Уиллоуби (см. [5.31]).

5.7.4. Системы дифференциальных и алгебраических уравнений

Довольно часто встречаются системы, включающие как дифференциальные, так и алгебраические уравнения (термин «алгебраический» используется здесь для обозначения уравнения, не являющегося дифференциальным); возьмем, скажем, систему

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{f}(t, \mathbf{x}, \mathbf{u}), \tag{5.7.25}$$

$$0 = \mathbf{g}(t, \mathbf{x}, \mathbf{u}), \tag{5.7.26}$$

где $\mathbf{x} \in \mathsf{R}^n$, $\mathbf{f} \in \mathsf{R}^n$, $\mathbf{u} \in \mathsf{R}^m$, $\mathbf{g} \in \mathsf{R}^m$. Системы такого типа возникают, к примеру, в моделях, описывающих химическую кинетику.

Для решения системы (5.7.25), (5.7.26) могут быть использованы два подхода. Первый из них состоит в интегрировании уравнений (5.7.25) с помощью какого-либо общеупотребительного метода, причем при каждом вычислении правых частей $\mathbf{f}$ решается система m нелинейных уравнений (5.7.26) относительно неизвестной $\mathbf{u}$. Начальная оценка $\mathbf{u}$ для используемой итерационной процедуры получается из предыдущего этапа вычислений правой части. Для начального условия

$$t = 0: \ \mathbf{x}(0) = \mathbf{x}^0, \quad \mathbf{u}(0) = \mathbf{u}^0, \tag{5.7.27}$$

естественно, должно иметь место соотношение

$$\mathbf{g}(0, \mathbf{x}^0, \mathbf{u}^0) = \mathbf{0}. \tag{5.7.28}$$

Второй подход заключается в преобразовании системы алгебраических уравнений в систему дифференциальных уравнений. С этой целью продифференцируем уравнения (5.7.26) по переменной t, и в результате мы получим систему

$$\frac{\partial \mathbf{g}}{\partial \mathbf{u}} \frac{d\mathbf{u}}{dt} = -\frac{\partial \mathbf{g}}{\partial \mathbf{x}} \mathbf{f} - \frac{\partial \mathbf{g}}{\partial t}. \tag{5.7.29}$$

Для системы $n+m$ дифференциальных уравнений (5.7.25), (5.7.29) мы имеем начальные условия (5.7.27).

При этом мы предполагали, что матрица $\partial \mathbf{g}/\partial \mathbf{u}$ является регулярной вдоль соответствующей траектории. Если же она не регулярна, то возникают трудности в обоих подходах: непрерывное решение $\mathbf{u}(t)$ системы (5.7.26) может не существовать (или быть неединственным). В таких случаях необходимо оценить полученные результаты с физической точки зрения, а также проанализировать обоснованность модели (5.7.25), (5.7.26). Рассмотренный выше случай — самый простой; более сложные случаи обсуждаются, например, в [5.34].

5.7.5. Интегрирование дифференциальных уравнений с запаздыванием

Дифференциальные уравнения с запаздыванием возникают при рассмотрении целого ряда математических моделей процессов переноса, теории автоматического регулирования, а также различного рода биологических объектов. Дифференциальные уравнения с k различными запаздываниями $\tau_1 > 0, \ldots, \tau_k > 0$ можно представить в виде

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{f}(t, \mathbf{x}(t), \mathbf{x}(t-\tau_1), \ldots, \mathbf{x}(t-\tau_k)). \tag{5.7.30}$$

Обозначим теперь $\tau = \max \tau_i$. Тогда для интегрирования уравнения (5.7.30) при $t > 0$ нам потребуются начальные условия на промежутке $t \in [-\tau, 0]$: мы должны знать

$$\mathbf{x}(t) = \boldsymbol{\varphi}(t), \quad t \in [-\tau, 0]. \tag{5.7.31}$$

Итак, в отличие от систем без запаздывания, для которых достаточно знать вектор начальных условий в один момент времени t, в данном случае для того, чтобы однозначно определить решение, мы должны его знать на целом промежутке изменения t. При этом изменение в методе интегрирования состоит лишь в том, что для вычисления правой части нужно использовать значения решения в точках $t-\tau_i$. Эти значения получаются с помощью интерполяции из таблицы значений $(t, \mathbf{x}(t))$, систематически накапливаемых в ходе интегрирования. Такая таблица (память) заполняется сначала на основе знания начальных условий (5.7.31), а затем в процессе интегрирования постепенно обновляется (слишком старые значения изымаются из таблицы). Если мы используем метод интегрирования с автоматическим выбором шага, то указанная таблица оказывается неравномерной. А именно, в областях изменения t, где $\mathbf{x}$ меняется быстрее, таблица оказывается более плотной, это

обеспечивает сохранение точности в процессе интерполяции. Примером системы с временным запаздыванием служит *задача* 6, в которой функция роста задается формулой (P6-4).

5.8. ВЫЧИСЛЕНИЕ ПЕРИОДИЧЕСКИХ РЕШЕНИЙ В АВТОНОМНОМ СЛУЧАЕ

Рассмотрим автономную систему n обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{x}, \alpha) \tag{5.8.1}$$

с одним параметром α (значение которого мы пока будем считать фиксированным). Периодическое решение $\mathbf{x}(t)$ системы (5.8.1), имеющее период T, при любом $t \in \mathsf{R}$ удовлетворяет условию

$$\mathbf{x}(t+T) = \mathbf{x}(t). \tag{5.8.2}$$

Устойчивые периодические решения (т. е. притягивающие, или асимптотически орбитально устойчивые решения. — *Ред.*) (см. § 2.3) можно найти посредством процесса установления, имитируя (численно) динамику системы (5.8.1) с помощью методов, описанных в § 5.7[1]. После установления колебаний нетрудно оценить (найти с помощью интерполяции) и величину периода T. Неустойчивое периодическое решение этим способом найти нельзя, за исключением случаев, когда оно устойчиво при $t \to -\infty$ (т. е. тогда, когда ни один мультипликатор не лежит внутри единичного круга, при $n = 2$ для неустойчивого периодического решения это всегда выполняется). Такие решения можно найти, интегрируя уравнение (5.8.1) в отрицательном направлении по оси времени.

Примером приложения указанного подхода служат периодические решения *задачи* 1, представленные в форме фазовых портретов на рис. 5.19. На рис. 5.22 изображены два вложенных один в другой предельных цикла. Внешний из них является устойчивым и был найден с помощью установления при $t \to \infty$. Внутренний цикл неустойчив и был найден процессом установления в обращенном времени (при $t \to -\infty$).

Переходя к общему случаю, преобразуем независимую переменную t следующим образом:

$$t = Tz. \tag{5.8.3}$$

[1] Разумеется, для этого нужно знать точку, достаточно близкую к искомому решению. — *Прим. ред.*

Тогда соотношения (5.8.1) и (5.8.2) принимают вид

$$\frac{d\mathbf{x}}{dz} = T\mathbf{f}(\mathbf{x}, \alpha), \tag{5.8.4}$$

$$\mathbf{x}(1) = \mathbf{x}(0), \tag{5.8.5}$$

т. е. решение $\mathbf{x}(z)$ имеет период, равный единице (учитывая автономность системы, значение t в формуле (5.8.2) можно выбрать равным нулю).

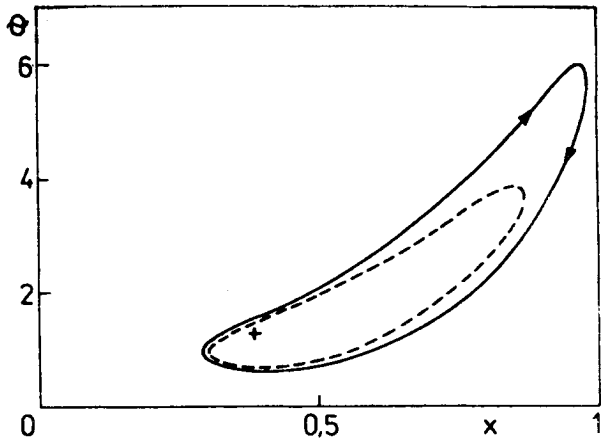


Рис. 5.22. Периодические решения *задачи* 1. Устойчивый (сплошная линия) и неустойчивый (штриховая линия) предельные циклы. $\Lambda = 1$, $B = 14$, $\gamma \to \infty$, $\mathrm{Da} = 0{,}1618$, $\beta = 3$, $\Theta_c = 0$; $+$ устойчивое стационарное решение.

Соотношения (5.8.4), (5.8.5) определяют собой нелинейную краевую задачу со смешанными граничными условиями (более подробно нелинейные краевые задачи рассматриваются в § 6.1). Для решения такого рода задач чаще всего используются разностные методы и метод стрельбы.

5.8.1. Разностные методы

Идея разностных методов заключается в замене производных конечными разностями на достаточно густой сетке узловых точек $z_i = ih$, $i = 0, 1, \ldots, N$, $h = 1/N$. Простейшая такая замена дает вместо (5.8.4)

$$\frac{\mathbf{x}^{i+1} - \mathbf{x}^i}{h} = T\mathbf{f}\left(\frac{1}{2}(\mathbf{x}^{i+1} + \mathbf{x}^i), \alpha\right), \quad i = 0, 1, \ldots, N-1; \tag{5.8.6}$$

здесь $\mathbf{x}^i \sim \mathbf{x}(z_i)$. Из граничных условий (5.8.5) имеем

$$\mathbf{x}^0 = \mathbf{x}^N. \tag{5.8.7}$$

Соотношения (5.8.6), (5.8.7) представляют собой систему $n(N+1)$ нелинейных уравнений относительно $n(N+1)+1$ неизвестных $\mathbf{x}^0$, $\mathbf{x}'$, ..., $\mathbf{x}^N$, T. Одну из неизвестных мы можем фиксировать заранее (это не может быть T, поскольку периодическое решение существует только при дискретных, заранее неизвестных значениях T [1]). Однако для того, чтобы такой подход был успешным, это фиксированное значение должно соответствовать существующему периодическому решению. Ясно,

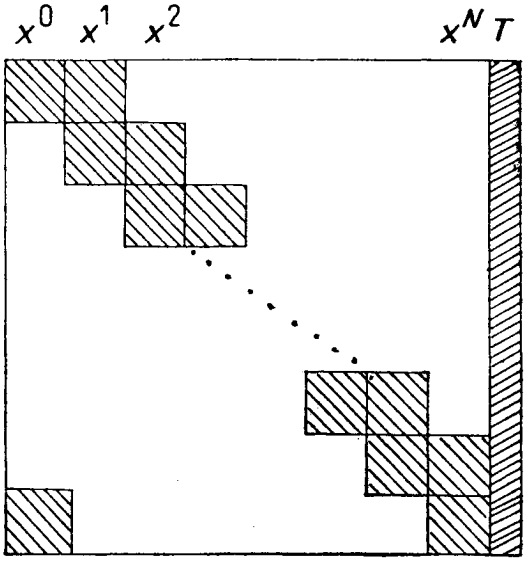


Рис. 5.23. Схема размещения для системы (5.8.6), (5.8.7).

что выбор значения указанной переменной связан с известным риском: при неудаче мы не знаем, является ли она следствием расходимости выбранного итерационного метода или же результатом неудачного выбора этой переменной.

Для решения системы нелинейных уравнений (5.8.6)—(5.8.7) можно воспользоваться, например, итерационным методом Ньютона. Матрица размещения для этих уравнений является почти ленточной (ленточный характер нарушается лишь вхождением неизвестной T и условиями (5.8.7), см. рис. 5.23). Для решения линейных систем в случае ленточной матрицы обычно используется одна из модификаций метода исключения Гаусса.

[1] Предполагается, что система (5.8.1) имеет (при фиксированном α) лишь конечное число замкнутых траекторий. — *Прим. ред.*

Для уменьшения числа решаемых уравнений можно использовать неравномерную сетку узловых точек на интервале [0, 1]. Можно также вместо схемы $O(h^2)$ в формуле (5.8.6) использовать схемы высших порядков.

В табл. 5.22 приведены полученные в результате профили периодического решения (при различных значениях шага сетки h) для случая *задачи* 10 ($x = x_1$, $y = x_2$, $z = x_3$). Сравнивая

Таблица 5.22. Профили периодического решения, найденные разностным методом (5.8.6), (5.8.7) (*задача* 10: $\sigma = 16$, $b = 4$, $r = 200{,}0$). Значение $x(t = 0) = 0$ в ходе итераций фиксировано ($\tau \in [0, 1]$, $t = T\tau$).

	$h=0{,}02$			$h=0{,}01$		
τ	x	y	z	x	y	z
0,0	0,0	−38,3453	184,439	0,0	−39,1718	184,965
0,1	−37,8558	−56,5485	211,622	−37,7594	−55,9209	212,435
0,2	−16,6686	6,7628	194,264	−16,3070	6,4610	193,447
0,3	−9,1232	−18,4699	140,729	−9,0733	−18,1652	140,985
0,4	−49,5720	−80,6857	228,809	−49,0362	−82,5997	224,903
0,5	0,0	38,3453	184,439	0,0	39,1718	184,965
0,6	37,8558	56,5485	211,622	37,7594	55,9209	212,435
0,7	16,6686	−6,7628	194,264	16,3070	−6,4610	193,447
0,8	9,1232	18,4699	140,729	9,0733	18,1652	140,985
0,9	49,5720	80,6857	228,809	49,0362	82,5997	224,903
1,0	0,0	−38,3453	184,439	0,0	−39,1718	184,965
	$T = 0{,}843430$			$T = 0{,}827812$		
	$h=0{,}005$			$h=0{,}0025$		
τ	x	y	z	x	y	z
0,0	0,0	−39,3898	185,095	0,0	−39,4452	185,127
0,1	−37,7394	−55,7559	212,660	−37,7346	−55,7140	212,718
0,2	−16,2146	6,3894	193,240	−16,1913	6,3718	193,188
0,3	−9,0561	−18,0803	141,044	−9,0515	−18,0584	141,058
0,4	−48,8735	−83,0988	223,786	−48,8307	−83,2248	223,496
0,5	0,0	39,3898	185,095	0,0	39,4452	185,127
0,6	37,7394	55,7559	212,660	37,7346	55,7140	212,718
0,7	16,2146	−6,3894	193,240	16,1913	−6,3718	193,188
0,8	9,0561	18,0803	141,044	9,0515	18,0584	141,058
0,9	48,8735	83,0988	223,786	48,8307	83,2248	223,496
1,0	0,0	−39,3898	185,095	0,0	−39,4452	185,127
	$T = 0{,}823904$			$T = 0{,}822926$		

значения периода T, полученные для различных величин шага h, мы видим, что при уменьшении шага h период T стремится к некоторому предельному значению, приближенно равному $T_{\mathrm{Re}} = 0{,}8226$. Этот предел получается экстраполяцией по Ричардсону из значений T при $h = 0{,}005$ и $h = 0{,}0025$. Сравнивая теперь найденные значения периода T с результатами, полученными с помощью метода стрельбы (см. табл. 5.24), мы видим, что точность, обеспечиваемая разностным методом, является не очень высокой.

5.8.2. Метод стрельбы

Другим подходом, используемым для вычисления периодических решений, является переход от краевой задачи к задаче Коши, или метод стрельбы. Выберем для нашей задачи некоторые начальные условия вида

$$x_i(0) = \eta_i, \quad i = 1, 2, \ldots, n \tag{5.8.8}$$

и определенное значение периода T. Тогда систему дифференциальных уравнений (5.8.4) можно проинтегрировать от точки $z = 0$, где мы имеем полные начальные условия (5.8.8), до точки $z = 1$, используя при этом методы, описанные в § 5.7. (В случаях, когда задача Коши «более устойчива» в отрицательном направлении, используется интегрирование от $z = 0$ до $z = -1$. Читатель может легко внести в алгоритм соответствующие изменения.) В результате интегрирования мы получаем значения неизвестных x_i в точке $z = 1$:

$$x_i(1) = \varphi_i(\eta_1, \ldots, \eta_n, T), \quad i = 1, 2, \ldots, n. \tag{5.8.9}$$

Для выполнения условия (5.8.5) необходимо, чтобы удовлетворялась система n нелинейных уравнений

$$F_i(\eta_1, \ldots, \eta_n, T) = \varphi_i(\eta_1, \ldots, \eta_n, T) - \eta_i = 0, \quad i = 1, 2, \ldots, n \tag{5.8.10}$$

относительно $n+1$ неизвестных $\eta_1, \ldots, \eta_n, T$. Так же, как и в случае разностных методов, нужно задать произвольно значение одной из неизвестных. Выберем в качестве такой неизвестной переменную η_k и положим $\eta_k = \bar{\eta}_k$. Этот выбор будет успешным лишь в случае, когда $\bar{\eta}_k$ «лежит» на искомой зависимости $x_k(z)$, т. е. когда при некотором $\bar{z} \in [0, 1]$ выполнено соотношение $\bar{\eta}_k = x_k(\bar{z})$ (см. рис. 5.24). Для решения системы нелинейных уравнений (5.8.10) относительно неизвестных $\eta_1, \ldots, \eta_{k-1}, \eta_{k+1}, \ldots, \eta_n, T$ воспользуемся методом Ньютона. При этом соответствующая матрица Якоби будет включать в себя

элементы $\partial F_i/\partial\eta_j$ $(j \neq k)$ и $\partial F_i/\partial T$. Эти элементы можно вычислить либо с помощью разностных формул, когда мы решаем задачу Коши (т. е. вычисляем F_i) для одной итерации в общей сложности $n+1$ раз (см. § 5.1), либо с помощью соответствующих вариационных переменных и системы дифференциальных уравнений в вариациях. Покажем, как это можно сделать в по-

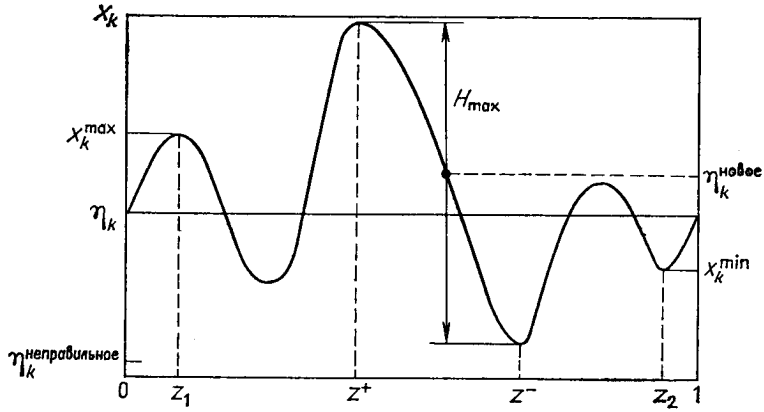


Рис. 5.24. Схематическое изображение адаптивного выбора η_k.

следнем случае. Для этого, рассматривая $\mathbf{x}$ как функцию $\boldsymbol{\eta}$, введем обозначения

$$p_{ij}(z) = \frac{\partial x_i}{\partial \eta_j}, \quad i, j = 1, 2, \ldots, n. \tag{5.8.11}$$

Дифференцируя уравнение (5.8.4) по переменной η_j, находим

$$\frac{dp_{ij}}{dz} = T \sum_{s=1}^{n} \frac{\partial f_i}{\partial x_s} p_{sj}, \quad i, j = 1, 2, \ldots, n. \tag{5.8.12}$$

Далее, дифференцируя (5.8.4) по T, для производных $q_i = \partial x_i/\partial T$ получаем

$$\frac{dq_i}{dz} = f_i + T \sum_{s=1}^{n} \frac{\partial f_i}{\partial x_s} q_s, \quad i = 1, 2, \ldots, n. \tag{5.8.13}$$

Начальные условия для этих уравнений в вариациях имеют вид

$$p_{ij}(0) = \delta_{ij}, \quad q_i(0) = 0, \tag{5.8.14}$$

где δ_{ij} — символ Кронекера (равный 0 при $i \neq j$ и 1 при $i = j$).

Для элементов матрицы Якоби системы (5.8.10) имеют место соотношения [1]

$$\frac{\partial F_i}{\partial \eta_j} = p_{ij}(1) - \delta_{ij}, \quad i, j = 1, 2, \ldots, n, \tag{5.8.15}$$

$$\frac{\partial F_i}{\partial T} = q_i(1) = f_i(\mathbf{x}(1), \alpha), \quad i = 1, 2, \ldots, n. \tag{5.8.16}$$

Из последней формулы следует, что уравнения (5.8.13) интегрировать не нужно, поскольку достаточно знать лишь концевое значение $\mathbf{x}(1)$.

Заметим, что столбец производных $\partial F_i/\partial \eta_k$ матрицы Якоби также оказывается ненужным, поскольку значение η_k уже зафиксировано. Выбор этого значения η_k является довольно непростым делом, если только не использовать какую-либо априорную информацию об искомых периодических решениях (вытекающую, например, из неких физических соображений).

Если никакой предварительной информации у нас нет, то можно воспользоваться «поисковым» подходом, описанным в § 5.1, т. е. случайным выбором начальных приближений (всех $\eta_1, \ldots, \eta_n, T$) для метода Ньютона в сочетании со случайным выбором индекса k. В настоящее время, когда требуемый объем машинного времени перестает быть ограничивающим фактором, указанный подход становится, по-видимому, вполне реалистичным.

Пример сходимости метода Ньютона для *задачи* 10 показан в табл. 5.23. При этом, хотя начальное приближение выбиралось вблизи устойчивого периодического решения (ср. четвертое решение в табл. 5.24), метод привел к неустойчивому периодическому решению («дважды повторенному» — его минимальный период вдвое меньше найденного). Это обстоятельство, по-видимому, вызывается существованием в рассматриваемой области большого числа периодических решений (см. рис. 5.26). Оно подчеркивает преимущества продолжения периодических решений (см. п. 5.8.4) по сравнению с поиском решений для отдельных значений параметра.

Метод стрельбы является эффективным в тех случаях, когда соответствующие задачи Коши легко интегрируются. Если же функция $\mathbf{x}(z)$ сильно зависит от η, то задача Коши становится «плохой» и сам метод уже не работает; в частности, так обстоит дело в случае сильно неустойчивых периодических решений. При этом в качестве альтернативного метода можно

[1] Эти равенства сразу вытекают из исходной записи (5.8.4) (но могут быть, конечно, выведены и из (5.8.13)). — *Прим. ред.*

Таблица 5.23. Метод стрельбы для нахождения периодического решения *задачи* 10: $\sigma = 16$, $b = 4$, $r = 197$, $\eta_k = -5{,}5$, $k = 1$. Найденное неустойчивое решение «составлено» из двух идентичных периодических решений с периодом $T/2$

Итерация	η_1	η_2	η_3	T	$\|F\|$
0	−5,5	−15,000	132,000	1,70000	3,3E1
1	−5,5	−13,321	123,905	1,64516	2,3E1
2	−5,5	−14,179	122,765	1,65020	9,5E0
3	−5,5	−12,828	123,703	1,65684	1,8E0
4	−5,5	−12,946	123,651	1,65760	4,5E−2
5	−5,5	−12,953	123,646	1,65765	1,3E−4
6	−5,5	−12,953	123,646	1,65765	

использовать либо разностный метод, либо метод многократной стрельбы (см. п. 5.8.6).

5.8.3. Устойчивость периодических решений

Исследуем теперь устойчивость уже известного периодического решения, характеризующегося значениями $\bar{\eta}_1, \ldots, \bar{\eta}_n, \bar{T}$ (см. п. 5.8.2).

Орбитальная устойчивость исследуемого периодического решения определяется собственными числами матрицы монодромии (см. (5.8.9) и § 2.3)

$$\mathbf{B} = \left[\frac{\partial \varphi_i}{\partial \eta_j}\right] = [p_{ij}(1)]. \tag{5.8.17}$$

При этом вариационные переменные $p_{ij}(z)$ (5.8.11) находятся для значений η и T, отвечающих изучаемому периодическому решению. Напомним, что для нахождения собственных чисел матрицы **B** можно использовать методику, описанную в § 5.3. В случае автономной системы одно собственное число всегда равняется единице ($\lambda_1 = 1$). Остальные $n-1$ собственных чисел $\lambda_2, \ldots, \lambda_n$ (которые мы в гл. 2 называли мультипликаторами) соответствуют собственным числам линейной части отображения Пуанкаре и определяют устойчивость периодического решения. При этом периодическое решение является устойчивым (точнее, орбитально асимптотически устойчивым), если выполняются неравенства

$$|\lambda_i| < 1, \quad i = 2, \ldots, n. \tag{5.8.18}$$

Периодическое решение является неустойчивым, если хотя бы для одного мультипликатора имеет место условие $|\lambda_i| > 1$. Если

$|\lambda_i| \gtrsim 10^{-4}$—$10^{-5}$, можно говорить о сильно неустойчивом периодическом решении. В п. 5.8.5 мы рассмотрим различные случаи изменения устойчивости периодических решений при изменении параметров задачи.

5.8.4. Продолжение периодических решений по параметру

Займемся теперь исследованием решения задачи (5.8.1), (5.8.2) (или, что то же самое, (5.8.4), (5.8.5)) в зависимости от параметра α. Опишем алгоритм для нахождения указанной зависимости периодических решений, который основывается на алгоритме DERPAR из § 5.2, использовавшемся для продолжения решений нелинейных (алгебраических) уравнений.

При фиксированном η_k (значение индекса k также не изменяется) соотношения (5.8.10) принимают вид

$$F_i(\eta_1, \ldots, \eta_{k-1}, \eta_{k+1}, \ldots, \eta_n, T, \alpha) = 0, \quad i = 1, 2, \ldots, n. \tag{5.8.19}$$

Решение этой системы n уравнений относительно $n+1$ неизвестных $\eta_1, \ldots, \eta_{k-1}, \eta_{k+1}, \ldots, \eta_n, T, \alpha$ можно исследовать с помощью алгоритма DERPAR.

Для процесса продолжения нам потребуется вычислять частные производные функций F_i по η, T и α. Вычисление $\partial F_i/\partial \eta_j$, $\partial F_i/\partial T$ описано в п. 5.8.2. (Непосредственно для самого процесса продолжения производные $\partial F_i/\partial \eta_k$ не нужны; для определения устойчивости по матрице **B** (5.8.17) они необходимы.) Покажем, как вычислить производную $\partial F/\partial \alpha$. Обозначим $r_i = \partial x_i/\partial \alpha$; дифференцируя уравнение (5.8.4) по α, получим уравнения в вариациях

$$r_i' = T \sum_{s=1}^{n} \frac{\partial f_i}{\partial x_s} r_s + T \frac{\partial f_i}{\partial \alpha}, \quad i = 1, 2, \ldots, n \tag{5.8.20}$$

с начальными условиями

$$r_i(0) = 0. \tag{5.8.21}$$

К формулам (5.8.15) и (5.8.16) следует теперь добавить соотношения

$$\frac{\partial F_i}{\partial \alpha} = r_i(1), \quad i = 1, 2, \ldots, n. \tag{5.8.22}$$

Успешно продолжать решение системы (5.8.19) (т. е. двигаться вдоль (связной компоненты) кривой (5.8.19).—*Ред.*) можно до тех пор, пока $\bar{\eta}_k$ будет лежать на профиле $x_k(z)$ (см. рис. 5.24). Если же $\bar{\eta}_k$ «покинет» профиль $x_k(z)$, т. е. при данном выборе $\bar{\eta}_k$ периодическое решение не будет существовать,

то данный алгоритм не сработает. Поэтому в процессе продолжения мы будем адаптивно «приспосабливать» значение $\bar{\eta}_k$ к функции $x_k(z)$.

Рассмотрим этот вопрос более подробно. Предположим, что нам известно некоторое решение системы (5.8.19) и найдено соответствующее периодическое решение системы (5.8.4). Опишем, как выбирается значение $\bar{\eta}_k$ при следующем значении α (см. рис. 5.24).

1. Возьмем монотонный участок периодического профиля[1] на промежутке $[0, z_1] \cup [z_2, 1]$ (где лежит значение $\bar{\eta}_k$). Через $x_k^{\max}$ (или соответственно $x_k^{\min}$) обозначим максимум (или соответственно минимум) на этом участке. Введем следующие обозначения $(0 < \omega_1 < 1)$:

$$x_k^+ = \frac{1}{2}\left[(1-\omega_1)\, x_k^{\min} + (1+\omega_1)\, x_k^{\max}\right], \tag{5.8.23a}$$

$$x_k^- = \frac{1}{2}\left[(1+\omega_1)\, x_k^{\min} + (1-\omega_1)\, x_k^{\max}\right]. \tag{5.8.23b}$$

При этом для $\bar{\eta}_k$ потребуем выполнения неравенства

$$x_k^- < \bar{\eta}_k < x_k^+. \tag{5.8.24}$$

Это условие означает, что $\bar{\eta}_k$ располагается достаточно далеко от локального максимума и локального минимума. Поэтому можно надеяться, что для следующего значения параметра α значение $\bar{\eta}_k$ «не пропадает» с профиля x_k.

2. Обозначим через $H_{\max}$ максимальную разность между максимумом и минимумом на монотонном участке профиля $x_k(z)$, если этот монотонный участок выбирать из всего промежутка $z \in [0, 1]$:

$$H_{\max} = x_k(z^+) - x_k(z^-).$$

Потребуем теперь, чтобы

$$x_k^{\max} - x_k^{\min} > (1-\omega_2)\, H_{\max}. \tag{5.8.25}$$

Это второе условие означает, что $\bar{\eta}_k$ лежит на достаточно широком монотонном участке.

Опыт показывает, что обычно разумно выбирать значения ω_1 и ω_2 в диапазоне $[0.5, 0.8]$.

Если хотя бы одно из условий (5.8.24) и (5.8.25) не выполняется, то значение $\bar{\eta}_k$ выбирается заново по формуле

$$\bar{\eta}_k^{\text{новое}} = \frac{1}{2}\left[x_k(z^+) + x_k(z^-)\right]. \tag{5.8.26}$$

---

[1] Речь идет о монотонности функции $x_k(z)$. — *Прим. ред.*

Остальные составляющие $\eta_1, \ldots, \eta_{k-1}, \eta_{k+1}, \ldots, \eta_n$ должны пересчитываться с использованием профилей $x_1(z), \ldots, x_n(z)$, которые были найдены для последнего значения параметра α. Для этого пересчета выберем координату z^* между z^- и z^+ таким образом, чтобы выполнялось условие

$$x_k(z^*) \approx \bar{\eta}_k^{\text{новое}}. \tag{5.8.27}$$

Тогда значения $\eta_i^{\text{новое}} = x_i(z^*)$, $i = 1, \ldots, n$, будут представлять собой стартовые значения для дальнейшего процесса продолжения. При этом многошаговая схема интегрирования (например, схема Адамса—Бэшфорта), используемая в качестве предиктора в алгоритме DERPAR, вновь начинается со схемы первого порядка (т. е. схемы Эйлера). При такой организации вычислений должны также пересчитываться и некоторые управляющие параметры в алгоритме DERPAR. Прежде всего это относится к параметрам направления N_i, поскольку нам необходимо сохранять направление движения вдоль ветви периодических решений. Все детали указанного подхода читатель может найти в работе [5.17]. На рис. 5.25 схематически изображена схема описанного алгоритма нахождения периодических решений, который далее мы будем называть алгоритмом DERPER.

Отметим, что в процессе продолжения для каждого найденного периодического решения легко вычисляются его мультипликаторы. Действительно, элементы матрицы монодромии $\mathbf{B} = (p_{ij}(1))$ получаются попутно (см. формулы (5.8.12), (5.8.17)), после чего остается лишь найти собственные значения матрицы $\mathbf{B}$.

Трудности с нахождением параметрической зависимости возникают иногда в окрестности точек бифуркации (например, точки бифуркации с потерей симметрии), однако в большинстве случаев описываемый алгоритм отслеживает (гладкое) продолжение исходной ветви решений. Алгоритм беспрепятственно проходит точки рождения инвариантного тора и точки ответвления решений с двукратным периодом и прослеживает продолжение исходной ветви решений; в случае точки поворота (отвечающей бифуркации «+1» (слияние двух периодических решений). — *Ред.*) алгоритм, пройдя эту точку, переходит на другую ветвь. Окончание ветви решений в точке бифуркации Андронова—Хопфа и в точке, где периодическое решение превращается в гомоклиническую траекторию, также контролируется этим алгоритмом (см. рис. 5.25). Проиллюстрируем использование алгоритма DERPER на нескольких примерах.

Модель Лоренца (*задача* 10, см. (5.5.1)) обладает симметрией в следующем смысле. Введем отображение $\mathbf{g}$: $\mathbf{R}^3 \to \mathbf{R}^3$

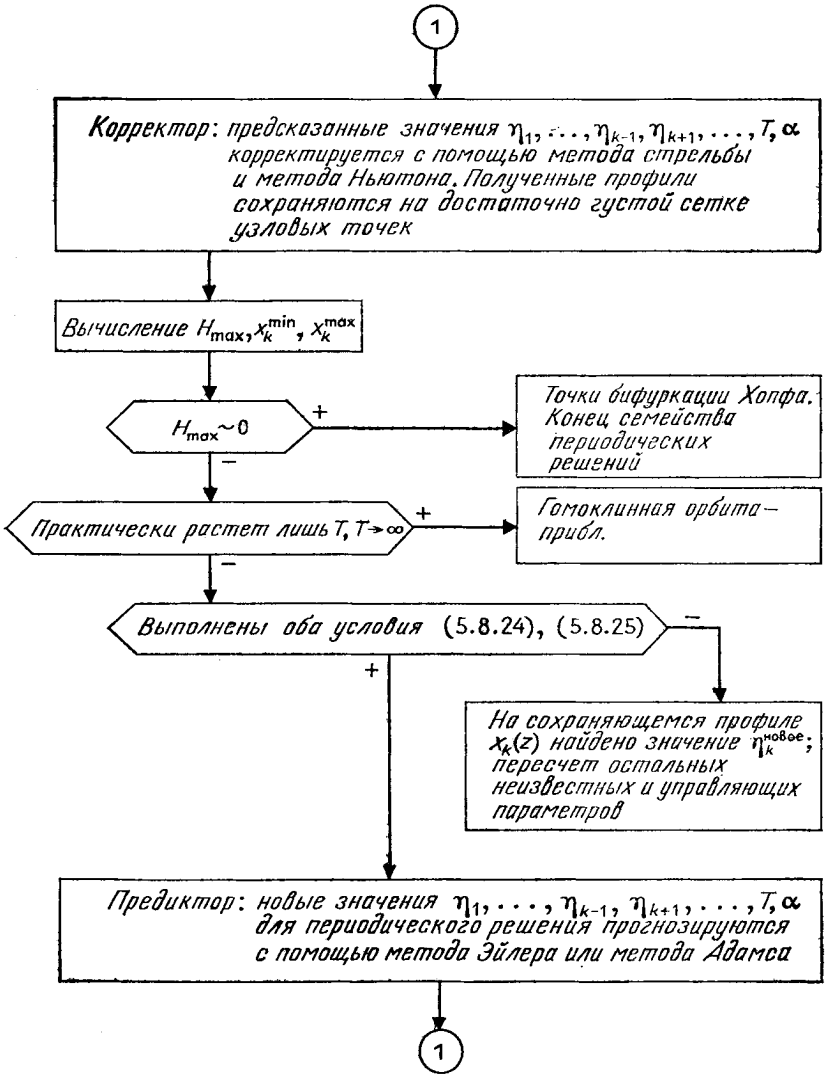


Рис. 5.25. Схема применения алгоритма DERPER.

(симметрию относительно оси z) посредством соотношения $\mathbf{g}(x, y, z) = (-x, -y, z)$. Если $\mathbf{P}(t) = (x(t), y(t), z(t))$ — некото-

рое решение уравнений (5.5.1) с траекторией γ, то $\overline{\mathbf{P}}(t) = (-x(t), -y(t), z(t))$ — также решение (с траекторией $\mathbf{g}(\gamma)$). В частности, если $\mathbf{P}(t)$ — периодическое решение, то $\overline{\mathbf{P}}(t)$, очевидно, тоже. При этом могут иметь место два случая:

1. $\mathbf{g}(\gamma) = \gamma$, т. е. решения $\mathbf{P}$ и $\overline{\mathbf{P}}$ имеют одну и ту же траекторию, которая симметрична относительно оси z; при этом $\mathbf{P}(t) = \overline{\mathbf{P}}(t + T/2)$. Такие решения мы будем обозначать символом **S**; примером служит решение, представленное на рис. 5.26b.

2. $\mathbf{g}(\gamma) \neq \gamma$ и, следовательно, функции $\mathbf{P}$ и $\overline{\mathbf{P}}$ задают два существенно различных периодических решения, траектории которых γ и $g(\gamma)$ взаимно симметричны относительно оси z (такие решения мы будем обозначать символом **A**). Примером может служить решение на рис. 5.26c.

Другие модели также обладают симметрией, в соответствии с которой с данным решением сосуществуют несколько других симметричных решений.

Опишем теперь зависимость периодических решений от параметра r для *задачи* 10, показанную на рис. 5.26a.

Из точки бифуркации Андронова—Хопфа субкритически отделяется ветвь неустойчивых периодических решений. С учетом упомянутой симметрии таких точек бифуркации оказывается две[1] (на рис. 5.26a им отвечает одна точка), и из них ответвляются две ветви периодических решений, траектории которых взаимно симметричны по отношению к оси z. При уменьшении значения параметра r уменьшается расстояние периодических траекторий до состояния равновесия $x = y = z = 0$. Эти периодические траектории сходятся к двум гомоклиническим траекториям, которые входят и выходят из состояния равновесия $x = y = z = 0$ (мы обозначим их как γ_1 и γ_2). Некоторые ветви периодических решений сходятся при изменении r к множеству, представляющему собой объединение этих гомоклинических траекторий, т. е. к множеству $\gamma_1 \cup \gamma_2$. Амплитуда изменения переменной y на этом множестве вдвое больше, чем на одной гомоклинической траектории. На рис. 5.26a это отображено в виде скачка кривой.

На этом же рисунке в диапазоне параметра $r \in (50, 250)$ показано несколько точек поворота (где встречаются две ветви периодических решений). Вблизи каждой точки поворота существует узкий интервал изменения параметра r, в котором периодическое решение оказывается устойчивым. Отметим, что рис. 5.26 не показывает все существующие ветви периодических

[1] Имеются в виду точки на такой диаграмме периодических решений, которая «различает» два взаимно симметричных решения. — *Прим. ред.*

решений [4.40]. Описание того, как периодическое решение теряет устойчивость, мы дадим в следующем пункте.

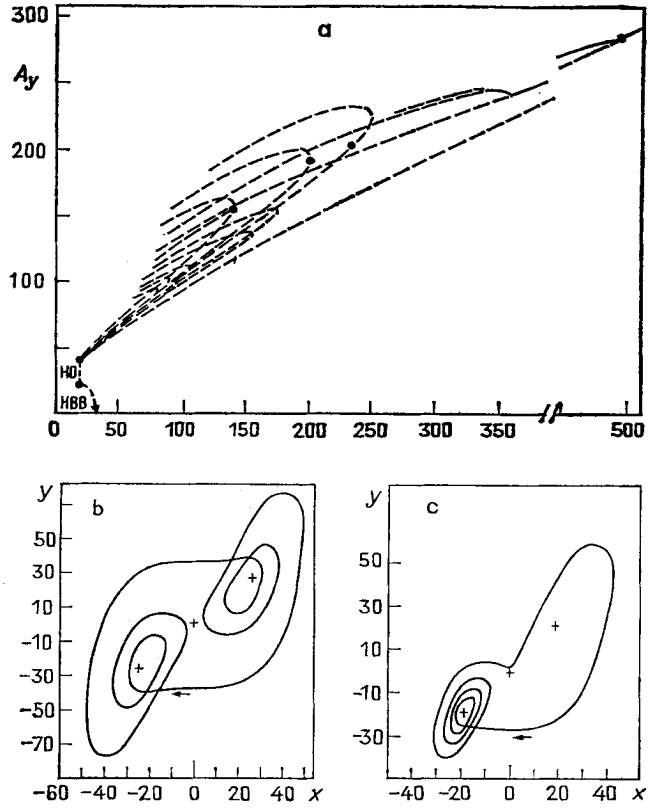


Рис. 5.26. Периодические решения *задачи* 10, $\sigma = 16$, $b = 4$. *a*) Диаграмма периодических решений. A_y — амплитуда 2-й составляющей вектора решения, HBB — точка бифуркации Хопфа, HO — гомоклиническая орбита, сплошная линия — устойчивое решение, штриховые линии — неустойчивые решения, ● — точка бифуркации с потерей симметрии. *b*) Симметричное устойчивое решение для значения $r = 137$; $T = 1{,}48629$, $A_y = 154$. Показана проекция на плоскость $x - y$, $\eta = (-0{,}02624, -36{,}5315, 135{,}279)$, + стационарное решение. *c*) Несимметричное устойчивое решение для значения $r = 87{,}487$; $T = 1{,}54563$; $A_y = 101$. Показана проекция на плоскость $x - y$, $\eta = (7{,}7979, -26{,}7059, 99{,}7729)$; + стационарное решение.

Верхние ветви решений, идущие из точек поворота, оканчиваются на разных гомоклинических траекториях, нижние же ветви на концах стремятся к паре гомоклинических траекторий («восьмерка»). При $r > 500$ существует только одна ветвь пе-

риодических решений, которые являются устойчивыми и симметричными, при $r \sim 470$ эта ветвь теряет устойчивость в точке бифуркации с потерей симметрии. В табл. 5.24 приведены устойчивые периодические решения из всех устойчивых участков ветвей, показанных на рис. 5.26a, а также два неустойчивых периодических решения. Напомним, что устойчивые периодические решения можно искать также, имитируя (численно) динамику уравнений (5.8.1) (процесс установления периодического режима).

Таблица 5.24. Некоторые периодические решения для *задачи* 10[1])

x	y	z	T	r	A_y	Тип решения
—0,0307	—58,8464	430,474	0,25981	500,008	288	S, устойчивое
—0,0675	—56,4816	228,439	0,73934	245,000	217	S, устойчивое
—0,0000	—39,4637	185,137	0,82260	200,000	176	S, неустойчивое
—5,5204	—15,4949	132,272	1,65886	197,000	189	A, устойчивое[2])
—0,0079	—16,0093	144,297	1,11522	171,136	153	A, устойчивое
—0,0046	—5,8309	113,077	0,70966	150,500	137	A, устойчивое
—0,0262	—36,5315	135,279	1,48629	137,000	154	S, устойчивое
—0,0203	—30,8847	108,611	1,12578	106,150	112	A, устойчивое
7,7979	—26,7059	99,7729	1,54563	87,487	101	A, устойчивое
7,3293	—24,2500	89,9287	1,96701	77,262	94	A, устойчивое
—8,8568	—12,7698	18,4440	0,52027	30,0699	16	A, неустойчивое

[1]) (x, y, z) — точка на траектории периодического решения.
[2]) Устойчивое несимметричное решение после бифуркации с потерей симметрии.

Скажем теперь несколько слов о графическом представлении периодических решений и зависимости периодических решений от параметра. Периодические решения (некоторые их составляющие) мы либо представляем графически в зависимости от времени (см. рис. 5.27d), либо изображаем проекцию траектории на фазовую плоскость $x_i - x_j$, $i \neq j$ (см. рис. 5.26b, c, а также рис. 5.27c). В последнем случае мы получаем представление о траектории, но теряем информацию о зависимости решения от времени. Для заданного периодического решения часто используется также проекция траектории отображения Пуанкаре на некоторую плоскость (см. § 5.9). При изображении диаграммы периодических решений (см. рис. 5.26a, 5.27a, b и 5.28) на оси ординат мы откладываем какую-либо величину, которая характеризует периодические решения в зависимости от параметра. Это может быть, например, координата какой-либо из неподвижных точек отображения Пуанкаре. Более наглядно изображение значений амплитуды (какой-либо пере-

менной) или периода отдельных решений. При этом в случае изображения периода для ветвей, которые возникли в точке бифуркации удвоения периода, мы вводим некий модифицирован-

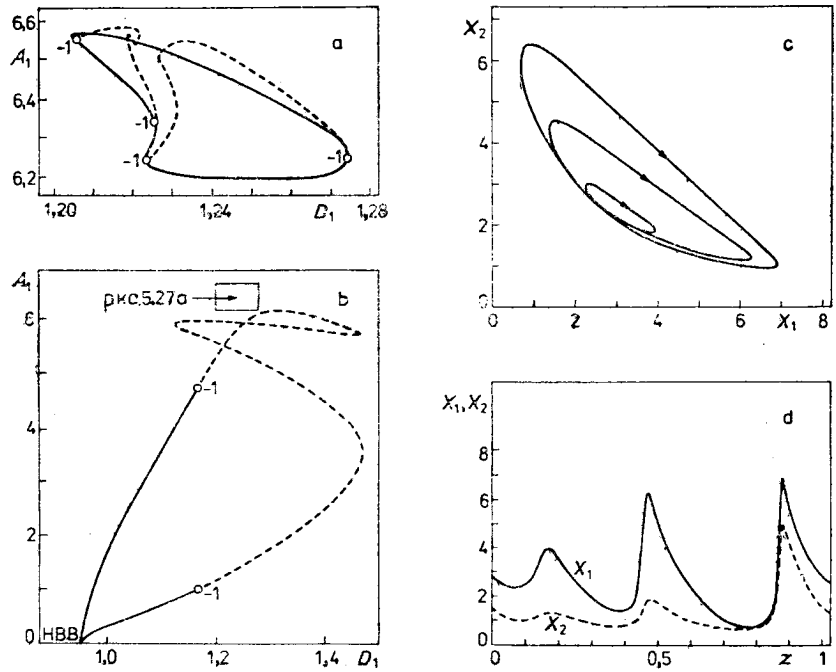


Рис. 5.27. Периодические решения *задачи* 8, $N = 2$, $A = 2$, $B = 5{,}9$, $\rho = D_1/D_2 = 0{,}1$. *a*) Диаграмма периодических решений. A_1 — амплитуда переменной X_1, сплошная линия — изолированное семейство периодических решений с периодом $T \sim 11$—13, штриховая линия — ветви периодических решений с удвоенным периодом $T \sim 22$—26. O—1 точки бифуркации удвоения периода. *b*) Диаграмма периодических решений. A_1 — амплитуда переменной X_1; сплошная линия — устойчивое решение, штриховая линия — неустойчивые решения, HBB — бифуркация Андронова — Хопфа, O—1 — точки бифуркации удвоения периода. *c*) Траектория периодического решения для значения параметра $D_1 = 1{,}26$. $T = 12{,}31918$, $A_1 = 6{,}20$, $\eta = (3{,}7335,\ 2{,}0840,\ 1{,}2159,\ 2{,}5000)$. Показана проекция на плоскость $X_1 - X_2$. *d*) Периодическое решение с рис. *c*).

ный период (для ветви решения с периодом $T_2 \sim 2T_1$, которая отделилась от ветви решений с периодом T_1, модифицированный период определяется как $\hat{T}_2 = T_2/2$), в результате чего диаграмма остается в этих точках непрерывной.

Описанный выше алгоритм с успехом использовался также для изучения периодических решений в случае модели двух

связанных реакторов, в которых имеет место реакция типа «брюсселятор» (*задача* 8). На рис. 5.27a, b приведены две небольшие части диаграммы периодических решений для этой задачи. Изола, изображенная на рисунке 5.27a, содержит четыре точки поворота и очень близко к ним четыре точки бифуркации удвоения периода (последовательность дальнейших бифуркаций удвоения на рисунке не представлена). На части диаграммы,

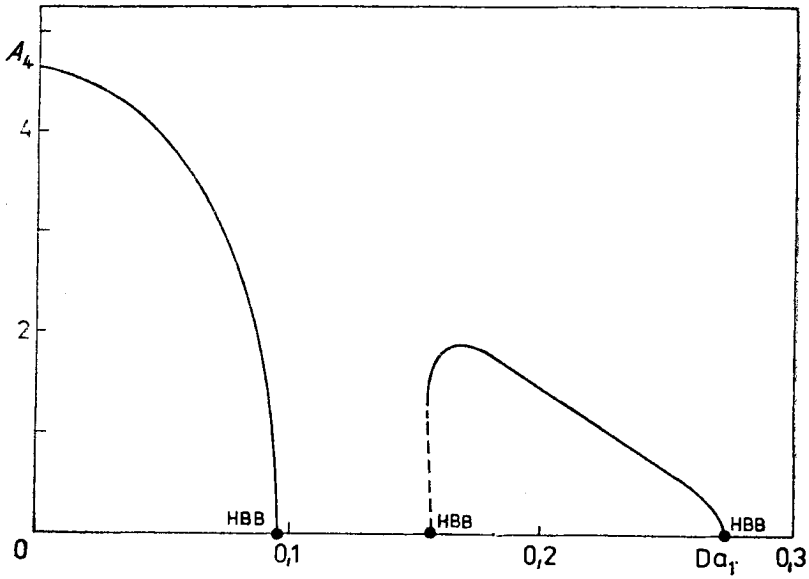


Рис. 5.28. Диаграмма периодических решений *задачи* 2; $\gamma = 1000$, $B = 12$, $\beta_1 = \beta_2 = 2$, $\Theta_c = 0$, $\Lambda = 0{,}8$, $Da_2 = 0{,}2$. Сплошные линии — устойчивые решения, штриховые линии — неустойчивые решения, A_4 — амплитуда переменной Θ_2, HBB — точка бифуркации Андронова — Хопфа.

представленной на рис. 5.27b, изображены две ветви, которые выходят из точки бифуркации Андронова—Хопфа, а затем вновь возникает последовательность бифуркаций удвоения периода (на рисунке показаны только точки первого удвоения). В целом диаграмма периодических решений оказывается гораздо более сложной, чем показано на рис. 5.27a, b (см. работу [5.29]). Точки бифуркации, изображенные на рис. 5.27a, мы рассмотрим в следующем пункте.

Диаграмма периодических решений для *задачи* 2 изображена на рис. 5.28a, b.

Для сильно неустойчивых периодических решений (мультипликаторы порядка 10^5 и больше) метод простой стрельбы не

работает. В таких случаях для процесса продолжения можно использовать разностные методы или метод многократной стрельбы. Метод многократной стрельбы можно применять также для продолжения периодических решений вблизи гомоклинических орбит. Таким способом можно находить периодические решения с бо́льшими значениями периода T, чем при использовании метода простой стрельбы.

При запуске процесса продолжения периодических решений нам необходимо определить начальную точку на ветви, т. е. периодическое решение для одного значения параметра α. Относительно легко такое решение можно найти в окрестности точки бифуркации Андронова—Хопфа $(x_1^+, x_2^+, \ldots, x_n^+, \alpha^+)$, методы определения которой изложены в § 5.5. Здесь используются, по существу, два подхода.

Первый из них основан на асимптотическом анализе характера ветвления в данной точке путем учета высших производных. Описание этого метода можно найти в работе [5.33], где приведен также собственно алгоритм вычислений. В результате мы получаем:

a) оценку периода T;

b) возможность узнать, является ли ответвившееся решение устойчивым;

c) возможность определить направление ответвления, т. е. узнать, отходит ветвь периодических решений при $\alpha < \alpha^+$ или при $\alpha > \alpha^+$.

Другой подход к данной задаче является эвристическим. Именно, делается попытка найти периодическое решение при α, близком к α^+ (см. п. 5.8.2). В качестве начального приближения для величины периода T обычно годится величина $\tilde{T} = 2\pi/\sqrt{\omega^+}$, где $\lambda_{1,2} = \pm i\sqrt{\omega^+}$ — собственные числа матрицы Якоби правых частей в точке бифуркации Андронова—Хопфа. Начальное приближение η можно выбрать, например, в виде

$$\eta_1 = x_1^+, \ldots, \eta_{k-1} = x_{k-1}^+, \quad \eta_k = x_k^+ + \varepsilon,$$
$$\eta_{k+1} = x_{k+1}^+, \ldots, \eta_n = x_n^+,$$

где $\varepsilon \neq 0$ есть некоторое фиксированное малое число, а η_k в процессе ньютоновских итераций остается неизменным. В зависимости от того, будет ли этот выбор успешным для $\alpha = \alpha^+ + \delta$ или для $\alpha = \alpha^+ - \delta$, выясняется обычно, в какую сторону ответвляются периодические решения. Здесь $\delta \neq 0$ есть опять подходящим образом выбранное малое число. В целом указанный подход дает вполне удовлетворительные результаты.

Оба этих подхода оказываются слишком сложными в случае, когда разыскивается периодическое решение на устойчивой ветви. В этом случае достаточно просто интегрировать дифференциальные уравнения вплоть до установления колебаний. [13]

Направления ветвлений в точках бифуркации удвоения периода или в точках бифуркации с потерей симметрии приближенно можно подсчитать с помощью методики, описанной в п. 5.4.2.

5.8.5. Бифуркации периодических решений

При изменении параметра α устойчивость периодических решений на одной ветви решений может изменяться. Значения параметра, при которых меняется устойчивость и от исходной ветви решений отходит новая ветвь (т. е. бифуркационные значения параметра), характеризуются значениями собственных чисел матрицы монодромии **B** (5.8.17), лежащими на единичной окружности в комплексной плоскости. При изменении устойчивости одно или два собственных числа переходят через эту единичную окружность.

Если одно собственное число матрицы монодромии **B** проходит по вещественной оси через точку —1, то от ветви периодических решений отходит ветвь решений с двойным периодом (см. § 2.3). На рис. 5.29c схематически представлены некоторые возможные варианты такого ветвления, при этом если исходная ветвь была устойчивой, она эту устойчивость теряет, а устойчивость новой ветви определяется направлением ветвления. Бифуркация такого типа называется в литературе бифуркацией удвоения периода, или бифуркацией типа «—1». Указанная бифуркация обычно последовательно повторяется в достаточно узком интервале значений параметра α, образуя при этом так называемую последовательность Фейгенбаума (см. табл. 5.31). Описанная структура бифуркаций изображена на рис. 5.29d.

Другие явления возникают в случае, когда одно собственное число проходит по вещественной оси через точку +1; как правило, это соответствует точке поворота на диаграмме решений (рис. 5.29a). Если одна из ветвей отвечает устойчивым периодическим решениям, то другая отвечает неустойчивым. Более сложная картина наблюдается в системах, обладающих симметрией (см. *задачу* 10, которая рассматривается в п. 5.8.4). Схематически эта ситуация представлена на рис. 5.29b. От ветви устойчивых симметричных решений при бифуркации типа «+1»

отходит ветвь устойчивых несимметричных решений. При этом исходная ветвь симметричных решений теряет устойчивость.

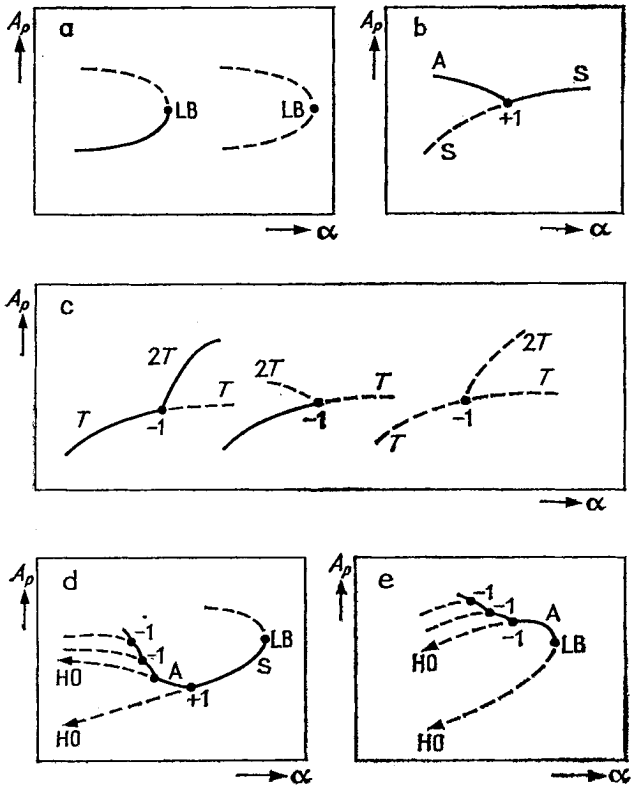


Рис. 5.29. Схематическое изображение бифуркаций периодических решений; сплошные линии — устойчивые решения, штриховые линии — неустойчивые решения, A_p — амплитуда или какая-либо другая величина, характеризующая периодические решения, +1 — точка бифуркации с потерей симметрии, —1 — точка бифуркации удвоения периода, LB — предельная точка (точка поворота), S — симметричное решение, A — асимметричное решение; *a*) точка поворота, *b*) точка бифуркации с потерей симметрии, *c*) точка бифуркации удвоения периода, *d*) последовательность бифуркаций, удваивающих период, которая следует за бифуркацией с потерей симметрии, *e*) последовательность бифуркаций, удваивающих период.

Следующий тип бифуркации возникает при переходе двух комплексно сопряженных собственных чисел через единичную окружность. Здесь от исходной ветви, которая утрачивает устойчивость, отходит ветвь двухчастотных колебаний. Более точно, рождается инвариантный двумерный тор, устойчивый или не-

устойчивый в зависимости от суперкритического или субкритического характера бифуркации (т. е. от того, что больше, α или α^*; см. п. 2.3.1).

В качестве примера описанных бифуркаций обратимся вновь к рис. 5.26а для *задачи* 10, приведенному в п. 5.8.4. В окрестности каждой точки поворота на узком интервале изменения r существует устойчивое периодическое решение. Это решение теряет устойчивость либо через бифуркацию удвоения периода (в случае ветви несимметричных решений, см. рис. 5.29е), либо в точках бифуркации «+1» с потерей симметрии (в случае ветви симметричных решений, см. выделенные точки на рис. 5.26а). За этой бифуркацией возникает последовательность бифуркаций типа «—1» (см. рис. 5.29d). Кроме того, на основной ветви на рис. 5.26а при $r \sim 350$ имеется последовательность бифуркаций удвоения периода. На рисунке для последней указаны только ветви решения с периодом $\sim 2T$ и $\sim 4T$.

В последнее время внимание исследователей уделялось, в основном, разработке новых методов нахождения точек бифуркации на ветвях диаграммы периодических решений. Опишем здесь два итерационных метода для нахождения точек бифуркации удвоения периода. Оба метода основаны на нахождении периодического решения, для которого один из мультипликаторов строго равен —1 [5.26].

Метод 1 (бифуркация «—1»)

Пусть характеристический многочлен матрицы монодромии $\mathbf{B}$ есть $P(\lambda) = (-1)^n \det(\mathbf{B} - \lambda\mathbf{I})$.
Соответствующее характеристическое уравнение записывается в виде

$$P(\lambda) = \lambda^n + a_1\lambda^{n-1} + \ldots + a_{n-1}\lambda + a_n = 0. \qquad (5.8.28)$$

Вычисление коэффициентов может производиться произвольным образом, например, с помощью методов, рассмотренных в § 5.3.

Для того чтобы матрица $\mathbf{B}$ соответствовала точке бифуркации типа «—1», значение $\lambda = -1$ должно быть корнем уравнения (5.8.28), т. е. должно выполняться следующее соотношение:

$$F_{n+1}(\eta_1, \ldots, \eta_n, T, \alpha) = 1 + \sum_{i=1}^{n} (-1)^i a_i = 0. \qquad (5.8.29)$$

Уравнения (5.8.19) и (5.8.29) представляют собой систему $n+1$ нелинейных (алгебраических) уравнений относительно $n+1$ неизвестных $\eta_1, \ldots, \eta_{k-1}, \eta_{k+1}, \ldots, \eta_n, T, \alpha$ (неизвестную η_k мы вновь считаем фиксированной и «лежащей» на искомом

профиле). Для решения этой системы воспользуемся методом Ньютона. Первые n строк матрицы Якоби найдем с помощью соотношений (5.8.15), (5.8.16) и (5.8.22). Элементы последней строки $\partial F_{n+1}/\partial \eta_j$, $\partial F_{n+1}/\partial T$, $\partial F_{n+1}/\partial \alpha$ можно вычислить, используя, например, соответствующие разностные формулы.

Метод 2 (бифуркация типа «—1»)

Матрица монодромии **B** имеет в точке бифуркации удвоения периода собственное число, равное —1. Это означает, что существует не равный нулю вектор $\mathbf{v}=(v_1, \ldots, v_n)$, для которого

$$(\mathbf{B}+\mathbf{I})\,\mathbf{v}=\mathbf{0}. \tag{5.8.30}$$

Вектор **v**, задаваемый системой (5.8.30), определен с точностью до некоторого множителя. Поэтому одну составляющую вектора **v** мы можем считать фиксированной в ходе всего процесса вычислений, положив, например,

$$v_s=1, \tag{5.8.31}$$

где $1 \leqslant s \leqslant n$. Тем самым мы получаем $2n$ уравнений (5.8.19), (5.8.30) относительно $2n$ неизвестных $\eta_1, \ldots, \eta_{k-1}, \eta_{k+1}, \ldots, \eta_n$, T, α, $v_1, \ldots, v_{s-1}, v_{s+1}, \ldots, v_n$. Для решения этой системы вновь, как и в методе 1, воспользуемся схемой Ньютона. При этом по аналогии с методом 1 часть матрицы Якоби вычислим с помощью соотношений (5.8.15), (5.8.16), (5.8.22), а оставшуюся часть с помощью соответствующих разностных формул (существует также возможность их аналитического вычисления).

Проиллюстрируем описанные методы на примере *задачи* 8, в которой рассматривалась модель двух связанных между собой реакторов. На рис. 5.27а была представлена диаграмма периодических решений для этой задачи, на которой появились четыре точки бифуркации типа «—1». Координаты этих точек[1] приведены в табл. 5.25. Для точного определения критического значения параметра $\alpha=\mathrm{Da}_1$ и соответствующего периодического решения в одной из бифуркационных точек были применены оба описанных выше метода. Результаты расчетов представлены в табл. 5.26 и на рис. 5.30. Четыре строчки таблицы отвечают одному и тому же периодическому решению, более точно — четырем периодическим решениям, отличающимся лишь сдвигом во времени. То, что таких решений при $\eta_1=2$ должно быть ровно 4, очевидно из рисунка.

---

[1] Точнее, соответствующие значения η_2, η_3, η_4, T, $\alpha(\eta_1=2)$. — *Прим. ред.*

В табл. 5.27 показан ход итераций по схеме Ньютона в случае метода 1. Метод сходится к первой точке из табл. 5.25, а более точно — к четвертому решению из табл. 5.26. При проведении расчетов оказалось, что области начальных приближений, для которых метод Ньютона сходился к выбранным точкам бифуркации «—1», относительно невелики. Это объясняется

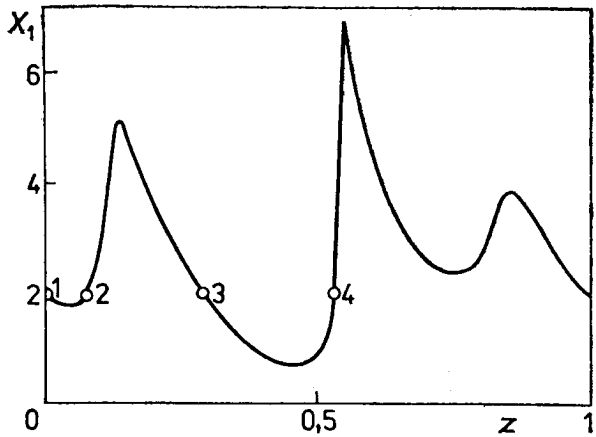


Рис. 5.30. Составляющая $X_1(z)$ периодической траектории *задачи* 8, $N = 2$, в точке бифуркации типа «—1». Параметры взяты из табл. 5.25. Первая точка из этой таблицы выбрана в качестве начальной точки траектории. Нумерация тех точек, где $X_1(z) = 2$, используется в табл. 5.26.

тем, что в окрестности выбранных значений параметров существует много точек бифуркации (более подробные результаты можно найти в работе [5.26]).

Таблица 5.25. Точки бифуркации удвоения периода для *задачи* 8 (рис. 5.27а): $A = 2$, $B = 5{,}9$, $\rho = D_1/D_2 = 0{,}1$, $k = 1$, $\eta_k = 2$.

η_2	η_3	η_4	T	α
3,12258	0,86612	3,26192	11,59421	1,22382
3,02534	0,90140	3,14959	12,62766	1,27471
3,25999	0,86603	3,41344	11,47081	1,22556
3,13884	0,85654	3,28176	11,83646	1,20614

Можно разработать аналогичные методы для нахождения точек бифуркации «+1» и бифуркации рождения тора. Так, в случае бифуркации «+1» (в автономной системе дифференци-

Таблица 5.26. Четыре различных решения, соответствующие первой точке в табл. 5.25 (см. рис. 5.30): $T = 11{,}59421$, $\alpha = 1{,}22382$

Номер точки на рис. 5.30	η_2	η_3	η_4
1	3,12258	0,86612	3,26192
2	3,68848	0,87736	3,88267
3	3,01182	0,87130	3,13921
4	5,72536	1,69797	5,83894

Таблица 5.27. Вычисление точки бифуркации удвоения периода для *задачи* 8. Пример итераций в случае метода 1: $A = 2$, $B = 5{,}9$, $\rho = D_1/D_2 = 0{,}1$, $k = 1$, $\eta_k = 2$. Начальное приближение для метода Ньютона выбиралось случайным образом.

Итерация	η_1	η_2	η_3	η_4	T	α
0	2	3,5229	1,6059	5,5378	11,7588	1,23635
1	2	5,8629	1,6993	5,9794	12,1162	1,24259
2	2	5,9621	1,7065	6,0825	11,9041	1,22265
3	2	5,6563	1,7239	5,7474	11,8191	1,22611
4	2	5,7228	1,7116	5,8312	11,6530	1,22207
7	2	5,7254	1,6980	5,8389	11,5942	1,22382
8	2	5,7254	1,6980	5,8389	11,5942	1,22382

альных уравнений) характеристическое уравнение (5.8.28) имеет двукратный корень $+1$, т. е. должно выполняться соотношение

$$F_{n+1}(\eta_1, \ldots, \eta_{k-1}, \eta_{k+1}, \ldots, \eta_n, T, \alpha) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{dP}{d\lambda}(1) = 0 \qquad (5.8.32)$$

(условие $P(1) = 0$ выполняется автоматически). Уравнения (5.8.19) и (5.8.32) вновь представляют собой систему $n+1$ нелинейных (алгебраических) уравнений относительно $n+1$ неизвестных $\eta_1, \ldots, \eta_{k-1}, \eta_{k+1}, \ldots, \eta_n, T, \alpha$ (переменную η_k мы опять считаем фиксированной). Далее действуем точно так же, как в методе 1 для точек бифуркации типа «—1».

В случае бифуркации типа тора указанный подход несколько усложняется. Эта бифуркация (см. гл. 2) характеризуется наличием пары комплексно сопряженных собственных чисел $\lambda_{2,3}$ матрицы монодромии, которые переходят через единичную окружность и для которых в точке бифуркации выполняются соотношения

$$|\lambda_{2,3}| = 1, \quad \lambda_{2,3}^m \neq 1, \quad m = 1, 2, 3, 4. \qquad (5.8.33)$$

Будем искать периодические решения, у которых два мультипликатора имеют вид

$$\lambda_{2,3} = a \pm ib, \quad a^2 + b^2 = 1, \quad b \neq 0.$$

Оба последующих метода основаны на использовании подходящего разложения характеристического многочлена.

Метод 3 (бифуркация типа тора)

Выделив из $P(\lambda)$ множитель $\lambda^2 - \omega\lambda + 1$, напишем

$$P(\lambda) = (\lambda^2 - \omega\lambda + 1)(\lambda^{n-2} + b_1\lambda^{n-3} + \ldots + b_{n-2}) + C\lambda + D. \tag{5.8.34}$$

Здесь $\omega = 2a$ и $\lambda^2 - \omega\lambda + 1 = (\lambda - \lambda_2)(\lambda - \lambda_3)$. Коэффициенты $b_1, \ldots, b_{n-2}, C, D$ находятся с помощью рекуррентных формул ($b_0 = 1$, $b_{-1} = 0$):

$$b_m = a_m + \omega b_{m-1} - b_{m-2}, \quad m = 1, 2, \ldots, n-2, \tag{5.8.35}$$

$$C = a_{n-1} + \omega b_{n-2} - b_{n-3}, \quad D = a_n - b_{n-2}. \tag{5.8.36}$$

При этом в точке бифуркации типа тора имеют место соотношения

$$F_{n+1}(\eta_1, \ldots, \eta_{k-1}, \eta_{k+1}, \ldots, \eta_n, T, \alpha, \omega) \overset{\text{def}}{=} C = 0, \tag{5.8.37a}$$

$$F_{n+2}(\eta_1, \ldots, \eta_{k-1}, \eta_{k+1}, \ldots, \eta_n, T, \alpha, \omega) \overset{\text{def}}{=} D = 0. \tag{5.8.37b}$$

Уравнения (5.8.19) и (5.8.37) представляют собой систему $n+2$ нелинейных (алгебраических) уравнений относительно $n+2$ неизвестных $\eta_1, \ldots, \eta_{k-1}, \eta_{k+1}, \ldots, \eta_n, T, \alpha, \omega$ (неизвестная η_k снова считается фиксированной).

Метод 4 (бифуркация типа тора)

При разложении характеристического многочлена $P(\lambda)$ можно использовать то обстоятельство, что (в автономном случае) всегда есть корень $\lambda_1 = 1$. Разложение при этом принимает вид

$$P(\lambda) = (\lambda^3 - (2a+1)\lambda^2 + (2a+1)\lambda - 1) \times$$
$$\times (\lambda^{n-3} + b_1\lambda^{n-4} + \ldots + b_{n-3}) + C\lambda^2 + D\lambda + E. \tag{5.8.38}$$

Коэффициенты $b_1, \ldots, b_{n-3}$, C, D, E вновь подсчитываются по рекуррентным формулам ($b_0 = 1$, $b_{-1} = 0$, $b_{-2} = 0$; $\omega = 2a$)

$$\begin{gathered} b_m = a_m + (\omega + 1)(b_{m-1} - b_{m-2}) + b_{m-3}, \quad m = 1, 2, \ldots, n-3, \\ C = a_{n-2} + b_{n-5} + (\omega + 1)(b_{n-3} - b_{n-4}), \\ D = a_{n-1} + b_{n-4} - (\omega + 1) b_{n-3}, \\ E = a_n + b_{n-3}. \end{gathered} \tag{5.8.39}$$

Если коэффициенты C и D в соотношениях (5.8.37) вычислить по формулам (5.8.39), то уравнения (5.8.19) и (5.8.37) будут представлять собой систему $n+2$ нелинейных уравнений относительно $n+2$ неизвестных, как и в методе 3 (в найденной точке бифуркации типа тора условие $E = 0$ выполняется автоматически). Вместо соотношений (5.8.37) мы могли бы взять условия $C = E = 0$ или $D = E = 0$ (поскольку $P(1) = 0$, то $C + D + E = 0$, см. (5.8.38)). Для решения получаемых систем нелинейных уравнений можно вновь воспользоваться методом Ньютона. Можно поступить и так: с помощью метода Гаусса — Ньютона решить систему $n+3$ уравнений (5.8.19), (5.8.37) и $E = 0$ относительно $n+2$ неизвестных.

В табл. 5.28 приведены точки бифуркации типа тора для *задачи* 8, найденные описанными выше методами. Отметим, что метод Ньютона является очень чувствительным к выбору начального приближения. При этом подходящее начальное приближение находится обычно с помощью продолжения соответствующей ветви периодических решений. В табл. 5.29 указана одна точка бифуркации типа тора из табл. 5.28 в четырех различных представлениях. Эти различные представления отвечают наличию на траектории периодического решения нескольких точек, в которых $x_k(z)$ принимает заданное значение. Для точки бифуркации при $B = 5{,}5$ из табл. 5.28 график функции $x_1(z)$ пересекает прямую $\eta_1 = 2$ четыре раза. В табл. 5.29 приведены только значения координат η_2, η_3 и η_4 (значения T и α, конечно, одинаковы для всех представлений).

Таблица 5.28. Точки бифуркации типа тора для *задачи* 8 ($A = 2$, $\rho = D_1/D_2 = 0{,}1$, $k = 1$, $\eta_k = 2$).

B	η_2	η_3	η_4	T	$\alpha = D_1$	ω
5,4	2,54225	2,14962	2,49720	8,19411	0,043790	1,20707
5,3	2,46270	2,18392	2,37593	7,67491	0,043716	0,51468
5,3	2,43727	1,90236	2,49646	7,15820	0,048626	—0,03388
5,4	2,45219	1,92098	2,50011	7,62914	0,051152	—0,72488
5,5	2,47887	1,92659	2,52457	8,32408	0,052495	—1,08277
5,6	2,51478	1,92259	2,56374	9,19639	0,053030	—0,24608

Таблица 5.29. Точка бифуркации типа тора в четырех представлениях; *задача* 8 ($A = 2$, $B = 5{,}5$, $\rho = D_1/D_2 = 0{,}1$, $k = 1$, $\eta_k = 2$); $T = 8{,}32408$, $\alpha = D_1 = 0{,}052495$, $\omega = -1{,}08277$.

η_2	η_3	η_4
2,47887	1,92659	2,52457
2,45001	2,06954	2,41032
3,74710	0,98156	4,77861
3,35776	3,77821	1,49945

На рис. 5.31 представлена бифуркационная диаграмма для точек бифуркации типа тора в плоскости параметров $B - D_1$. Точки, в которых $\lambda^3 = 1$ или $\lambda^4 = 1$, обозначены как $3T$ и $4T$

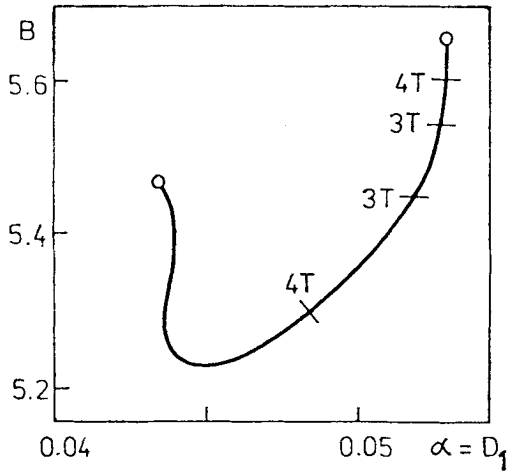


Рис. 5.31. Бифуркационная диаграмма периодических решений. Бифуркация типа тора. *Задача* 8, $A = 2$, $\rho = D_1/D_2 = 0{,}1$.

соответственно. Изображенная на рисунке кривая заканчивается в обозначенных кружком точках, для которых $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_3 = 1$.

В заключение данного пункта отметим, что описанные выше методы можно без затруднений использовать для вычисления точек бифуркации и в случае неавтономных систем обыкновенных дифференциальных уравнений (см. § 5.11). Кроме того, на основе результатов п. 5.4.2 в точке бифуркации типа «—1» можно определить направление ветви решений с двойным периодом.

5.8.6. Метод многократной стрельбы

Метод стрельбы, называемый также иногда методом простой стрельбы (см. п. 5.8.2), в случае сильно неустойчивых периодических решений практически не работает. В таких случаях можно использовать конечно-разностный метод, который, однако, не дает нам информации об устойчивости найденного периодического решения; кроме того, размерность решаемых задач оказывается достаточно высокой. Определенным компромиссом между методом стрельбы и разностным методом является метод многократной стрельбы. Он позволяет не только находить сильно неустойчивые периодические решения, но и достаточно просто получать информацию об их устойчивости.

Приступая к описанию метода, разобьем интервал $[0, 1]$ на $m-1$ подынтервалов с помощью точек z_j:

$$0 = z_1 < z_2 < \ldots < z_{m-1} < z_m = 1,$$
$$\Delta z_j = z_{j+1} - z_j, \quad j = 1, 2, \ldots, m-1.$$

В точках z_j, $j = 1, 2, \ldots, m-1$, выберем начальные условия вида

$$\mathbf{x}(z_j) = \boldsymbol{\eta}_j = (\eta_{j1}, \ldots, \eta_{jn}). \tag{5.8.40}$$

Кроме того, зададимся определенным значением периода T. Интегрируя уравнения (5.8.4) на интервалах $[z_j, z_{j+1}]$ с начальными условиями (5.8.40), можно найти решение в точке z_{j+1}; обозначим его как $\mathbf{x}(z_{j+1}|\boldsymbol{\eta}_j, T, \alpha)$. Для того чтобы решение в точке z_{j+1} было непрерывным, потребуем выполнения условий

$$F_j = x(z_{j+1}|\boldsymbol{\eta}_j, T, \alpha) - \boldsymbol{\eta}_{j+1} = 0, \quad j = 1, 2, \ldots, m-1. \tag{5.8.41}$$

Кроме того, из условий периодичности (5.8.5) следует, что $\boldsymbol{\eta}_1 = \boldsymbol{\eta}_m$. Уравнения (5.8.41) представляют собой систему $n(m-1)$ нелинейных (алгебраических) уравнений относительно $n(m-1)+1$ неизвестных $(\boldsymbol{\eta}_1, \boldsymbol{\eta}_2, \ldots, \boldsymbol{\eta}_{m-1}, T)$. Так же, как в случае простой стрельбы, одну составляющую вектора $\boldsymbol{\eta}_1$, а именно η_{1k}, зафиксируем. Обозначим $\tilde{\boldsymbol{\eta}}_1 = (\eta_{1,1}, \ldots, \eta_{1,k-1}, \eta_{1,k+1}, \ldots, \eta_{1n})$. Тогда уравнения (5.8.41) можно рассматривать как систему $n(m-1)$ нелинейных уравнений относительно $n(m-1)$ неизвестных $(\tilde{\boldsymbol{\eta}}_1, \boldsymbol{\eta}_2, \ldots, \boldsymbol{\eta}_{m-1}, T)$ и одного параметра α.

Для продолжения решения уравнений (5.8.41) в зависимости от параметра α можно вновь воспользоваться алгоритмом DERPER, который был описан в п. 5.8.4. Матрица Якоби

системы (5.8.41) имеет вид

$$\begin{bmatrix} \tilde{G}_1 & -I & 0 & \dots & & \partial F_1/\partial T & \partial F_1/\partial \alpha \\ 0 & G_2 & -I & \dots & & \partial F_2/\partial T & \partial F_2/\partial \alpha \\ \dots & \dots & \dots & \dots & & \dots & \dots \\ & & 0 & G_{m-2} & -I & \dots & \dots \\ -\tilde{I} & 0 & & 0 & G_{m-1} & \partial F_{m-1}/\partial T & \partial F_{m-1}/\partial \alpha \end{bmatrix} \tag{5.8.42}$$

Здесь G_j — матрицы размера $n \times n$,

$$G_j = \left\{ \frac{\partial x_i (z_{j+1} \mid \eta_j, T, \alpha)}{\partial \eta_{jp}} \right\}, \quad i, p = 1, \dots, n, \quad I \text{ — единичная матрица;} \tag{5.8.43}$$

матрица $\tilde{G}_1$ получается из матрицы G_1 вычеркиванием k-го столбца; аналогично из I получается $\tilde{I}$.

Частные производные $\frac{\partial x}{\partial \eta}$ можно найти, используя уравнения в вариациях

$$\frac{\partial U}{\partial z} = T \frac{\partial f(x(z), \alpha)}{\partial x} U, \tag{5.8.44}$$

где U — матрица размера $n \times n$. Если выбрать начальное условие в виде $U(z_j) = I$, то, интегрируя уравнения (5.8.44) на интервале $[z_j, z_{j+1}]$, мы получим $G_j = U(z_{j+1})$. Для частных производных $\partial F_j/\partial T$ имеют место соотношения

$$\partial F_j/\partial T = \Delta z_j \cdot f(x(z_{j+1}) \mid \eta_j, T, \alpha). \tag{5.8.45}$$

Частные производные $\partial F_j/\partial \alpha$ находятся интегрированием уравнений в вариациях, аналогичных уравнениям (5.8.44).

В п. 5.8.3 мы говорили о структуре матрицы монодромии в случае метода простой стрельбы. В методе многократной стрельбы матрица монодромии имеет вид

$$B = G_{m-1} G_{m-2} \dots G_2 G_1, \tag{5.8.46}$$

где матрицы G_j, $j = 1, 2, \dots, m-1$, определяются формулой (5.8.43). Отметим, что столь простую структуру матрицы монодромии невозможно получить при использовании разностных методов.

Метод многократной стрельбы был нами использован для нахождения сильно неустойчивых периодических решений в так называемой модели Ходжкина—Хаксли передачи возмущения по нервному волокну [5.20], а также для продолжения по параметру периодических решений *задачи* 8 [5.29].

Отметим в заключение, что в то время как при использовании разностного метода нам приходилось брать порядка ста точек деления, в случае применения метода многократной стрельбы число точек деления было существенно меньше. Практический опыт показывает [5.20], что уже десяти точек бывает вполне достаточно.

5.9. ХАОТИЧЕСКИЕ АТТРАКТОРЫ

Материал данного параграфа основывается на сведениях, изложенных в п. 2.5.2, где были введены понятия аттрактора и хаотического инвариантного множества.

Хаотическое инвариантное множество, представляющее собой аттрактор, называется *хаотическим* (*странным*) *аттрактором*.

Наличие хаотического аттрактора в фазовом пространстве системы дифференциальных уравнений служит причиной сложного поведения траекторий системы в его окрестности. При этом мы говорим о хаотическом поведении траектории (или решения данной системы). Пример такого поведения изображен на рис. 5.32.

О существовании сложных траекторий в автономных системах обыкновенных дифференциальных уравнений с размерностью, больше или равной трем, было известно еще Пуанкаре. Лоренц в работе [4.40] на простом численном примере (*задача* 10 при значениях параметров $\sigma = 10$, $b = 8/3$, $r = 28$) продемонстрировал наличие хаотического поведения решений.

Один из механизмов возникновения хаотического множества связан с последовательностью бифуркаций удвоения периода (или бифуркаций типа «—1», см. § 5.8, 2.3 и 2.5). Этой последовательности бифуркаций часто соответствует сходящаяся последовательность $\{\alpha_n\}_{n=1}^{\infty}$ бифуркационных значений параметра α. Положим $\lim\limits_{n\to\infty} \alpha_n = \alpha_\infty$. В случае если $\alpha_n \nearrow \alpha_\infty$ (или соответственно $\alpha_n \searrow \alpha_\infty$) при $\alpha > \alpha_\infty$ (соответственно $\alpha < \alpha_\infty$) в фазовом пространстве системы $\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(\mathbf{x}, \alpha)$ существует хаотическое множество (см. рис. 5.34f).

Ниже мы рассмотрим некоторые методы анализа хаотических аттракторов. Для описания хаотического аттрактора мы будем использовать показатели Ляпунова (см. § 2.5) или будем изучать его структуру с помощью отображения Пуанкаре. Хаотический аттрактор характеризуется наличием хотя бы одного положительного одномерного показателя Ляпунова или тем, что инвариантное множество соответствующего отображе-

ния Пуанкаре имеет характер канторова множества[1]. Более подробно вопросы возникновения и анализа хаотического пове-

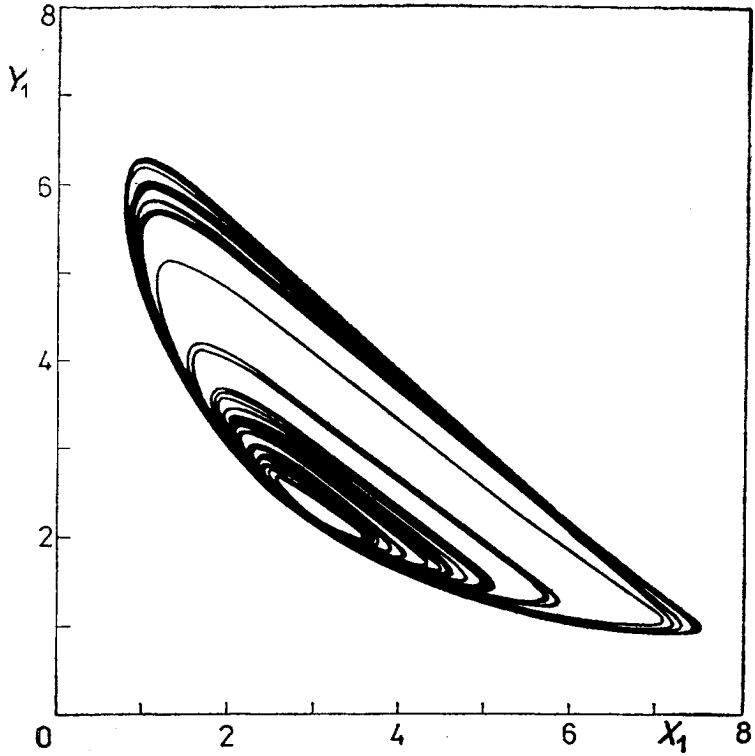


Рис. 5.32. Фазовый портрет *задачи* 8, $N = 2$, $A = 2$, $B = 5{,}9$, $D_1 = 1{,}21$, $D_2 = 12{,}1$. Часть хаотической траектории в проекции на плоскость $X_1 - Y_1$.

дения систем с соответствующими приложениями рассматриваются в работе [5.18].

5.9.1. Вычисление показателей Ляпунова

Рассмотрим систему n дифференциальных уравнений

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{x}, \alpha), \quad (\mathbf{x} \in \mathrm{R}^n), \quad \alpha \in \mathrm{R}^1. \tag{5.9.1}$$

[1] Понимание смысла последнего высказывания для дальнейшего не обязательно. — *Прим. ред.*

В п. 2.5.1 мы ввели определение показателей Ляпунова. Напомним, что для траектории системы (5.9.1), которая в момент $t=0$ проходит через точку $\mathbf{x}_0$ (при фиксированном значении α), одномерный показатель λ^1 определяется как

$$\lambda^1(\mathbf{x}_0;\ \mathbf{v}_1^0) = \lim_{t\to\infty} \frac{1}{t} \ln \frac{\|\mathbf{v}_1^t\|}{\|\mathbf{v}_1^0\|}. \tag{5.9.2}$$

Соответствующий k-мерный показатель задается соотношением

$$\lambda^k(\mathbf{x}_0;\ \mathbf{v}_1^0, \ldots, \mathbf{v}_k^0) = \lim_{t\to\infty} \frac{1}{t} \ln \frac{\|\mathbf{v}_1^t \wedge \mathbf{v}_2^t \ldots \wedge \mathbf{v}_k^t\|}{\|\mathbf{v}_1^0 \wedge \mathbf{v}_2^0 \ldots \wedge \mathbf{v}_k^0\|}. \tag{5.9.3}$$

Здесь $\|\mathbf{w}_1 \wedge \mathbf{w}_2 \ldots \wedge \mathbf{w}_k\|$ есть объем k-мерного параллелепипеда, образуемого векторами $\mathbf{w}_1, \ldots, \mathbf{w}_k$. В формулах (5.9.2) и (5.9.3) $\mathbf{v}_i^t$ есть решение линеаризованного уравнения

$$\frac{d\mathbf{y}}{dt} = \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{x}}(\varphi(t))\,\mathbf{y}, \tag{5.9.4}$$

для которого $\mathbf{v}_i(0) = \mathbf{v}_i^0$ (матрица $\partial\mathbf{f}/\partial\mathbf{x}$ вычисляется в точках выбранной траектории $\mathbf{x} = \varphi(t)$ системы (5.9.1)).

Замечания

1. Предел в формуле (5.9.2) существует для почти всех $\mathbf{x}_0$ и векторов $\mathbf{v}_1^0$.

2. При случайном выборе линейно независимых векторов $\mathbf{v}_1^0, \ldots, \mathbf{v}_k^0$ формула (5.9.3) с вероятностью 1 дает максимальный k-мерный показатель $\lambda_{\max}^k$ (см. теорему в п. 2.5.1) [1].

Вычисление одномерных показателей Ляпунова обычно проводится следующим образом. С помощью формулы (5.9.3) подсчитываем n максимальных показателей $\lambda_{\max}^1, \lambda_{\max}^2, \ldots, \lambda_{\max}^n$ и затем находим одномерные показатели $\lambda_1^1 \geqslant \lambda_2^1 \geqslant \ldots \geqslant \lambda_n^1$ с помощью соотношений

$$\lambda_1^1 = \lambda_{\max}^1, \quad \lambda_k^1 = \lambda_{\max}^k - \lambda_{\max}^{k-1}, \quad k = 2, \ldots, n, \tag{5.9.5}$$

поскольку каждый k-мерный показатель представляет собой сумму k одномерных показателей (см. п. 2.5.1).

Если подсчитывать показатели Ляпунова с помощью выражения (5.9.3), то у нас могут возникнуть трудности вычислительного порядка. Так, например, если точка $\mathbf{x}_0$ лежит на хаотической траектории, то с ростом t векторы $\mathbf{v}_i^t$ увеличиваются, а углы между ними уменьшаются, в результате чего вычисление

[1] Для придания точного смысла этим утверждениям нужно расшифровать термины «почти все» и «с вероятностью 1». — *Прим. ред.*

объема становится все более неточным. Чтобы преодолеть эти затруднения, заметим, что отношение объемов ν_k (дробь, стоящая в формуле (5.9.3)) не изменится, если вместо векторов $\mathbf{v}_i^0$ взятьих (независимые) линейные комбинации $\mathbf{w}_i$, поскольку ν_k зависит только от подпространства, натянутого на $\mathbf{v}_i^0$.

При вычислении показателей Ляпунова мы поступаем так. Задав небольшое τ, вычисляем величину

$$\nu_k(0;\ \tau)=\frac{\|\mathbf{v}_1^\tau \wedge \ldots \wedge \mathbf{v}_k^\tau\|}{\|\mathbf{v}_1^0 \wedge \ldots \wedge \mathbf{v}_k^0\|} \tag{5.9.6}$$

— «коэффициент изменения» k-мерного объема за время $0 \leqslant t \leqslant \tau$. Затем выбираем ортонормированный базис $\tilde{\mathbf{w}}_i$ ($i = 1, \ldots, k$) в подпространстве, натянутом на $\mathbf{v}_i^\tau$, например, ортогонализируя $\mathbf{v}_i^\tau$ по Граму—Шмидту. Затем на промежутке $\tau \leqslant t \leqslant 2\tau$ вычисляем $\nu_k(\tau; 2\tau)$, используя решения $\mathbf{w}_i(t)$ линеаризованного уравнения (5.9.4) с начальными данными $\mathbf{w}_i(\tau) = \tilde{\mathbf{w}}_i$. Теперь коэффициент изменения объема за время 2τ есть, очевидно, произведение: $\nu_k(0; 2\tau) = \nu_k(0; \tau) \cdot \nu_k(\tau; 2\tau)$. Проводя ортогонализацию и нормировку $\mathbf{w}_i$ в конце каждого интервала длины τ, полагаем при $t = L\tau$

$$\lambda_{\max}^k \approx \lambda^k(L) = \frac{1}{L\tau} \ln \nu_k(0;\ L\tau). \tag{5.9.7}$$

В реальных вычислениях целое число L подбирается настолько большим, чтобы $\lambda^k(L+1)$ мало отличалось от $\lambda^k(L)$. Разумеется, для разных k могут понадобиться разные L.

Мы ограничимся здесь двумя примерами. На рис. 5.33 изображена зависимость максимального показателя Ляпунова $\lambda_{\max}^1$ от параметра α для притягивающей траектории (в *задаче* 10). Учитывая большой объем необходимого машинного времени, вычисления проводились на относительно редкой сетке значений параметра r, выбранной на основе данных рис. 5.26. На рис. 5.33 можно видеть несколько интервалов изменения параметра (не-

Таблица 5.30. Одномерные показатели Ляпунова для *задачи* 8: $N = 2$, $A = 2$, $B = 5{,}9$, $D_1/D_2 = 0{,}1$.

D_1	λ_1^1	λ_2^1	λ_3^1	λ_4^1
1,20	0,08	0,00	−2,7	−29
1,21	0,11	0,00	−2,7	−29
1,26	0,19	0,00	−2,8	−30

которые из них весьма малы), в которых существуют устойчивые периодические решения $(\lambda^1_{max} = 0)$ (см. рис. 5.26). При этом на интервалах, где $\lambda^1_{max} > 0$, аттрактор является хаотическим.

В табл. 5.30 приведены численные значения показателей Ляпунова для задачи о двух связанных реакторах (*задача* 8)

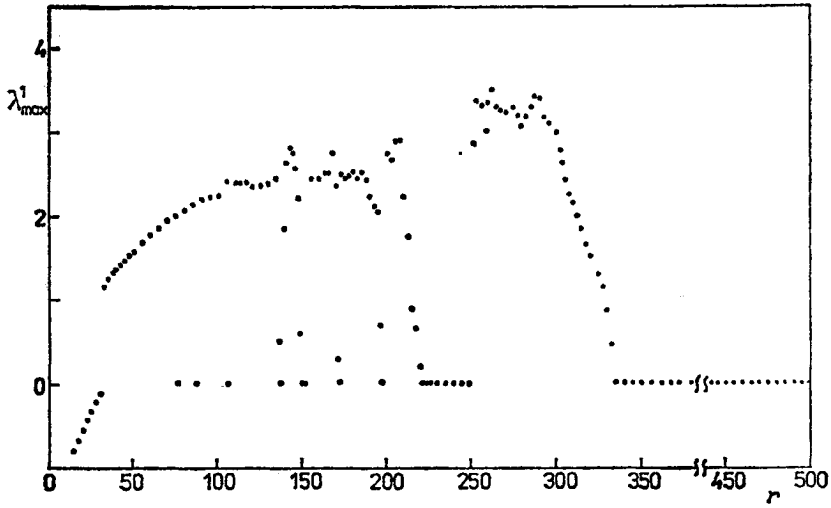


Рис. 5.33. Зависимость максимального одномерного показателя Ляпунова λ^1_{max} от параметра r в *задаче* 10, $\sigma = 16$, $b = 4$.

при трех значениях параметра D_1. Положительная величина λ^1_1 указывает на существование хаотических траекторий; при этом λ^1_2 всегда равно нулю (см. замечание 2 в п. 2.5.1).

5.9.2. Отображение Пуанкаре

В п. 2.3.2 мы ввели определение отображения Пуанкаре, создаваемого потоком в окрестности замкнутой траектории γ системы (5.9.1). Отображение Пуанкаре можно рассматривать как дискретную динамическую систему, определенную на сечении Σ. По характеру поведения орбит этой динамической системы можно судить о поведении траекторий системы (5.9.1). Аналогичный подход мы будем использовать для исследований траекторий на хаотическом аттракторе $\mathscr{A}$. Выберем подходящее сечение Σ — участок гиперповерхности S:

$$S(x_1, \ldots, x_n) = 0. \tag{5.9.8}$$

Лежащая в аттракторе траектория Г, которая проходит через точку $\mathbf{x}_0 \in \Sigma$, через определенное время пересекает сечение Σ в точке $\mathbf{x}_1 = \mathbf{P}(\mathbf{x}_0)$, затем в точке $\mathbf{x}_2 = \mathbf{P}(\mathbf{x}_1) = \mathbf{P}^2(\mathbf{x}_0)$ и т. д. Таким образом, мы получаем орбиту $\mathbf{O}(\mathbf{x}_0) = \{\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \ldots\}$ динамической системы, которая порождается отображением $\mathbf{P}$. По характеру орбиты $\mathbf{O}(\mathbf{x}_0)$ мы можем до некоторой степени судить о геометрической структуре аттрактора $\mathscr{A}$. Так, например, если орбита $\mathbf{O}(\mathbf{x}_0)$ плотно заполняет некоторую дугу $\mathbf{C}$, то дуга $\mathbf{C}$ является пересечением аттрактора $\mathscr{A}$ с поверхностью Σ, и можно думать, что аттрактор $\mathscr{A}$ является двумерным. В частности, если точки орбиты $\mathbf{O}$ плотно заполняют замкнутую кривую (типа окружности), то можно считать, что аттрактор имеет вид двумерного тора, который плотно заполняется одной траекторией системы (5.9.1).

Обычный численный подход к нахождению орбиты отображения Пуанкаре заключается в том, что мы интегрируем систему (5.9.1) и на каждом шаге интегрирования оцениваем знак функции S в формуле (5.9.9). При изменении знака S мы находим точку пересечения Г с поверхностью Σ на основе интерполяции между двумя последними точками, найденными в процессе интегрирования. Очевидно, что грубая интерполяция будет источником численных погрешностей; для интерполяции более высокого порядка нам потребуется сохранять в ходе интегрирования большее число точек.

Нетрудно преобразовать процесс вычислений так, чтобы одна из точек, найденных численным интегрированием, оказалась прямо на Σ (см. [5.21]).

Вместо общего соотношения (5.9.9) рассмотрим сначала случай, чаще всего используемый на практике, а именно $x_i - a = 0$, где a — некоторая постоянная, а i фиксировано ($1 \leqslant i \leqslant n$).

Преобразуем систему (5.9.1) в эквивалентную систему, в которой роль независимой переменной вместо t играет x_i. Разделим каждое уравнение системы (5.9.1) на i-е уравнение, причем будем предполагать, что $f_i(\mathbf{x}, \alpha) \neq 0$ в окрестности сечения Σ. Тогда наша система преобразуется к виду

$$\begin{aligned} \frac{dx_k}{dx_i} &= \frac{f_k(\mathbf{x}, \alpha)}{f_i(\mathbf{x}, \alpha)}; \quad k = 1, \ldots, n \quad (k \neq i) \\ \frac{dt}{dx_i} &= \frac{1}{f_i(\mathbf{x}, \alpha)}. \end{aligned} \tag{5.9.9}$$

Теперь будем интегрировать систему (5.9.1) до момента изменения знака $x_i - a$. Далее, перейдем к интегрированию системы (5.9.9) с шагом $\Delta x_i = a - x_i$, причем начальные условия мы

будем брать в последней или в предпоследней точке, найденной интегрированием уравнения (5.9.1) [1]. Найденная таким образом точка лежит прямо на Σ (с точностью до погрешностей аппроксимации метода интегрирования). Тем самым мы находим следующую точку орбиты отображения Пуанкаре и можем продолжить интегрирование системы (5.9.1). Удобно использовать при этом какой-нибудь одношаговый метод, например, метод Рунге—Кутты с автоматическим изменением длины шага. Отметим, что если нам не нужно знать моменты времени, когда траектория системы проходит через сечение Σ, то последнее уравнение в (5.9.9) можно опустить.

В общем случае гиперповерхности (5.9.8) мы вводим еще одну переменную

$$x_{n+1} = S(x_1, \ldots, x_n) \tag{5.9.10}$$

и добавляем к системе (5.9.1) дифференциальное уравнение вида

$$\frac{dx_{n+1}}{dt} = f_{n+1}(\mathbf{x}, \alpha), \tag{5.9.11}$$

где

$$f_{n+1} = \sum_{j=1}^{n} f_j(\mathbf{x}, \alpha)\frac{\partial S}{\partial x_j}. \tag{5.9.12}$$

Тем самым мы получаем новую систему из $n+1$ дифференциальных уравнений, причем начальное условие для неизвестной x_{n+1} задается в соответствии с формулой (5.9.10).

Соотношение (5.9.8), описывающее гиперповерхность, имеет теперь вид $x_{n+1} = 0$. Далее мы поступаем точно так же, как это делалось ранее для плоскости $x_i - a = 0$, полагая $i = n+1$.

На рис. 5.34a — f приведены несколько периодических и одна хаотическая орбита отображения Пуанкаре для *задачи* 10. Гиперплоскость Σ определялась при этом уравнением $y = 0$. На рис. 5.34a изображена двухточечная орбита. Эта орбита возникла после бифуркации удвоения периода от основной ветви устойчивых периодических решений (см. рис. 5.26 из § 5.8). На рисунках 5.34b, c, d, e приведены орбиты отображения Пуанкаре, отвечающие периодическим решениям задачи 10 с периодами $4T$ (возникающим после двух бифуркаций удвоения периода. — *Ред.*), $8T$, $16T$ для разных значений параметра r. На этих рисунках хорошо прослеживается эволюция, которую претерпевает орбита рис. 5.34a в ходе последовательных бифур-

[1] Тем самым рекомендуется использовать запись (5.9.9) ровно на один шаг. — *Прим. ред.*

каций удвоения периода. В результате этой последовательности бифуркаций орбиты становятся хаотическими, как это видно из

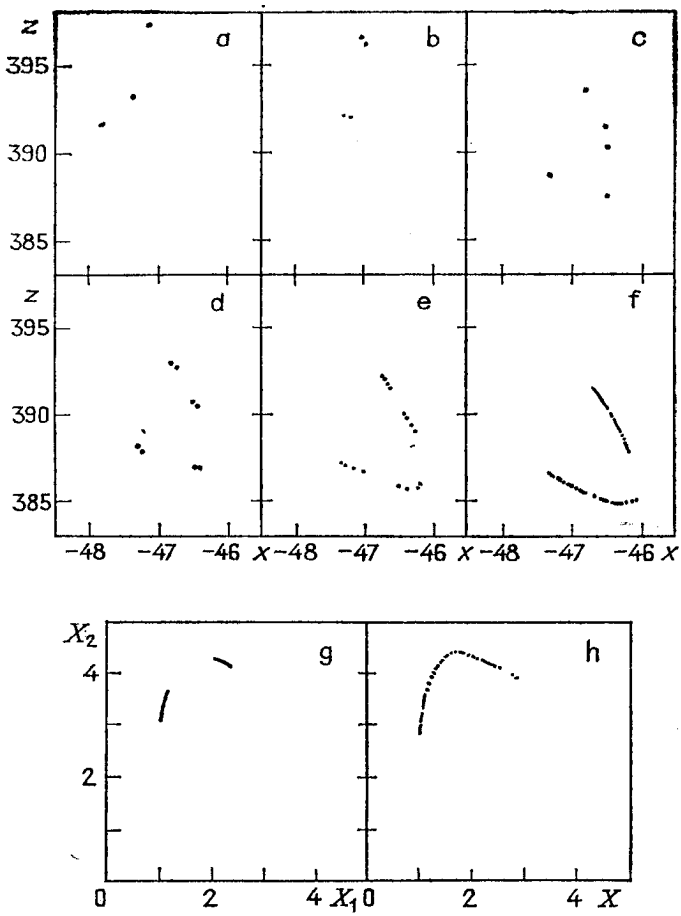


Рис. 5.34. Орбиты отображения Пуанкаре. *Задача* 10 (*a* — *f*), $\sigma = 16$, $b = 4$, $y = 0$. *a*) $r = 339{,}0$, *b*) $r = 338{,}0$, *c*) $r = 334{,}5$, *d*) $r = 334{,}2$, *e*) $r = 333{,}25$, *f*) $r = 332{,}5$. *Задача* 8, $N = 2$ (*g*, *h*), $A = 2$, $B = 5{,}9$, $D_2 = 10D_1$; показана проекция орбиты с гиперплоскости $X_1 - Y_1 + X_2 - Y_2 + 0{,}9 = 0$ на плоскость $X_1 - X_2$. *g*) $D_1 = 1{,}194$, *h*) $D_1 = 1{,}21$.

рис. 5.34f, где изображена «хаотическая» орбита отображения Пуанкаре для значения параметра $r = 332{,}5$. Множество точек пересечения траектории системы (5.9.1) с гиперплоскостью Σ плотно заполняет дугу кривой, которая входит в пересечение

(общую часть) хаотического аттрактора с гиперплоскостью Σ.

Значения параметра r в бифуркационных точках удвоения периода образуют так называемую последовательность Фейгенбаума, стремящуюся к некоторому пределу (см. п. 2.5.3). Эти значения параметра r можно подсчитать с помощью алгоритмов, описанных в п. 5.8.5, и на их основе вычислить величины

$$\delta_j = \frac{r_j - r_{j-1}}{r_{j+1} - r_j}. \tag{5.9.13}$$

Координаты точек бифуркации и значения δ_j приведены в табл. 5.31 [5.26]. Из таблицы видно, что найденные значения δ_j стремятся к пределу $\delta^* \sim 4{,}6692$ [5.27].

Таблица 5.31. Каскад бифуркационных точек с удвоением периода для модели Лоренца, *задача* 10 ($\sigma = 16$, $b = 4$, $k = 1$, $x_k = 3{,}82038$).

j	x_2	x_3	T_j	r_j	δ_j
1	20,90946	273,34849	0,30618	356,93391	
2	16,85987	246,64055	0,63009	338,06197	4,9740
3	21,19530	259,36006	1,26750	334,26789	4,7313
4	17,29002	244,99724	2,53818	333,46599	4,6824
5	17,24233	244,70901	5,07771	333,29472	4,6707
6	17,25889	244,74356	10,15599	333,25806	

На рис. 5.34g, h представлены две хаотические орбиты отображения Пуанкаре для задачи о двух связанных между собой реакторах (*задача* 8). Трехмерная гиперплоскость Σ задается при этом соотношением $X_1 - Y_1 + X_2 - Y_2 + 0{,}9 = 0$. Для более наглядного геометрического представления орбита **O** отображения Пуанкаре, лежащая в плоскости Σ, обычно проектируется на какую-либо из координатных плоскостей. В данном случае орбита **O** спроектирована на плоскость X_1—X_2 (см. рис. 5.34g, h). Из рисунка ясно, что точки орбиты **O** располагаются на некоторой гладкой кривой (точнее, в ее очень малой плоскости). Показатели Ляпунова, которые подсчитывались с помощью подхода, описанного в п. 5.9.1, приведены в табл. 5.30 для значений параметров, указанных на рис. 5.34g, h. При этом положительное значение λ_1^1 указывает на наличие хаотического аттрактора.

5.10. КВАЗИСТАЦИОНАРНОЕ ПОВЕДЕНИЕ ДИНАМИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ [1]

Рассмотрим динамическую модель, зависящую от параметра α,

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{x}, \alpha), \tag{5.10.1}$$

для простоты считая параметр α скалярной величиной. До сих пор мы считали значение α постоянным. Однако в реальных ситуациях параметры системы часто изменяются в зависимости от времени. Рассмотрим очень медленное изменение параметра α со временем t, задаваемое либо соотношением

$$\alpha = \alpha(t), \quad |\alpha'(t)| \ll 1, \tag{5.10.2}$$

либо как решение дифференциального уравнения

$$\frac{d\alpha}{dt} = \psi(t, \alpha). \tag{5.10.3}$$

В обоих случаях мы предполагаем, что параметр α меняется со временем гораздо медленнее переменных состояния $\mathbf{x}$. Возникающее в результате поведение системы мы называем квазистационарным [2]. Обычно мы считаем, что правые части уравнения (5.10.3) не зависят от $\mathbf{x}$, хотя включение $\mathbf{x}$ в описание изменений α не вызвало бы никаких затруднений.

Поясним это понятие для случая, когда в момент времени $t = 0$ мы находимся очень близко к устойчивому стационарному решению $\bar{\mathbf{x}}(\alpha(0))$ системы $\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(\mathbf{x}, \alpha(0))$ $(\mathbf{x}(0) \approx \bar{\mathbf{x}}(\alpha(0)))$. Тогда решение $\mathbf{x}(t)$ системы

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{x}, \alpha(t)), \quad \mathbf{x}(0) = \bar{\mathbf{x}}(\alpha(0)) \tag{5.10.4}$$

мало отличается от функции $\bar{\mathbf{x}}(\alpha(t))$, где $\bar{\mathbf{x}}(\alpha)$ — устойчивое стационарное решение уравнения (5.10.1) при фиксированном α [3].

Рассмотрим теперь частный случай общей эволюционной задачи, часто встречающейся в физических и биологических

---

[1] Это название возникло в технической литературе при исследовании установившегося поведения модели (т. е. чаще всего устойчивого стационарного решения) в случае очень медленного изменения параметра.

[2] «Стационарное» (в составе термина «квазистационарное») понимается как установившееся, не обязательно не зависящее от времени. «Квазистационарное поведение» в некотором смысле близко к установившемуся. Авторы не пытаются дать здесь точное определение используемых понятий. — *Прим. ред.*

[3] Точнее, мало отличается до тех пор, пока $\mathbf{x}(\alpha)$ — асимптотически устойчиво. — *Прим. ред.*

приложениях. Решение в данном случае изменяется со временем в малой окрестности устойчивых ветвей на диаграмме решений, в малой окрестности аттракторов. Процесс эволюции системы можно представить в форме так называемой эволюционной диаграммы, на которой из диаграммы решений выделяются устойчивые части и на которой стрелками изображается эволюция установившегося решения во времени. Наряду с этими медленными изменениями отмечаются также быстрые переходы от решения, которое потеряло устойчивость, к следующему аттрактору. Для описания изменений параметра во времени чаще всего используются два вида зависимостей $\alpha(t)$, а именно, линейный рост

$$\alpha = \alpha_0 + \alpha_1 t \tag{5.10.5}$$

и экспоненциальный рост

$$\alpha = \alpha_0 \cdot e^{ct}. \tag{5.10.6}$$

Расчет эволюционной диаграммы осуществляется сравнительно просто, однако требует довольно много времени. Для интегрирования уравнений (5.10.1) с параметром α, изменяющимся согласно формулам (5.10.5) или (5.10.6), можно использовать некоторые из методов, описанных в § 5.7. При этом необходимо применять методы с автоматическим изменением шага интегрирования, поскольку при динамическом моделировании ситуации, когда решение меняется весьма медленно, чередуются с ситуациями, когда имеют место быстрые переходы к другому режиму. Поскольку изменение параметра α происходит очень медленно, то приходится проводить интегрирование на большом временно́м промежутке, с тем чтобы значение параметра α изменилось достаточно заметным образом. Довольно часто приходится повторять процесс интегрирования с разными начальными условиями, особенно если характер квазистационарного поведения меняется в зависимости от выбора начального условия, что, как правило, имеет место для моделей с несколькими совместно существующими аттракторами.

Следующей проблемой является выбор скорости роста, т. е. фактически констант α_1 или c. Если выбрать их большими, то уже нельзя будет говорить о квазистационарном поведении системы, а изменение α будет происходить в тех же временны́х масштабах, что и изменение $\mathbf{x}$. Если же выбрать α_1 и c слишком малыми, то непомерно возрастет время вычислений. Обыкновенно при выборе констант приходится останавливаться на некоторых компромиссных значениях, которые не оказывают влияния на поведение ветвей стационарных и периодиче-

ских решений [1], но которые могут влиять на скачки решений при переходе через точки бифуркации. При этом в зависимости от скорости изменения α мы можем получать различные продолжения решений на эволюционной диаграмме.

5.10.1. Типичные эволюционные диаграммы

Наиболее часто встречающимся типом квазистационарного поведения является перемещение решения вдоль выбранной устойчивой ветви решений (стационарных, периодических, квазипериодических, хаотических) [2] на диаграмме решений. В указанных случаях поведение системы предсказуемо — в нем не наблюдаются качественные изменения, скачки, быстрые переходы и т. п. Такого рода переходы (скачки) могут появляться только в точках бифуркации. Возможные способы перехода через эти точки изображены на рис. 5.35. Более сложные бифуркации периодических решений (например, удвоение периода, возникновение хаотических режимов) на рисунке не показаны. Обсудим теперь отдельные типичные случаи, изображенные на рис. 5.35.

Случай а) соответствует точке ветвления на диаграмме стационарных решений. Решение $\mathbf{x}(t)$ системы $\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(\mathbf{x}, \alpha(t))$ мало отличается от функции $\bar{\mathbf{x}}(\alpha(t))$, где $\bar{\mathbf{x}}(\alpha)$ — стационарное решение системы $\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(\mathbf{x}, \alpha)$ (при постоянном α). После критического значения параметра α^{**} решение продолжается вдоль устойчивой ветви стационарных решений $\bar{\mathbf{x}}(\alpha)$. Зависимость $\bar{\mathbf{x}}(\alpha)$ в точке α^{**} претерпевает излом. Однако при построении эволюционной диаграммы с помощью динамического моделирования (численного решения системы $\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(\mathbf{x}, \alpha(t))$) можно не заметить, что произошел переход (перескок) на другую ветвь стационарных решений. В случае b) (бифуркация типа вилки) решение продолжается по одной из последующих устойчивых ветвей, выбранных случайным образом в зависимости от погрешностей аппроксимации и округления. В реальных физических или биологических проблемах удобно рассматривать соответствующую задачу как стохастическую; характер распределения флуктуаций переменных состояния определяет тогда вероятности выбора отдельных ветвей решения.

---

[1] Смысл этой фразы непонятен. Стационарными и периодическими решениями обладает система (5.10.1) при фиксированных α; от c и α_1 они (эти решения) никак не зависят. — *Прим. ред.*

[2] Здесь и ниже имеются в виду стационарные, периодические и т. д. решения (5.10.1) при *постоянном* α. — *Прим. ред.*

Случай c) представляет особый интерес, поскольку мы не можем предсказать поведение системы без дополнительных сведений. После перехода α через критическое значение α^* состояние системы сравнительно быстро изменяется, притягиваясь к «наиболее близкому» устойчивому состоянию. Этот притягивающий режим может описываться устойчивым стационарным, периодическим или хаотическим решением системы $\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(\mathbf{x}, \alpha)$.

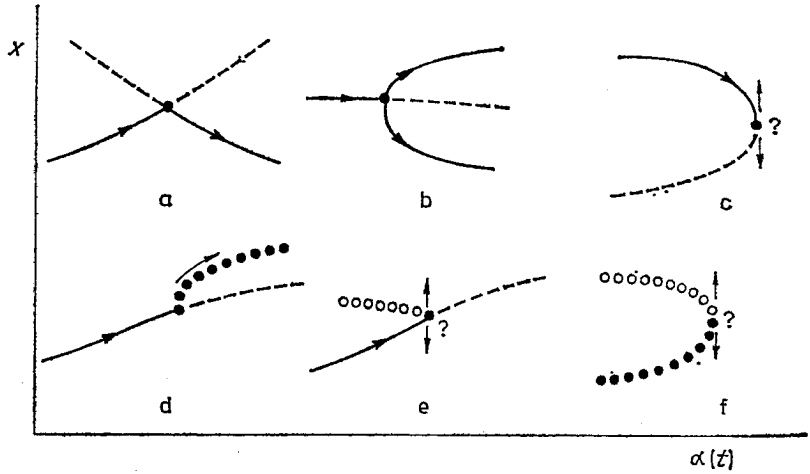


Рис. 5.35. Схематическое изображение перехода через критические точки при квазистационарном поведении.

Иначе говоря, по окончании переходного периода решение $\mathbf{x}(t)$ может быть близко к некой ветви стационарных решений системы $\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(\mathbf{x}, \alpha)$, но может также совершать колебания, близкие к периодическим (или имеющие стохастический характер).

Случай d) соответствует бифуркации Андронова—Хопфа на устойчивой ветви стационарных решений. Случай e) аналогичен случаю c). При переходе α через критическое значение α^* для ветви периодических решений (случай f)) поведение системы также аналогично случаю c): она «эволюционирует» по направлению к «ближайшему» аттрактору системы $\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(\mathbf{x}, \alpha)$.

Рассмотренные случаи представляют собой наиболее типичные участки эволюционной диаграммы. Ситуация может оказаться более сложной при появлении квазипериодических и хаотических решений.

При переходе с одной ветви решения на другую мы можем спрогнозировать следующую ветвь в представленных на рис. 5.35 случаях a) и d). Такие случаи мы будем называть детерминист-

скими. Остальные случаи, в которых последующая ветвь выбирается с локальной точки зрения случайно (случаи b), c), e), f) на рис. 5.35), мы будем называть стохастическими переходами. Отметим, что стохастический переход может давать в той или иной степени детерминированное продолжение. Это, например, имеет место в случае c) на рис. 5.35, если при $\alpha > \alpha^*$ существует единственный аттрактор системы $\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(\mathbf{x}, \alpha)$.

Переходы в стохастическом случае могут быть очень быстрыми, однако могут происходить и в течение достаточно долгого времени. При этом переменные состояния не обязаны меняться монотонно.

Если одновременно существует несколько устойчивых решений задачи, то в инженерной практике мы часто сталкиваемся с проблемой реализации выбранного стационарного решения путем соответствующего медленного изменения параметра (для которого такое изменение удается осуществить). Принимая во внимание то, что начальные условия для переменных состояния часто с трудом поддаются регулированию, этот вопрос оказывается чрезвычайно важным. Типичным примером здесь служит проблема перевода химического реактора в режим с высокой степенью конверсии с помощью изменения того или иного параметра, например, времени задержки.

5.10.2. Примеры эволюционных диаграмм

Рассмотрим теперь на примерах некоторые наиболее характерные типы эволюции системы при медленном изменении параметра, т. е. соответствующие эволюционные диаграммы. На рис. 5.36 представлены шесть случаев, когда при переходе через точку поворота или точку бифуркации Андронова—Хопфа происходит резкое изменение (скачок) решения. На рисунках изображены перескоки при увеличении или уменьшении значений параметра со временем. На рис. 5.36a и 5.36b приведены наиболее типичные случаи так называемого явления гистерезиса. Случай двух петель гистерезиса представлен на рис. 5.36c. Общим для всех трех случаев является то, что с помощью соответствующих изменений параметра здесь можно получить все устойчивые стационарные решения. Иначе обстоит дело в случае, изображенном на рис. 5.36d: здесь нельзя с помощью изменения параметра τ во времени достигнуть верхнего устойчивого стационарного состояния, отправляясь от нижнего (при изменении τ решение остается на нижней устойчивой ветви). Верхнего же состояния можно достигнуть путем изменения начальных условий или какого-либо другого параметра задачи. Аналогичная ситуация имеет место на рис. 5.36 e, f. Читатель может

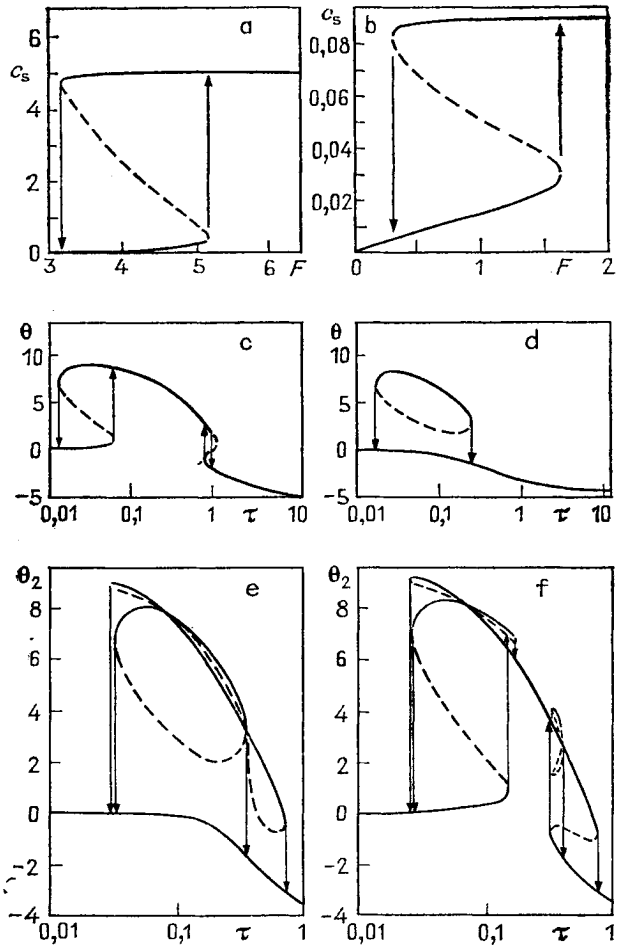


Рис. 5.36. Скачки в точках поворота и точках бифуркации Андронова — Хопфа на диаграммах решений при изменении параметра; сплошные линии — устойчивые стационарные решения, штриховые — неустойчивые стационарные решения. *a*) *Задача* 6, $V = 12$, $c_{x0} = 0{,}005$, $c_{s0} = 5$, $\hat{\mu} = 0{,}5$, $K_s = 0{,}03$, $K_i = 5$, $S_{xs} = 0{,}5$. *b*) *Задача* 5, см. параметры в табл. 4.1. *c*) *Задача* 1, $\gamma = 20$, $B = 10$, $\Lambda = 1$, $\Theta_c = -5$, $k_0 = 1$, $a = 1$. *d*) *Задача* 1, $\gamma = 20$, $B = 10$, $\Lambda = 1$, $\Theta_c = -5$, $k_0 = 1$, $a = 2{,}5$. *e*) *Задача* 2, $\gamma = 20$, $B = 10$, $\Theta_{c1} = \Theta_{c2} = -5$, $a = 1$, $k_0 = 0{,}5$. *f*) *Задача* 2, $\gamma = 20$, $B = 10$, $\Theta_{c1} = \Theta_{c2} = -5$, $a = 1$, $k_0 = 0{,}6$.

легко установить, какие именно устойчивые состояния могут быть достигнуты путем медленного изменения параметра τ[1].

На рис. 5.37 изображена эволюционная диаграмма для *задачи* 2, где существуют устойчивые периодические решения. На нем видно влияние выбора величины α_1 в формуле (5.10.4) (скорости изменения параметра α во времени) при $\alpha_0 = \mathrm{Da}_{10} = 0$. В случае, представленном на рис. 5.37а, эта скорость была выбрана слишком большой, так что процесс не смог достаточно стабилизироваться.

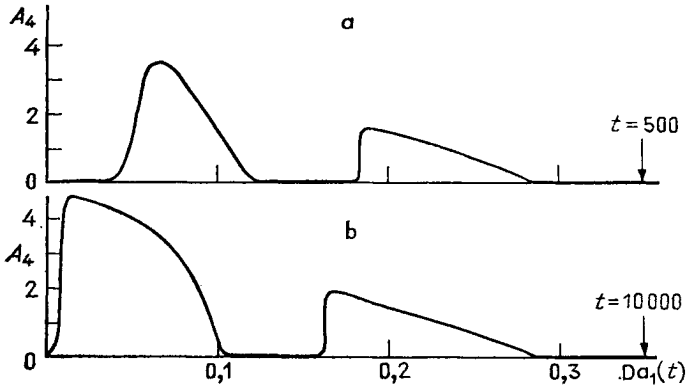


Рис. 5.37. Эволюционная диаграмма *задачи* 2. $\gamma = 1000$, $B = 12$, $\beta_1 = \beta_2 = 2$, $\Theta_{c1} = \Theta_{c2} = 0$, $\Lambda = 1$, $\mathrm{Da}_2 = 0{,}2$, A_4 = амплитуда переменной Θ_2; *a*) $\mathrm{Da}_1 = 0{,}0007t$, $\mathrm{Da}_1 = 0{,}000035t$.

Поучительно сравнить эволюционную диаграмму рис. 5.37b с бифуркационной диаграммой по параметрам Da_1 и Da_2 на рис. 5.20с, где видны точки бифуркации Андронова—Хопфа. На рис. 5.37b показано резкое нарастание амплитуды колебаний вблизи $\mathrm{Da}_1^+ \approx 0{,}1574$. Обращаясь к рис. 5.28, мы видим, что этому значению Da_1^+ отвечает бифуркация Андронова—Хопфа с жесткой потерей устойчивости стационарного режима (ветвь периодических решений отходит в сторону $\mathrm{Da}_1 < \mathrm{Da}_1^+$).

Интересное поведение решения можно наблюдать в случае системы двух связанных между собой реакторов (*задача* 8). Выберем значения параметров из диаграммы стационарных решений на рис. 5.6, а именно, положим $A = 2$, $B = 6$, $D_1/D_2 = 0{,}1$. Исследуем поведение системы при изменении параметра D_1,

[1] Сведений только о стационарных состояниях для этого, конечно, недостаточно. — *Прим. ред.*

выбрав начальные условия в виде

$$t=0:\ X_1=2{,}1,\quad Y_1=2{,}9,\quad X_2=1{,}9,\quad Y_2=3. \qquad (5.10.7)$$

При этом параметр D_1 будем изменять во времени по формуле

$$D_1=D_{10}2^{\pm at}. \qquad (5.10.8)$$

Эволюционные диаграммы приведены на рис. 5.38. В случае возрастающих D_1 (рис. 5.38a) при $D_1 \sim 0{,}01$ мы имеем однородное периодическое решение ($X_1=X_2$, $Y_1=Y_2$), получаю-

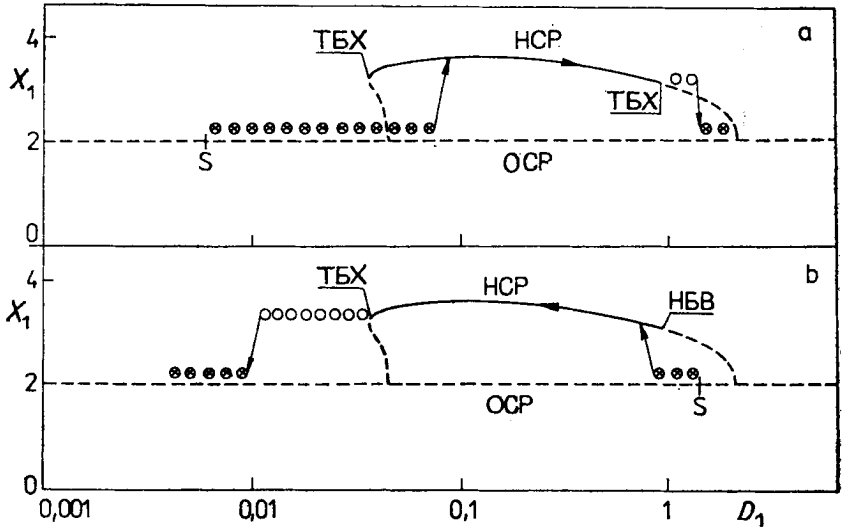


Рис. 5.38. Эволюционная диаграмма *задачи* 8. $N=2$, $A=2$, $B=6$, $\rho=D_1/D_2=0{,}1$. *a*) $D_1=0{,}006\cdot 2^{t/50}$, *b*) $D_1=1{,}5\cdot 2^{-t/50}$. ТБХ — точка бифуркации Андронова — Хопфа, НСР — неоднородное стационарное решение, ОСР — однородное стационарное решение, ⊗ — однородное периодическое решение, ○ — неоднородное периодическое решение, S — старт при $t=0$.

щееся вследствие симметрии системы. При дальнейшем увеличении D_1 происходит перескок на неоднородное стационарное решение, затем в точке комплексной бифуркации появляется неоднородное устойчивое периодическое решение. Это решение через каскад бифуркаций, удваивающих период, порождает хаотическое решение, которое в конце концов утрачивает устойчивость[1], и мы вновь получаем однородное периодическое решение. При уменьшении D_1 (см. рис. 5.38b) однородное периодическое решение переходит прямо на неоднородное стационарное

[1] Последние события на рисунке не отражены. — *Прим. ред.*

решение, затем в точке комплексной бифуркации на неоднородное периодическое решение и, наконец, вновь на однородное периодическое решение.

На рис. 5.39 изображена эволюционная диаграмма для *задачи* 10. В случае а) параметр r (число Рэлея) возрастает со временем в области, где стационарное решение в точке субкритической бифуркации Андронова—Хопфа ($r \sim 33{,}45$) теряет устойчивость, и система переходит в хаотический режим. Из

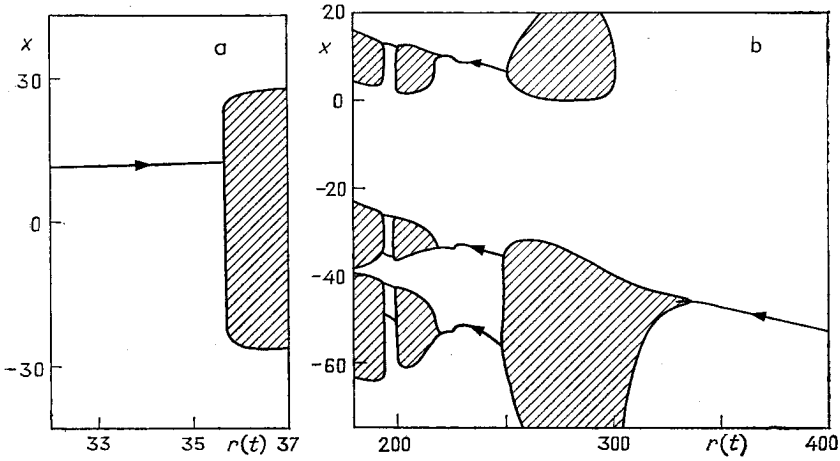


Рис. 5.39. Эволюционные диаграммы *задачи* 10, $\sigma = 16$, $b = 4$. *а*) $r(t) = 32 + 0{,}0005t$. Приведены значения переменной x. В заштрихованной области траектория идет по хаотическому аттрактору, причем эта область представляет собой приближенную проекцию указанного аттрактора на ось x. *b*) $r(t) = 400 - 0{,}1t$. Показаны величины проекции орбит отображения Пуанкаре на ось x. Сечение Σ определяется уравнением $y = 0$. В заштрихованных областях траектория системы идет по хаотическому аттрактору.

рисунка видно, что система еще некоторое время, зависящее от скорости изменения r, следует ветвью неустойчивых (для $r > 33{,}45$) стационарных решений, прежде чем ее поведение станет хаотическим.

На рис. 5.39b параметр со временем убывает. Сначала система устанавливается (приближенно) на периодическом решении, затем происходит удвоение периода, потом следующее удвоение и так далее — до тех пор, пока поведение системы не станет хаотическим. Хаотическое поведение наблюдается до значения r, приблизительно соответствующего точке поворота на ветвь устойчивых периодических движений ($r \sim 248$) (ср. рис. 5.26а). После этого поведение системы становится (приближенно) периодическим и «хаотический аттрактор перестает

быть аттрактором». При $r \sim 230$ возникает бифуркация с потерей симметрии (излом на соответствующей кривой), затем опять происходит каскад бифуркаций удвоения периода и, наконец, вновь наступает хаотический режим. Указанная ситуация, т. е. движение системы вдоль ветви устойчивых периодических решений, возникает еще раз при $r \sim 198$. При дальнейшем уменьшении r система вновь ведет себя хаотически.

5.11. РАСЧЕТ И АНАЛИЗ ПЕРИОДИЧЕСКИХ РЕШЕНИЙ В НЕАВТОНОМНЫХ СЛУЧАЯХ

В § 5.8 мы исследовали случай, когда правые части системы дифференциальных уравнений (5.8.1) не зависели явно от t. Во многих задачах, однако, время t в правых частях появляется, и система оказывается неавтономной:

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{f}(t, \mathbf{x}, \alpha); \quad \mathbf{x} \in \mathrm{R}^n \tag{5.11.1}$$

В приложениях чаще всего встречается случай периодического (внешнего) воздействия на динамическую систему, когда функция $\mathbf{f}$ представляет собой периодическую функцию переменной t с периодом T, т. е. когда для любых t, $\mathbf{x}$ и α имеет место соотношение

$$\mathbf{f}(t+T, \mathbf{x}, \alpha) = \mathbf{f}(t, \mathbf{x}, \alpha). \tag{5.11.2}$$

При этом периодическое решение системы (5.11.1) обычно удовлетворяет условию

$$\mathbf{x}(t+kT) = \mathbf{x}(t), \tag{5.11.3}$$

где k — натуральное число. Такое решение мы будем называть k-периодическим.

Отметим, что могут существовать системы типа (5.11.1), для которых условие (5.11.2) выполняется, имеющие решение периода $\omega \neq kT$.

Примером такого рода служит система

$$\dot{x} = y + (x^2 + y^2 - 1)\sin 2\pi t,$$
$$\dot{y} = -x,$$

для которой $T = 1$, а ее периодическое решение $x = -\cos t$, $y = \sin t$ имеет период, равный 2π.

В данном случае в точках траектории указанного периодического решения (т. е. в точках окружности $x^2 + y^2 = 1$) правые части системы не зависят явно от времени t. Оказывается, что подобная ситуация имеет место для любой периодической

системы, которая обладает решением с периодом, несоизмеримым с периодом правой части системы.

В п. 2.3.2 было введено определение отображения Пуанкаре для случая автономной системы. В случае периодической неавтономной системы ее решения определяют некоторое отображение **P**, которое называется отображением за период; мы будем его иногда также называть отображением Пуанкаре.

Опишем, как возникает такое отображение **P**. Зафиксируем в системе (5.11.1), (5.11.2) некоторое конкретное значение параметра α. Возьмем произвольную точку $x_0 \in R^n$; пусть $\mathbf{x}(t;\ \mathbf{x}_0$ есть решение системы (5.11.1). Положим

$$\mathbf{P}(\mathbf{x}_0) = \mathbf{x}(T;\ \mathbf{x}_0). \tag{5.11.4}$$

Определенное таким образом отображение **P** обладает теми же свойствами, что и отображение Пуанкаре из п. 2.3.2. В частности:

1. Неподвижной точке $\mathbf{x}_0$ отображения **P** соответствует 1-периодическое решение системы (5.11.1), так как $\mathbf{P}(\mathbf{x}_0) = \mathbf{x}_0 \leftrightarrow \mathbf{x}(T; \mathbf{x}_0) = \mathbf{x}_0$.

2. Если система (5.11.1), (5.11.2) (при фиксированном α) имеет k-периодическое решение, то k-я итерация отображения **P** имеет неподвижную точку, поскольку если $\mathbf{x}(kT; \mathbf{x}_0) = \mathbf{x}_0$, то $\mathbf{P}^k(\mathbf{x}_0) = \mathbf{x}_0$.

3. Устойчивость периодического решения определяется устойчивостью соответствующей неподвижной точки отображения **P** или $\mathbf{P}^k$.

Так же, как в автономном случае, мы в принципе имеем две возможности для нахождения периодического решения при фиксированном α, т. е. решения нелинейной краевой задачи (5.11.1), (5.11.3), где k заранее фиксировано. Первая из этих возможностей связана с применением разностных методов (ср. с соотношением (5.8.6)). Другая возможность заключается в использовании метода стрельбы и связана с выбором начальных условий

$$x_i(0) = \eta_i, \quad i = 1,\ 2,\ \ldots,\ n. \tag{5.11.5}$$

Решая уравнение (5.11.1) при условиях (5.11.5), находим при $t = kT$ (ищем k-периодическое решение):

$$x_i(kT) = \varphi_i(\eta_1,\ \ldots,\ \eta_n,\ \alpha), \quad i = 1,\ 2,\ \ldots,\ n. \tag{5.11.6}$$

Для выполнения граничных условий (5.11.3) потребуем, чтобы

$$F_i(\eta_1,\ \ldots,\ \eta_n,\ \alpha) = \varphi_i(\eta_i,\ \ldots,\ \eta_n,\ \alpha) - \eta_i = 0, \quad i = 1,\ 2,\ \ldots,\ n. \tag{5.11.7}$$

Полученная система представляет собой систему n нелинейных уравнений с параметром α, и для ее решения мы можем использовать методику, описанную в § 5.1, а для продолжения решения по параметру — алгоритм DERPAR, описанный в § 5.2. В отличие от автономного случая, где период не был известен и поэтому одну составляющую η_k мы считали фиксированной, здесь период kT задается заранее, а все составляющие вектора η неизвестны. Производные функций F_i мы опять находим с помощью проварьированных переменных $p_{ij} = \partial x_i/\partial \eta_j$, $q_i = \partial x_i/\partial \alpha$ и уравнений в вариациях

$$\frac{dp_{ij}}{dt} = \sum_{s=1}^{n} \frac{\partial f_i}{\partial x_s} p_{sj}, \quad p_{ij}(0) = \delta_{ij}, \tag{5.11.8}$$

$$\frac{dq_i}{dt} = \sum_{s=1}^{n} \frac{\partial f_i}{\partial x_s} q_s + \frac{\partial f_i}{\partial \alpha}, \quad q_i(0) = 0. \tag{5.11.9}$$

Устойчивость найденного периодического решения определяется его мультипликаторами — собственными числами матрицы монодромии

$$\mathbf{B} = [\partial \varphi_i/\partial \eta_j] = [p_{ij}(kT)]. \tag{5.11.10}$$

Таким образом, изменение характера устойчивости периодического решения вновь оказывается возможным лишь при переходе мультипликатора через единичную окружность. Переход через $+1$, так же как и в автономном случае, указывает на наличие точки поворота или точки бифуркации на зависимости решения от параметра. Переход через -1 дает нам ответвление ветви периодических решений с двукратным периодом, т. е. периодом $2\varkappa T$.

Отображение Пуанкаре $\mathbf{P}$, определенное соотношением (5.11.4), при численном интегрировании системы (5.11.1) реализуется с помощью отображения φ, задаваемого формулой (5.11.6) при $k = 1$. Выбрав точку $\eta = \eta^0$, мы (приближенно) получим траекторию отображения Пуанкаре $\eta^0, \eta^1, \ldots, \eta^l, \ldots$:

$$\eta^{l+1} = \varphi(\eta^l, \alpha). \tag{5.11.11}$$

Изобразив на плоскости две выбранные координаты точек η^l ($l = 0, 1, 2, \ldots$) траектории отображения $\mathbf{P}$, получим проекцию этой траектории на заданную плоскость. Так же, как в автономном случае, процесс может стабилизироваться, и мы будем последовательно (многократно) находить совокупность k точек; этой совокупностью будет характеризоваться k-периодическое решение системы (5.11.1). Если же эти точки образуют в пло-

скости замкнутую кривую, то скорее всего речь идет о квазипериодическом решении. Третья возможность состоит в том, что решение стабилизируется на хаотическом аттракторе; в этом случае траектория отображения Пуанкаре имеет более сложную структуру. Проиллюстрируем сказанное на примере задачи о реакторе с перемешиванием, в котором происходит реакция типа «брюсселятор» (ср. *задачи* 7, 9), находящаяся под влиянием некоторого внешнего воздействия. Предположим, что из-

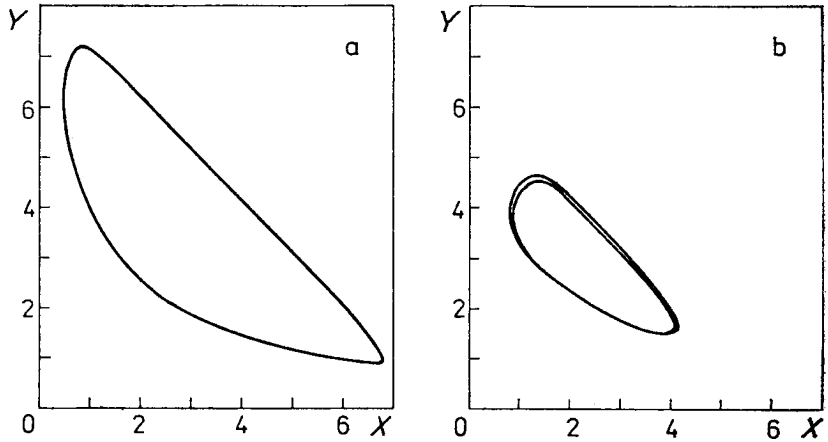


Рис. 5.40. Траектории периодических решений системы (5.11.12); $A = 2$, $B = 6$, $\omega = 3$, *a*) $a = 0$, *b*) $a = 1{,}7084$.

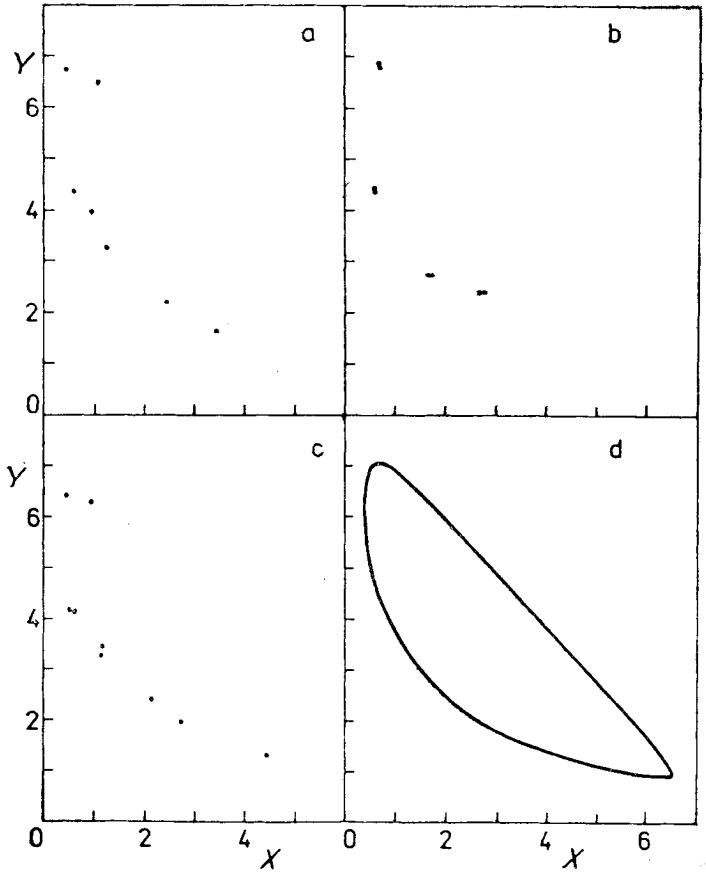
менение концентраций при этом описывается дифференциальными уравнениями вида

$$\begin{aligned} \frac{dX}{dt} &= A - (B+1)X + X^2Y + a\sin\omega t, \\ \frac{dY}{dt} &= BX - X^2Y, \end{aligned} \tag{5.11.12}$$

где a — амплитуда и ω — частота внешнего воздействия. Выберем значения параметров (концентраций подаваемых компонентов), полагая $A = 2$ и $B = 6$. Читатель может легко убедиться, что система (5.11.12) при $a = 0$ (при отсутствии внешнего возбуждения) имеет неустойчивое стационарное решение $X = A$, $Y = B/A$, около которого существует устойчивое периодическое решение с периодом $T = 5{,}0953$ (собственная частота $\omega_0 = 2\pi/T = 1{,}23313$). Траектория этого решения изображена на рис. 5.40a. На рис. 5.40b представлено 1-периодическое решение для случая, когда имеет место синхронизация с внешним воздействием.

На рис. 5.41a — d приведены траектории отображений Пуанкаре установившихся периодических решений, а также квазипериодического решения. В случае k-периодического решения здесь отмечено k точек траектории отображения Пуанкаре. На рис. 5.41e, f представлены примеры траекторий отображения Пуанкаре, которые определяют хаотический аттрактор. При сильном увеличении отдельного участка рис. 5.41e (или f) можно было бы увидеть сложную структуру хаотического аттрактора.

На рис. 5.42 изображены зависимости 1- и 2-периодических решений от параметра a (амплитуды внешнего возбуждения). При этом на графике зависимости $X(0)$ от параметра a каждое 2-периодическое решение изображено дважды. В точках



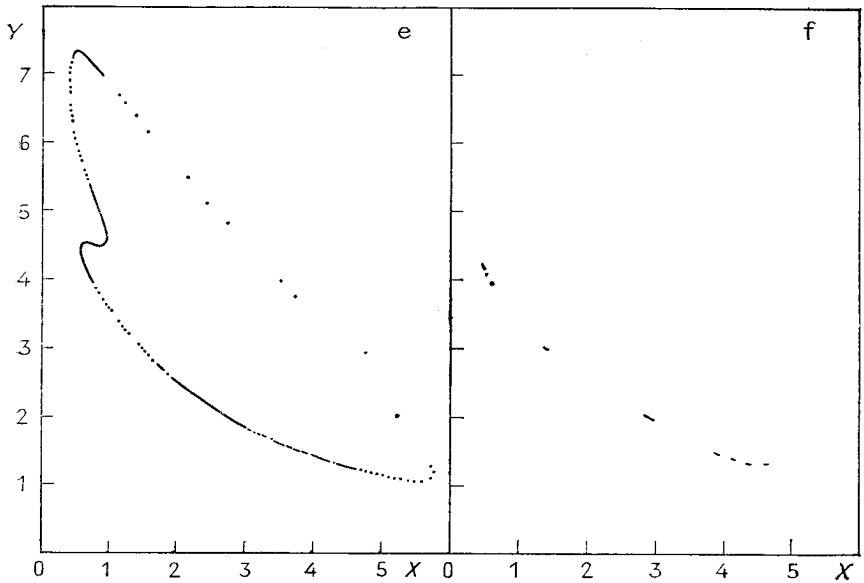


Рис. 5.41. Орбиты отображения Пуанкаре системы (5.11.12); $A = 2$, $B = 6$. *a*) $a = 0{,}7$, $\omega = 3$: 7-периодическое решение, *b*) $a = 0{,}8$, $\omega = 3$: 8-периодическое решение, *c*) $a = 0{,}9$, $\omega = 3$: 9-периодическое решение, *d*) $a = 0{,}5$, $\omega = 6$: квазипериодическое решение, *e*) $a = 0{,}6$, $\omega = 3$: хаотический аттрактор, *f*) $a = 1$, $\omega = 3$: хаотический аттрактор.

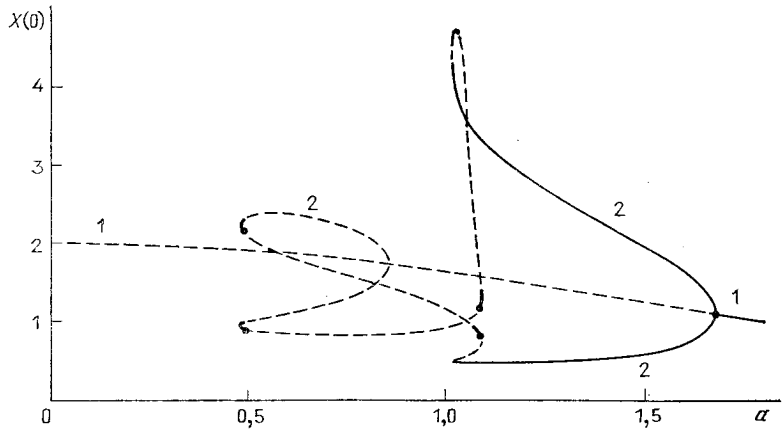


Рис. 5.42. Диаграмма 1- и 2-периодических решений системы (5.11.12); $A = 2$, $B = 6$, $\omega = 3$; сплошные линии — устойчивые решения, штриховые — неустойчивые решения, ● — точка бифуркации удвоения периода.

бифуркации «—1» от 2-периодического решения ответвляется 4-периодическое (на рисунке оно не изображено). Отмеченный недостаток изображения на диаграмме решений проявляется

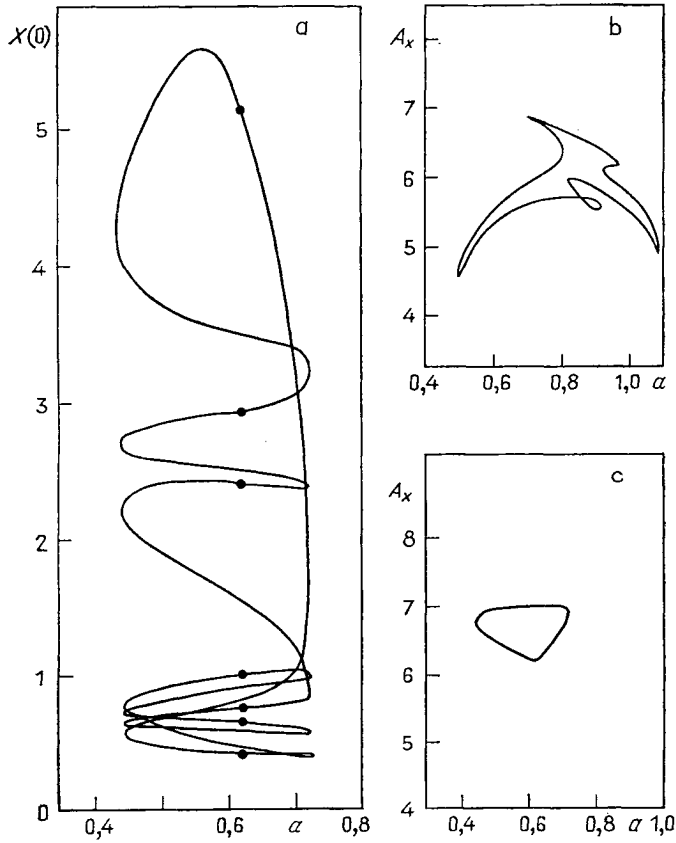


Рис. 5.43. Диаграммы k-периодических решений для системы (5.11.12); $A=2$, $B=6$, $\omega=3$, A_x — амплитуда переменной X. *a*) $k=7$, точками обозначены решения, отличающиеся лишь сдвигом на 1/7 периода; *b*) $k=6$, *c*) $k=7$, ср. рис. *a*).

еще более заметно у k-периодических решений, где k достаточно велико. Примером служит диаграмма 7-периодического решения (рис. 5.43а), на которой каждое решение изображено семикратно (см., например, решение, обозначенное жирными точками). Если вместо $X(0)$ по оси ординат откладывать амплитуду периодического решения, то мы получим диаграмму

решений, представленную на рис. 5.43c. На рис. 5.43b приведена диаграмма 6-периодических решений.

При анализе периодических решений неавтономных систем мы сталкиваемся с проблемой, как найти какое-либо k-периодическое решение, которое в дальнейшем могло бы служить для запуска алгоритма продолжения. При достаточно больших k вероятность «наугад» найти такое решение мала. Это утверждение иллюстрирует табл. 5.32, в которой приведены результаты применения метода Ньютона для системы уравнений (5.11.12) при случайном выборе начальных значений для переменных

Таблица 5.32. Применение метода Ньютона для нахождения k-периодического решения системы (5.11.12), $A = 2$, $B = 6$, $\omega = 3$. Начальные значения выбирались случайным образом из указанных промежутков, для каждого k было выбрано 500 начальных точек

k	Область выбора $X(0)$; $Y(0)$; a	Число найденных k-периодических решений	Найденные m-периодические решения, где k делится на m
1	0—10; 0—10; 0—1,5	416	—
2	0—10; 0—10; 0—1,5	233	105
3	0—10; 0—10; 0—1,5	0	422
4	0—10; 0—10; 0—1,5	1	360
5	0—10; 0—10; 0—1,5	0	311
6	0—10; 0—10; 0—1,5	7	291
7	0—10; 0—10; 0—1,5	89	260
8	0—10; 0—10; 0—1,5	1	425
9	0—10; 0—10; 0—1,5	38	331
10	1—1,75: 3,05—3,8; 0,65—0,85	8	342
11	1—1,75; 3,05—3,8; 0,65—0,85	24	338

Таблица 5.33. Некоторые k-периодические решения системы (5.11.12), $A = 2$, $B = 6$, $\omega = 3$

k	$X(0)$	$Y(0)$	a
1	0,9251	3,2882	1,8494
2	3,1524	1,7691	1,1178
4	0,8347	3,5742	1,0859
6	0,8637	6,0481	0,9147
7	4,2374	1,3613	0,4428
8	2,6479	3,1168	0,9073
9	1,4134	3,0942	0,5418
10	1,7472	2,7363	0,7684
11	0,8039	3,6594	0,9627
12	1,9849	2,5619	0,3824

$\eta_1 = X(0)$, $\eta_2 = Y(0)$, a. В случае больших k ситуация осложняется тем, что мы можем, задав k, найти m-периодическое решение, где k делится на m (табл. 5.32 это подтверждает). В табл. 5.33 приведены найденные значения переменных для различных k-периодических решений.

Нахождение точек бифуркации «+1» и «—1» производится совершенно аналогично тому, как это делалось в случае автономной системы. Ответвление $2k$-периодических решений в точке бифуркации «—1» от семейства k-периодических решений можно приближенно рассчитать с помощью метода, описанного в п. 5.4.2.

5.12. ЗАДАЧИ

Ниже приведено несколько задач для самостоятельного решения с помощью подходов, описанных в данной главе.

5.12.1. Постройте диаграмму стационарных решений для *задачи* 1, используя в качестве параметра переменную Λ. Используйте метод отображения параметра (см. § 5.2), выбирая последовательность значений Θ. Параметры задачи: $\gamma = 20$, $\beta = 0$, $\mathrm{Da} = 0{,}01$, $B = 6; 7; 8; 10; 12$. Покажите, что во всех указанных случаях существует интервал значений Λ, при которых задача имеет три решения. На найденной зависимости решения от параметра укажите также характер устойчивости этого решения. Далее постройте эволюционные диаграммы для Λ, возрастающих и убывающих со временем.

5.12.2. Рассчитайте диаграмму решений *задачи* 5 в зависимости от параметра K_i с помощью метода отображения параметра, описанного в § 5.2. Покажите, что при $K_i = 10^{-5}$ существует три стационарных решения, два из которых являются устойчивыми. Укажите на каждой ветви решений характер их устойчивости. Затем постройте диаграмму решений в зависимости от параметра c_{S0} при $K_i = 10^{-5}$.

5.12.3. Рассмотрим энзиматическую реакцию с конкурентным ингибированием субстратом

$$\begin{array}{ccccc} E + S & \underset{}{\overset{K_S}{\rightleftharpoons}} & ES & \xrightarrow[K_I]{} & E + P. \\ & & \updownarrow & & \\ & & SES & & \end{array}$$

При этом для скорости реакции можно получить соотношение

$$v = \frac{v_{\max} c_S}{K_S + c_S + c_S^2/K_I}. \qquad (5.12.1)$$

Здесь v означает скорость реакции (в энзиматической кинетике обычно используется обозначение v (velocity) вместо r (rate)), c_s — концентрацию субстрата, а v_{max}, K_s, K_I — положительные параметры. Аналогичная формула может быть использована и для описания кинетики роста микроорганизмов, ингибированных субстратом; при этом параметр v_{max} обозначается как $\hat{\mu}$ (ср. *задачу* 6).

Уравнение баланса массы для реактора проточного типа с полным перемешиванием при постоянной температуре, объеме V, расходе F и концентрации на входе c_{s0} может быть записано в виде

$$\frac{dc_{s1}}{dt} = F(c_{s0} - c_{s1}) - V\frac{v_{max}c_{s1}}{K_s + c_{s1} + c_{s1}^2/K_I}. \qquad (5.12.2)$$

Вводя время задержки $\tau = V/F$ и безразмерную концентрацию на выходе $x = c_{s1}/c_{s0}$, можно переписать это уравнение баланса в безразмерной форме

$$\frac{dx}{dt} = 1 - x - \frac{\mathrm{Da}\, x}{a_0 + a_1 x + x^2}. \qquad (5.12.3)$$

Здесь мы использовали обозначения $\mathrm{Da} = \tau v_{max}K_I$, $a_0 = K_s K_I c_{s0}^2$ и $a_1 = c_{s0}K_I$.

Постройте диаграмму стационарных решений как функцию параметра Da при следующих значениях параметров: $c_{s0} = 5$ и

	a)	b)	c)	d)	e)	f)
K_s	0,1	0,05	0,02	0,1	0,1	0,05
K_I	5	5	5	2	1	1

5.12.4. Модель реактора проточного типа с перемешиванием, в котором происходят две последовательные ферментативные реакции

$$A \xrightarrow[k_1]{E_1} B \xrightarrow[k_2]{E_2} Z$$

со скоростями, учитывающими ингибирование субстратом, можно представить в виде (системы) трех дифференциальных

уравнений

$$\frac{dc_A}{dt'} = \frac{F}{V}(c_{A0} - c_A) + R_A,$$
$$\frac{dc_B}{dt'} = \frac{F}{V}(c_{B0} - c_B) + R_B, \qquad (5.12.4a)$$
$$\frac{dc_Z}{dt'} = \frac{F}{V}(c_{Z0} - c_Z) + R_Z,$$

где

$$R_A = -k_1 c_{E1} \frac{c_A}{K_{s1} + c_A + c_A^2/K_{i1}},$$
$$R_B = -k_2 c_{E2} \frac{c_B}{K_{s2} + c_B + c_B^2/K_{i2}} - R_A, \qquad (5.12.4b)$$
$$R_Z = -R_A - R_B.$$

Вводя переменные

$$a = \frac{c_A}{c_{A0}}, \quad b = \frac{c_B}{c_{A0}}, \quad z = \frac{c_Z}{c_{A0}}, \quad t = \frac{t' k_1 c_{E1}}{c_{A0}},$$
$$\bar{K}_{Sj} = \frac{K_{Sj}}{c_{A0}}, \quad \bar{K}_{ij} = \frac{K_{ij}}{c_{A0}}, \quad j = 1, 2, \quad K = \frac{k_1 c_{E1}}{k_2 c_{E2}}, \quad \tau = \frac{k_1 c_{E1} V}{F c_{A0}}, \qquad (5.12.4c)$$

перепишем исходную систему в безразмерной форме

$$\frac{da}{dt} = \frac{1}{\tau}(1 - a) + r_a,$$
$$\frac{db}{dt} = \frac{1}{\tau}(b_0 - b) + r_b, \qquad (5.12.4d)$$
$$\frac{dz}{dt} = \frac{1}{\tau}(z_0 - z) + r_z,$$

где

$$r_a = -\frac{a}{\bar{K}_{S1} + a + a^2/\bar{K}_{i1}},$$
$$r_b = -\frac{1}{K}\frac{b}{\bar{K}_{S2} + b + b^2/\bar{K}_{i2}} - r_a, \qquad (5.12.4e)$$
$$r_z = -r_a - r_b, \quad b_0 = c_{B0}/c_{A0}, \quad z_0 = c_{Z0}/c_{A0}.$$

Рассчитайте диаграмму стационарных решений в зависимости от параметра τ для следующих значений остальных параметров: $\bar{K}_{s1} = \bar{K}_{s2} = 0{,}1$; $b_0 = z_0 = 0$ и

a) $\bar{K}_{i1} = 0{,}1$, $K = 3$, $\bar{K}_{i2} = 0{,}01$; $0{,}1$; ∞;
b) $\bar{K}_{i1} = \bar{K}_{i2} = 0{,}1$, $K = 0{,}366$; 1; 3;
c) $\bar{K}_{i1} = 0{,}1$, $\bar{K}_{i2} = 0{,}01$, $K = 0{,}3$.

Используйте алгоритм продолжения, описанный в п. 5.2.3, либо метод отображения параметра (п. 5.2.1) по следующей схеме: выберите a, из первого уравнения (5.12.4d) подсчитайте τ (положив $\dot{a}=0$), затем из второго уравнения (при $\dot{b}=0$) найдите значение параметра b, последовательно подставляя ряд значений b и используя метод Ньютона. Покажите, что существует несколько решений для некоторых интервалов значений параметра τ (например, для $\tau=3$ в случае c)). Определите характер устойчивости отдельных ветвей решения. Продумайте способ, как находить точки поворота. Попытайтесь построить соответствующую бифуркационную диаграмму в плоскости параметров $(K-\tau)$.

5.12.5. Модель проточного реактора с перемешиванием, в котором происходят последовательные экзотермические реакции типа $A \to B \to C$, можно описать с помощью системы трех дифференциальных уравнений (см. п. 4.2.1):

$$\frac{dY}{dt}=1-Y-\mathrm{Da}\,Y\exp\frac{\Theta}{1+\Theta/\gamma}, \tag{5.12.5a}$$

$$\frac{dW}{dt}=-W+\mathrm{Da}\,Y\exp\frac{\Theta}{1+\Theta/\gamma}-\mathrm{Da}\,SW\exp\frac{k\Theta}{1+\Theta/\gamma}, \tag{5.12.5b}$$

$$\frac{d\Theta}{dt}=-\Theta-\beta(\Theta-\Theta_c)+\mathrm{Da}\,BY\exp\frac{\Theta}{1+\Theta/\gamma}+$$
$$+\mathrm{Da}\,B\alpha SW\exp\frac{k\Theta}{1+\Theta/\gamma}. \tag{5.12.5c}$$

Здесь Θ — безразмерная температура, Y и W — безразмерные концентрации компонентов A и B. При этом предполагается, что рассматриваемые реакции имеют первый порядок.

Для построения диаграммы стационарных решений по параметру Da (остальные параметры фиксированы) можно воспользоваться следующим методом отображения параметра (при этом мы рассматриваем уравнения, у которых вместо левых частей стоят нули):

1. Из уравнения (5.12.5a) представим Y как функцию от Θ.
2. Умножим уравнение (5.12.5b) на $B\alpha$ и сложим с уравнением (5.12.5c). Из полученного соотношения определим W как функцию от Θ, используя при этом уже найденную зависимость $Y(\Theta)$.
3. Обе эти зависимости подставим в уравнение (5.12.5c) и получим уравнение следующего типа:

$$a(\Theta)\,\mathrm{Da}^2+b(\Theta)\,\mathrm{Da}+c(\Theta)=0. \tag{5.12.6}$$

4. Для каждого заданного значения Θ из квадратного уравнения (5.12.6) найдем Da.

Постройте указанным способом соответствующую диаграмму решений при $\gamma \to \infty$, $B = 10$, $\alpha = b = k = 1$, $\Theta_c = 0$, $S = 0{,}013$. Покажите, что при $\mathrm{Da} = 0{,}06$ существует пять стационарных решений задачи (5.12.5). Укажите на диаграмме характер устойчивости стационарных решений. Используйте также для построения диаграммы метод продолжения типа предиктор-корректор и сравните полученные результаты. Найдите пять стационарных состояний исходной задачи при $\gamma \to \infty$; $\alpha = \beta = k = 1$, $S = 0{,}01$; $\Theta_c = 0$; $B = 10{,}05$; $\mathrm{Da} = 0{,}0705$ и выясните характер их устойчивости (значения Θ для отдельных решений должны выбираться следующим образом: 0,55; 3,05; 5,15; 6,55; 9,6). Покажите, что три из этих решений являются устойчивыми, и с помощью динамического моделирования (численного интегрирования) уравнений (5.12.5) проверьте, что решение на них стабилизируется.

Далее, путем динамического моделирования уравнений (5.12.5) покажите, что для значений параметров $\gamma \to \infty$; $B = 14$; $\beta = 3$; $\Theta_c = 0$; $k = 1$; $\alpha = S = 0{,}03$ и значений Da, выбираемых из интервала (0,165; 0,33), в данной задаче существует некоторый предельный цикл. Более подробные результаты, которые можно использовать для сравнения, приведены в работе: Hlaváček V., Kubiček M., Višňák K.: Chem. Engng. Sci. 27(1972), 719—742.

5.12.6. Постройте бифуркационную диаграмму в плоскости параметров β и Da для *задачи* 1. Выберите следующие значения остальных параметров: $\gamma = 20$, $\Lambda = 1$, $\Theta_c = 0$, $B = 6$; 8; 10; 12. Для построения бифуркационной диаграммы воспользуйтесь методом отображения параметра; после преобразования уравнений выберите последовательность значений Θ, для каждого из них найдите значения Da и β из условий для точки поворота (бифуркации слияния) или условий для бифуркации Хопфа.

5.12.7. Постройте бифуркационную диаграмму в плоскости параметров $\beta = \beta_1 = \beta_2$ и $\mathrm{Da} = \mathrm{Da}_1 = \mathrm{Da}_2$ для *задачи* 2. Значения остальных параметров выберите следующими:

a) $\gamma = 1000$, $\Theta_{c1} = \Theta_{c2} = 0$, $B = 22$, $\Lambda = 1$,

b) $\gamma = 20$, $\Theta_{c1} = \Theta_{c2} = -5$, $B = 8$ $(B = 10)$, $\Lambda = 1$.

Далее, для нескольких значений параметра β постройте диаграмму решний как функцию параметра Da.

5.12.8. Модифицированная модель Лотки[1] может быть описана системой трех дифференциальных уравнений вида

$$\begin{aligned} \dot{x} &= 1 - bx - xy^2 - gxy + z, \\ \dot{y} &= a(xy^2 + d - y), \\ \dot{z} &= f(gxy - z). \end{aligned} \tag{5.12.7}$$

[1] Одна из многочисленных модификаций уравнений Лотки — Вольтерры.

Выберите значения параметров равными $a = 4$, $b = 0{,}35$, $d = 0{,}1$, $f = 0{,}2$. У данной модели существуют периодические решения, для некоторых значений параметра g они представлены в следующей таблице (для каждого решения указана одна точка на траектории. — *Ред.*):

g	x	y	z	T	
1,57	1,382	0,788	1,102	9,363	неустойчиво
1,62	1,384	0,783	1,138	9,162	неустойчиво
1,67	1,386	0,779	1,173	8,965	устойчиво
2,92	1,494	0,692	2,228	6,266	устойчиво

Найдите периодические решения для этой модели как функции параметра g и постройте диаграмму периодических решений:

(Литература: Schulmeister Th. Chaos in a Lotka-Scheme with Depot. Stud. Biophys., 72(1978), 205—206; Хибник А. И. Периодические решения системы n дифференциальных уравнений. — НЦБИ АН СССР, Пущино, 1979.)

5.12.9. Одна из моделей «хищник—жертва», используемых в математической экологии, может быть описана системой трех дифференциальных уравнений вида

$$\begin{aligned} \dot{x}_1 &= x_1(x_1 - \beta)(1 - x_1) - x_1 y - \alpha(x_1 - x_2), \\ \dot{x}_2 &= x_2(x_2 - \beta)(1 - x_2) - x_2 y - \alpha(x_2 - x_1), \\ \dot{y} &= y(x_1 + x_2 - p - \mu y). \end{aligned} \tag{5.12.8}$$

Параметры задачи выбираются следующими: $\beta = 0{,}25$; $\alpha = -0{,}02$; $\mu = 0$; p. У такой модели существуют периодические решения (T — период), например,

p	x_1	x_2	y	T	
1,24	0,62	0,62	0,2191	15,6222	неустойчиво
1,17	0,6245	0,6245	0,3519	23,3750	устойчиво

Продолжите эти периодические решения по параметру p.

(Литература: Хибник А. И. Периодические решения системы n дифференциальных уравнений. — НЦБИ АН СССР, Пущино, 1979.)

5.12.10. Исследуйте уравнение Дюффинга специального вида:

$$\ddot{x} + \frac{1}{25}\dot{x} - \frac{1}{5}x + \frac{8}{15}x^3 = \frac{2}{5}\cos\omega t, \qquad (5.12.6)$$

где точка означает дифференцирование по t. Перепишите это уравнение второго порядка в виде системы двух уравнений первого порядка. Покажите, что для некоторых ω из интервала (0,1; 2) существует несколько устойчивых периодических решений данной задачи (их можно найти с помощью динамического моделирования). Постройте диаграмму периодических решений в зависимости от параметра ω.

(Литература: Rüdiger Seydel. From Equilibrium to Chaos. Practical Bifurcation and Stability Analysis. Elsevier, New York — Amsterdam — London, 1988.)

5.12.11. Проанализируйте математическое описание *задачи* 6 с запаздыванием во времени в функции роста, задаваемой формулой (P6-4). Выберите следующие значения параметров: $\hat{\mu} = 0{,}5$; $V/F = 3$; $c_{x0} = 0{,}005$, $c_{s0} = 5$, $K_s = 0{,}03$, $K_i = 5$, $S_{xs} = 0{,}5$. В случае $t_L = 0$ задача имеет два устойчивых стационарных решения, одно с низкой конверсией субстрата ($c_s \sim 5$), другое — с высокой конверсией субстрата ($c_s \sim 0$). При возрастании величины запаздывания t_L устойчивость первого решения не меняется, в то время как второе решение при $t_L > t_L^* \sim 0{,}19$ становится неустойчивым и возникает установившееся периодическое решение. Используя стандартное программное обеспечение для интегрирования уравнений с запаздыванием, исследуйте указанную выше потерю устойчивости. Если в вашем распоряжении нет соответствующей стандартной программы, то воспользуйтесь методом Эйлера с интерполяцией по таблице значений (см. п. 5.7.4.4).

ЛИТЕРАТУРА

[5.1] Ortega J. M., Rheinboldt W. C.: Iterative Solution of Non-linear Equations in Several Variables. Academic Press, New York, 1970. [Имеется перевод: Ортега Дж., Рейнболдт В. Итерационные методы решения нелинейных систем уравнений со многими неизвестными. — М.: Мир, 1975. — 558 с.]

[5.2] Schreiber I.: MS Thesis (на чешском), KPA VŠCHT, Praha, 1979.

[5.3] Wacker H. (ed.): Continuation Methods. Academic Press, New York, 1970.

[5.4] Kubíček M., Holodniok M., Marek I.: Numer. Funct. Anal. and Optimiz. 3 (1981), 223.

[5.5] Kubíček M.: ACM Trans. Math. Software 2 (1976), 98.

[5.6] Фаддеев Д. К., Фаддеева В. Н. Вычислительные методы линейной алгебры. — М.-Л.: Физматгиз, 1963. — 734 с.

[5.7] Демидович Б. П., Марон И. А. Основы вычислительной математики. — М.: Наука, 1966.

[5.8] Ralston A.: A First Course in Numerical Analysis, McGraw-Hill, New York, 1965.
[5.9] Kubíček M.: Appl. Math. Comput. 1 (1975). 341.
[5.10] Kubíček M., Marek M.: Computational Methods in Bifurcation Theory and Dissipative Structures, Springer, New York, 1983.
[5.11] Kubíček M., Marek M.: Appl. Math. Comput. 5 (1979), 250.
[5.12] Kubíček M., Klíč A.: Appl. Math. Comput. 13 (1983), 125.
[5.13] Kubíček M., Stuchl I., Marek M.: J. Comput. Phys. 48 (1982), 106.
[5.14] Kubíček M: Chem. Engng. Sci. 34 (1979), 1078.
[5.15] Kubíček M.: SIAM J. Appl. Math. 38 (1980), 103.
[5.16] Holodniok M., Kubíček M.: Appl. Math. Comput., 15 (1984), 261.
[5.17] Holodniok M., Kubíček M.: J. Comput. Phys., 55 (1984), 254.
[5.18] Marek M., Schreiber I.: Chaotic Behaviour of Deterministic Dissipative Systems. Academia, Praha, 1984, and Cambridge University Press, Cambridge, 1991.
[5.19] Stoer J., Bulirsch R.: Introduction to Numerical Analysis. Springer, New York, 1980.
[5.20] Holodniok M., Kubíček M.: Continuation of Periodic Solutions in Ordinary Differential Equations with Application to the Hodgkin — Huxley Model. In: Ortiz E. L., Ed.: «Numerical Approximation of Partial Differential Equations», Elsevier, 1987, 397.
[5.21] Henon M.: Physica D (1982), 412.
[5.22] Shimada I., Nagashima T.: Prog. Theor. Phys. 61 (1979) 1605.
[5.23] Benettin G., Froeschle C., Scheidecker J. P.: Phys. Rev. A 19 (1979), 2454.
[5.24] Rheinboldt W. C., Burkardt J. V.: ACM Trans. Math. Software 15 (1983), 215.
[5.25] Keller H. B.: Numerical Solution of Bifurcation and Nonlinear Eigenvalue Problems. In: Rabinowitz P. H., Ed.: Applications of Bifurcation Theory, Academic Press, New York, 1977.
[5.26] Kubíček M., Holodniok M.: J. of Comput. Physics 70 (1987) 203.
[5.27] Feigenbaum M. J.: J. Statist. Physics 6 (1979), 669.
[5.28] May R.: Nature 261 (1976), 459.
Preston C.: Iterates of maps on an interval. Springer, Berlin, 1983.
[5.29] Schreiber I., Holodniok M., Kubíček M., Marek M.: J. of Stat. Physics, 43 (1986), 489.
[5.30] Holodniok M., Kubíček M.: Math. and Computers in Simulation, 29 (1987), 33.
[5.31] Linniger W., Willoughby R. A.: SIAM J. Num. Anal. 6 (1969), 47.
[5.32] Kubíček M., Višňak K.: Chem. Engng. Commun. 1 (1974), 291.
[5.33] Hassard B. D., Kazarinoff N. D., Wan Y. H.: Theory and Applications of Hopf Bifurcation Cambridge University Press, 1981. [Имеется перевод: Хэссард Б, Казаринов Н., Вэн И. Теория и приложения бифуркации рождения цикла. — М.: Мир, 1985. — 280 с.]
[5.34] Brenan K. E., Campbell S. L., Petzold L. R.: Numerical Solution of Initial — Value Problems in Differential — Algebraic Equations. North — Holland, Elsevier, New York, 1989.
[5.35] Ахиезер Н. И., Глазман И. М.: Теория линейных операторов в Гильбертовом пространстве. — М.: Наука, 1966.

ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ ЛИТЕРАТУРА

Джакалья Г. Методы теории возмущений для нелинейных систем. — М.: Наука, 1979. — 319 с.
Джозеф Д. Устойчивость движений жидкости. — М.: Мир, 1981. — 638 с.

Глава 6

ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ И АЛГОРИТМЫ, ИСПОЛЬЗУЕМЫЕ ДЛЯ АНАЛИЗА СИСТЕМ С РАСПРЕДЕЛЕННЫМИ ПАРАМЕТРАМИ

Для систем с сосредоточенными параметрами пространство их состояний представляло собой конечномерное пространство R^n. В случае систем с распределенными параметрами переменные, описывающие их состояние, являются функциями пространственных переменных и, следовательно, представляют собой элементы некоторого подходящим образом выбранного бесконечномерного пространства. Целый ряд задач математической физики, гидродинамики, устойчивости конструкций, химической технологии и биотехнологии (эти примеры не исчерпывают всего перечня) можно представить в виде систем с распределенными параметрами. С математической точки зрения эти задачи чаще всего описываются интегральными уравнениями, уравнениями в частных производных или их комбинациями с обыкновенными дифференциальными уравнениями и алгебраическими соотношениями. В этой главе мы рассмотрим задачи, описываемые нелинейными дифференциальными уравнениями параболического типа с одной пространственной переменной. Вводные сведения о таких уравнениях приведены выше, в гл. 2. Читателю, который захочет ознакомиться с теорией таких уравнений более глубоко, мы рекомендуем книгу [2.32]. Несмотря на ограниченность класса проблем, описываемых такими математическими моделями, эти описания охватывают довольно большое количество технических задач (особенно из области тепло- и массообмена при химических превращениях), а также ряд биологических проблем и задач гидродинамики. Многие из описываемых здесь методов легко обобщаются на соответствующие двумерные и трехмерные задачи, однако тогда затраты машинного времени, необходимого для численного решения этих задач, существенно возрастают.

Очень часто системы с распределенными параметрами преобразуют в системы с сосредоточенными параметрами. При этом обычно используется метод прямых (см. п. 6.4.5) совместно с методом Галеркина, методом коллокаций или каким-либо разностным методом высокой точности [6.1, 6.2]. Иногда для указанного преобразования используются и так называемые спектральные методы [6.3]. При уменьшении погрешности аппроксимации (например, при выборе более мелкого шага дискретизации) возрастает размерность получающихся систем с сосредоточенными параметрами. Тем не менее для некоторых типов задач даже весьма грубая аппроксимация дает удивительно хорошие (качественно правильные) результаты [6.4].

В данной главе читатель познакомится с методами вычисления стационарных решений, нахождения зависимости этих стационарных решений от параметра и отыскания вещественных и комплексных бифуркаций. Будут также рассмотрены методы динамического моделирования (численного решения) параболических уравнений, методы нахождения периодических решений и, наконец, построение соответствующих эволюционных диаграмм.

6.1. СТАЦИОНАРНЫЕ РЕШЕНИЯ (МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ НЕЛИНЕЙНЫХ КРАЕВЫХ ЗАДАЧ)

Для иллюстрации методов нахождения стационарных решений параболических дифференциальных уравнений с частными производными рассмотрим системы типа «реакция—диффузия» (см. задачи 11—13). Левые части уравнений (4.3.7) при этом мы полагаем равными нулю. Таким образом, стационарное решение удовлетворяет уравнениям ($' = d/dz$)

$$x'' + \frac{L^2}{D_x} f(x, y) = 0, \tag{6.1.1}$$

$$y'' + \frac{L^2}{D_y} g(x, y) = 0. \tag{6.1.2}$$

Запишем граничные условия (4.3.8), (4.3.12), (4.3.13) (для граничных условий первого рода мы рассмотрим только симметричный случай (4.3.9)):

ГУ1:
$$x(0) = \bar{x}, \quad y(0) = \bar{y}, \tag{6.1.3a}$$
$$x(1) = \bar{x}, \quad y(1) = \bar{y}. \tag{6.1.3b}$$

ГУ2:
$$x'(0) = 0, \quad y'(0) = 0, \tag{6.1.4a}$$
$$x'(1) = 0, \quad y'(1) = 0. \tag{6.1.4b}$$

ГУ3:
$$\alpha_{x0} x'(0) + \beta_{x0} x(0) = \gamma_{x0}, \quad \alpha_{y0} y'(0) + \beta_{y0} y(0) = \gamma_{y0}, \tag{6.1.5a}$$
$$\alpha_{x1} x'(1) + \beta_{x1} x(1) = \gamma_{x1}, \quad \alpha_{y1} y'(1) + \beta_{y1} y(1) = \gamma_{y1}. \tag{6.1.5b}$$

Если для граничных условий первого рода $f(\bar{x}, \bar{y}) = g(\bar{x}, \bar{y}) = 0$, то имеется однородное по пространству решение системы (6.1.1—2): $x(z) \equiv \bar{x}$, $y(z) \equiv \bar{y}$. Это решение, очевидно, удовлетворяет и граничным условиям второго рода. Численными решениями нелинейных краевых задач занимался целый ряд авторов, среди публикаций которых можно найти самые разные работы — от чисто теоретических статей до сугубо прикладных исследований. Здесь мы рассмотрим указанную проблему сравнительно кратко; читателей же, которые заинтересуются этой проблемой более глубоко, мы отсылаем к монографической литературе [6.5, 6.6, 6.7, 6.8, 6.9, 6.10].

Решение нелинейных краевых задач для обыкновенных дифференциальных уравнений может быть найдено с помощью целого ряда различных методов. К чаще всего используемым (и наиболее универсальным) относятся разностные методы и метод стрельбы. Эти две группы методов мы и рассмотрим ниже.

6.1.1. Разностные методы

На промежутке $z \in [0, 1]$ выберем сетку узловых точек $z_0 = 0, z_1, \ldots, z_n = 1$. Сетка, как правило, выбирается эквидистантной, $z_i = ih$, $i = 0, 1, \ldots, n$, где $h = 1/n$ есть шаг сетки. На этой сетке узлов величины x_i, y_i мы рассматриваем как аппроксимации значений решения $x(z_i)$, $y(z_i)$, $i = 0, 1, \ldots, n$. Далее, производные в уравнениях (6.1.1) и (6.1.2) заменяются соответствующими разностными формулами, например, трехточечными центральными разностями:

$$\begin{aligned} x_i'' &\sim x''(z_i) \sim \frac{x_{i-1} - 2x_i + x_{i+1}}{h^2}, \\ y_i'' &\sim y''(z_i) \sim \frac{y_{i-1} - 2y_i + y_{i+1}}{h^2}. \end{aligned} \tag{6.1.6}$$

Подстановка этих выражений в уравнения (6.1.1) и (6.1.2) приводит к следующей системе нелинейных уравнений:

$$x_{i-1} - 2x_i + x_{i+1} + \frac{L^2h^2}{D_x} f(x_i, y_i) = 0, \quad i = 1, 2, \ldots, n-1, \tag{6.1.7}$$

$$y_{i-1} - 2y_i + y_{i+1} + \frac{L^2h^2}{D_y} g(x_i, y_i) = 0, \quad i = 1, 2, \ldots, n-1. \tag{6.1.8}$$

Добавляя к ним аппроксимации граничных условий, мы получаем систему $2n+2$ уравнений. Так, для случая ГУ1 имеем

$$x_0=\bar{x}, \quad y_0=\bar{y}, \tag{6.1.9a}$$

$$x_n=\bar{x}, \quad y_n=\bar{y}. \tag{6.1.9b}$$

Для ГУ2 (или ГУ3) мы должны, кроме того, заменить производные в крайних точках. Если для аппроксимации первой производной в ГУ2 использовать двухточечную замену типа

$$x_0' \sim \frac{x_1-x_0}{h}=0,$$

то порядок аппроксимации в формулах (6.1.7), (6.1.8) понизится с $O(h^2)$ до $O(h)$. Одна из возможностей сохранить порядок аппроксимации равным $O(h^2)$ — использовать несимметричную разностную замену первой производной, включающую три узловые точки:

$$x_0' \sim \frac{-3x_0+4x_1-x_2}{2h}.$$

Другая возможность состоит в использовании аппроксимации, основанной на виртуальных точках с индексами $i=-1$ и $i=n+1$. Именно, распространим соотношения (6.1.7) и (6.1.8) на случай индексов $i=0$ и $i=n$ и заменим граничные условия (6.1.4) трехточечными центральными разностями:

$$x_0' \sim \frac{x_1-x_{-1}}{2h}=0, \quad y_0' \sim \frac{y_1-y_{-1}}{2h}=0, \tag{6.1.10a}$$

$$x_n' \sim \frac{x_{n+1}-x_{n-1}}{2h}=0, \quad y_n' \sim \frac{y_{n+1}-y_{n-1}}{2h}=0. \tag{6.1.10b}$$

Подставляя значения x_{-1}, y_{-1}, x_{n+1} и y_{n+1} из этих соотношений в формулы (6.1.7) и (6.1.8), находим

$$2x_1-2x_0+\frac{L^2h^2}{D_x}f(x_0, y_0)=0, \tag{6.1.11a}$$

$$2y_1-2y_0+\frac{L^2h^2}{D_y}g(x_0, y_0)=0, \tag{6.1.11b}$$

$$2x_{n-1}-2x_n+\frac{L^2h^2}{D_x}f(x_n, y_n)=0, \tag{6.1.12a}$$

$$2y_{n-1}-2y_n+\frac{L^2h^2}{D_y}g(x_n, y_n)=0. \tag{6.1.12b}$$

Так же, как и в случае ГУ1, мы получили систему $2n+2$ нелинейных уравнений (6.1.7), (6.1.8), (6.1.11), (6.1.12) относительно $2n+2$ неизвестных. Упорядочим эти неизвестные

следующим образом:

$$\mathbf{X} = (x_0, y_0, x_1, y_1, x_2, \ldots, x_{n-1}, y_{n-1}, x_n, y_n). \qquad (6.1.13)$$

Перепишем теперь соответствующие уравнения для случая ГУ2 в виде последовательности:

$$\begin{array}{ll}
1. & (6.1.11\text{a}), \\
2. & (6.1.11\text{b}), \\
3. & (6.1.7) \text{ при } i=1, \\
4. & (6.1.8) \text{ при } i=1, \\
5. & (6.1.7) \text{ при } i=2, \\
6. & (6.1.8) \text{ при } i=2, \\
 & \cdots \\
2n-1. & (6.1.7) \text{ при } i=n-1, \\
2n. & (6.1.8) \text{ при } i=n-1, \\
2n+1. & (6.1.12\text{a}), \\
2n+2. & (6.1.12\text{b}).
\end{array} \qquad (6.1.14)$$

Мы получили систему нелинейных уравнений со специальной структурой вхождения неизвестных в уравнениях. Для описания этой структуры вводится специальная схема (матрица) размещения, имеющая столько строк, сколько исходная система уравнений, и столько столбцов, сколько неизвестных имеется в системе. Элементами матрицы размещения служат либо нули (неизвестная в соответствующем уравнении не фигурирует), либо крестики (неизвестная входит в соответствующее уравнение). Таким образом, первые шесть строк матрицы размещения для системы (6.1.13)—(6.1.14) имеют вид

$$\begin{array}{cccccccccccccc}
x & x & x & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\
x & x & 0 & x & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\
x & 0 & x & x & x & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\
0 & x & x & x & 0 & x & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\
0 & 0 & x & 0 & x & x & x & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\
0 & 0 & 0 & x & x & x & 0 & x & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0
\end{array}$$

Читатель может легко достроить матрицу размещения и убедиться, что она является пятидиагональной (это означает, что крестики располагаются на главной диагонали и на четырех соседних диагоналях). Отметим, что в данном случае матрица Якоби системы также будет пятидиагональной. Если теперь для

решения этой системы применить метод Ньютона, то на каждом шаге итераций нужно будет решать систему линейных алгебраических уравнений с пятидиагональной матрицей. При этом можно воспользоваться алгоритмом, основанным на методе исключения Гаусса, в котором учитываются лишь элементы на указанных пяти диагоналях.

Применим теперь метод конечных разностей для нахождения стационарного решения *задачи* 16. Это стационарное решение описывается соотношениями (см. уравнения (P16-11), (P16-12))

$$y'' + \frac{a}{r} y' - \Phi^2 y \exp \frac{\Theta}{1 + \Theta/\gamma} = 0, \tag{6.1.15a}$$

$$\Theta'' + \frac{a}{r} \Theta' + \gamma\beta\Phi^2 y \exp \frac{\Theta}{1 + \Theta/\gamma} = 0, \tag{6.1.15b}$$

а граничные условия (P16-13), (P16-14) принимают вид

$$y'(0) = 0, \tag{6.1.16a}$$

$$\Theta'(0) = 0, \tag{6.1.16b}$$

$$y(1) + \frac{1}{\mathrm{Sh}} y'(1) = 1, \tag{6.1.16c}$$

$$\Theta(1) + \frac{1}{\mathrm{Nu}} \Theta'(1) = 0. \tag{6.1.16d}$$

Иногда при вычислении стационарного решения удается понизить размерность исходной задачи. Продемонстрируем эту возможность на данном примере, предполагая $\mathrm{Nu} = \mathrm{Sh}$. Умножая уравнение (6.1.15a) на множитель $\gamma\beta$, складывая результат с уравнением (6.1.15b) и вводя обозначение

$$u = \gamma\beta y + \Theta, \tag{6.1.17}$$

мы получаем уравнение

$$u'' + \frac{a}{r} u' = 0. \tag{6.1.18}$$

Граничные условия (6.1.16a, b, c, d) переписываются в виде

$$u'(0) = 0, \tag{6.1.19a}$$

$$u(1) + \frac{1}{\mathrm{Nu}} u'(1) = \gamma\beta. \tag{6.1.19b}$$

Левая часть уравнения (6.1.18) равняется $[r^a u']'/r^a$, откуда с использованием (6.1.19a) находим $u' = 0$. Интегрируя, имеем $u = C$, и из условия (6.1.19b) следует, что $u(r) \equiv \gamma\beta$. Теперь из формулы (6.1.17) вытекает зависимость между Θ и y

$$\Theta = \gamma\beta(1 - y). \tag{6.1.20}$$

Заметим, что при $\mathrm{Nu} \neq \mathrm{Sh}$ это соотношение оказывается несправедливым. Таким образом, система (6.1.15)—(6.1.16) сводится к краевой задаче для одного дифференциального уравнения второго порядка

$$y'' + \frac{a}{r} y' - \Phi^2 y \exp \frac{\gamma\beta(1-y)}{1+\beta(1-y)} = 0 \qquad (6.1.21)$$

с граничными условиями (6.1.16a, c). Рассмотрим далее для простоты предельный случай $\mathrm{Nu} \to \infty$, $\mathrm{Sh} \to \infty$ (см. гл. 4, *задача* 16). Выберем сетку узловых точек следующим образом: $r_i = ih$, $i = 0, 1, \ldots, n$, $h = 1/n$. Тогда разностный аналог уравнения (6.1.21) принимает вид

$$\frac{y_{i-1} - 2y_i + y_{i+1}}{h^2} + \frac{a}{ih} \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h} - \Phi^2 y_i \exp \frac{\gamma\beta(1-y_i)}{1+\beta(1-y_i)} = 0,$$
$$i = 1, 2, \ldots, n-1. \qquad (6.1.22a)$$

Разностный аналог граничного условия (6.1.16a) получим, введя виртуальную точку r_{-1}. В случае $r = 0$, однако, в уравнении (6.1.21) имеется неопределенное выражение $(a/r)y'$ типа 0/0. При $r \to 0$ находим

$$y'' + (a/r)\, y' \to (a+1)\, y''.$$

Далее, используя разностную замену для уравнения (6.1.21) при $r = 0$, с учетом требования $y_{-1} = y_1$ (которое вытекает из условия (6.1.16a)) получаем окончательно

$$\frac{a+1}{h^2}(2y_1 - 2y_0) - \Phi^2 y_0 \exp \frac{\gamma\beta(1-y_0)}{1+\beta(1-y_0)} = 0. \qquad (6.1.22b)$$

Наконец, граничное условие (6.1.16c) при $\mathrm{Sh} \to \infty$ аппроксимируется с помощью соотношения

$$y_n - 1 = 0. \qquad (6.1.22c)$$

Читатель может легко построить матрицу Якоби $\mathbf{G} = [g_{ij}]$, $i, j = 0, 1, \ldots, n$, для решения системы методом Ньютона. Эта матрица будет трехдиагональной, а ее элементы (производные левой части соотношения (6.1.22a)) имеют вид

$$g_{i,\,i-1} = \frac{1}{h^2} - \frac{a}{2ih^2}, \quad i = 1, 2, \ldots, n-1,$$

$$g_{i,\,i+1} = \frac{1}{h^2} + \frac{a}{2ih^2}, \quad i = 1, 2, \ldots, n-1,$$

$$g_{i,\,i} = -\frac{2}{h^2} - \Phi^2 \left[1 + \frac{\gamma\beta y_i}{(1+\beta(1-y_i))^2}\right] \exp \frac{\gamma\beta(1-y_i)}{1+\beta(1-y_i)},$$
$$i = 1, 2, \ldots, n-1.$$

Соответствующие выражения для g_{00}, g_{01}, g_{nn} нетрудно получить дифференцированием уравнений (6.1.22b, c). Ход итерационного процесса в случае применения метода Ньютона представлен в табл. 6.1. Точное значение $y(0)$ в этой задаче равно 0,5521, так что погрешность аппроксимации при $h=0{,}1$ сказывается лишь в четвертом знаке. Заметим, что приведенный выше пример оказывается настолько простым, что его вполне можно анализировать с помощью небольшой персональной ЭВМ.

В качестве более сложного примера рассмотрим решение *задачи* 17. Соответствующие разностные аналоги уравнений (P17-16)—(P17-20) имеют вид

$$H_0=0,\quad F_0=0,\quad G_0=1, \tag{6.1.23a}$$

$$H_i-H_{i-1}+h\sqrt{\mathrm{Re}}\,(F_i+F_{i-1})=0,$$

$$F_{i-1}-2F_i+F_{i+1}-\frac{1}{2}h\sqrt{\mathrm{Re}}\,H_i\,(F_{i+1}-F_{i-1})-h^2\mathrm{Re}\,(F_i^2-G_i^2+k)=0,$$

$$G_{i-1}-2G_i+G_{i+1}-2h^2\,\mathrm{Re}\,F_iG_i-\frac{1}{2}h\sqrt{\mathrm{Re}}\,(G_{i+1}-G_{i-1})\,H_i=0,$$

$$i=1,\ 2,\ \ldots,\ n-1, \tag{6.1.23b}$$

$$H_n-H_{n-1}+h\sqrt{\mathrm{Re}}\,(F_n+F_{n-1})=0, \tag{6.1.23c}$$

$$H_n=0,\quad F_n=0,\quad G_n=S. \tag{6.1.23d}$$

Таблица 6.1. Ход итерационного процесса при решении *задачи* 16 методом Ньютона. Решение методом конечных разностей ($a=0$, $\gamma=20$, $\beta=0{,}05$, $\Phi=1$, $\mathrm{Sh}\to\infty$, $h=0{,}1$).

Номер итерации	r										
	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	1,0
0	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000
1	0,5000	0,5050	0,5200	0,5450	0,5800	0,6250	0,6800	0,7450	0,8200	0,9050	1,0000
2	0,5514	0,5557	0,5686	0,5902	0,6206	0,6601	0,7088	0,7669	0,8347	0,9124	1,0000
3	0,5522	0,5565	0,5693	0,5909	0,6212	0,6606	0,7092	0,7673	0,8350	0,9125	1,0000
4	0,5522	0,5565	0,5693	0,5909	0,6212	0,6606	0,7092	0,7673	0,8350	0,9125	1,0000

Допустим, что значения параметров Re и S заданы. Упорядочим неизвестные следующим образом: H_0, F_0, G_0, H_1, F_1, G_1, ..., H_{n-1}, F_{n-1}, G_{n-1}, H_n, F_n, G_n, k. Мы получим тогда семидиагональную матрицу размещения с полностью заполненным последним столбцом (что соответствует появлению неизвестной k во всех уравнениях (6.1.23b)). В этом случае общее число уравнений оказывается равным $3(n-1)+7$. При интересных для этой задачи числах Рейнольдса ($\mathrm{Re} \sim 500 \div 1000$) нужно довольно много узлов. Например, для $\mathrm{Re}=625$ необходимо $n=100 \div 200$ [6.11]. Подобную задачу следует решать уже на достаточно мощных ЭВМ, даже если использовать специальную программу для решения систем линейных алгебраических уравнений с почти семидиагональной матрицей. Кроме того, в данной задаче при достаточно больших значениях параметра Re ($\mathrm{Re} > 700$) появляются «паразитные» решения. Так, при $n=100$ и $n=200$ существуют решения, которые в случае более мелкого разбиения, например при $n=800$, исчезают (см. [6.11]). Учитывая это обстоятельство, при использовании разностных методов представляется необходимым результаты, полученные при достаточно грубом разбиении, пересчитывать на более мелкой сетке узловых точек. При этом только хорошее совпадение результатов для нескольких последовательных дроблений может служить критерием правильности решения.

6.1.2. Метод стрельбы

Основная идея метода стрельбы заключается в сведении краевой задачи к задаче Коши, для решения которой можно использовать стандартные программные средства, имеющиеся практически на каждой ЭВМ (см. § 5.7). Ниже мы рассмотрим простейшие варианты метода стрельбы, вполне достаточные для понимания его концептуальной стороны. Более подробное изложение этого метода читатель может найти в учебной литературе [6.7, 6.8].

Опишем подробнее метод стрельбы на примере задачи (6.1.1), (6.1.2) с граничными условиями (6.1.4). Для того чтобы данную задачу четвертого порядка можно было решать как задачу Коши, мы должны задать в некоторой точке четыре начальных условия. Воспользуемся тем, что в точке $z=0$ уже имеются два заданных условия, а именно условия (6.1.4a), и выберем два дополнительных условия вида

$$x(0)=\eta_1, \quad y(0)=\eta_2. \tag{6.1.24}$$

Полученную задачу Коши на промежутке от $z=0$ до $z=1$ можно решать с помощью какого-либо из методов, рассмотрен-

ных в § 5.7. (Эти методы предназначались для решения систем дифференциальных уравнений первого порядка. Уравнения (6.1.1), (6.1.2) легко преобразуются в систему четырех уравнений первого порядка: $x' = u$, $u' = -L^2 f(x, y)/D_x$, $y' = v$, $v' = -L^2 g(x, y)/D_y$. Начальные условия (6.1.4a) и (6.1.24) преобразуются к виду $u(0) = v(0) = 0$, $x(0) = \eta_1$, $y(0) = \eta_2$. Мы будем, далее придерживаться исходных обозначений).

По окончании интегрирования, т. е. в точке $z = 1$, мы получаем значения решения, зависящие от выбора условий (6.1.24): $x(1, \eta)$, $x'(1, \eta)$, $y(1, \eta)$, $y'(1, \eta)$. Для того чтобы найденное решение задачи Коши было одновременно и решением исходной краевой задачи, нам необходимо удовлетворить условиям (6.1.4b), т. е.

$$F_1(\eta) = x'(1, \eta) = 0, \quad F_2(\eta) = y'(1, \eta) = 0. \tag{6.1.25}$$

Соотношения (6.1.25) представляют собой два нелинейных уравнения относительно неизвестных η_1 и η_2, которое можно решить, используя любой из методов решения нелинейных уравнений, например, метод Ньютона (см. § 5.1). Для вычисления элементов матрицы Якоби, т. е. производных $\partial F_i/\partial \eta_j$, можно воспользоваться соответствующими разностными заменами, вычислив функции F_1 и F_2 в точках (η_1, η_2), $(\eta_1 + \Delta\eta, \eta_2)$, $(\eta_1, \eta_2 + \Delta\eta)$. Каждое такое вычисление требует решения задачи Коши (6.1.1), (6.1.2), (6.1.4a), (6.1.24) при соответствующем задании начальных условий. Погрешности, возникающие в процессе интегрирования, могут при этом перекрываться погрешностями аппроксимации использованных разностных формул, и элементы матрицы Якоби могут вычисляться весьма неточно. Поэтому часто, когда это возможно, используются вариационные дифференциальные уравнения (уравнения в вариациях) относительно переменных

$$p_{xi} = \partial x/\partial \eta_i, \quad p_{yi} = \partial y/\partial \eta_i, \quad i = 1, 2. \tag{6.1.26}$$

Вариационные уравнения получаются посредством дифференцирования исходных уравнений[1] (6.1.1), (6.1.2) по η_1 и η_2 и перестановки дифференцирования по z и η_i:

$$\begin{aligned} p''_{xi} + \frac{L^2}{D_x}\left(\frac{\partial f}{\partial x} p_{xi} + \frac{\partial f}{\partial y} p_{yi}\right) = 0, \quad i = 1, 2, \\ p''_{yi} + \frac{L^2}{D_y}\left(\frac{\partial g}{\partial x} p_{xi} + \frac{\partial g}{\partial y} p_{yi}\right) = 0, \quad i = 1, 2. \end{aligned} \tag{6.1.27}$$

[1] Более точно: дифференцированием тождеств, возникающих при подстановке решения $x(z, \eta)$, $y(z, \eta)$ в уравнения (6.1.1), (6.1.2). — *Прим. ред.*

Начальные условия для варьируемых переменных получаются в результате дифференцирования исходных начальных условий (6.1.4a), (6.1.24) по η_1 и η_2

$$p_{x1}(0)=1, \quad p_{x2}(0)=0, \quad p_{y1}(0)=0, \quad p_{y2}(0)=1, \\ p'_{xi}(0)=p'_{yi}(0)=0, \quad i=1,\ 2. \tag{6.1.28}$$

Если проинтегрировать дифференциальное уравнение (6.1.27) вместе с уравнениями (6.1.1) и (6.1.2) и начальными условиями (6.1.4a), (6.1.24), (6.1.28), что в точке $z=1$ мы получим

$$\frac{\partial F_1}{\partial \eta_1}=p'_{x1}(1), \quad \frac{\partial F_1}{\partial \eta_2}=p'_{x2}(1), \\ \frac{\partial F_2}{\partial \eta_1}=p'_{y1}(1), \quad \frac{\partial F_2}{\partial \eta_2}=p'_{y2}(1). \tag{6.1.29}$$

Тем самым, мы имеем матрицу Якоби для применения метода Ньютона, вычисленную на основе интегрирования вариационных уравнений. Заметим, что в данном случае для одной итерации метода Ньютона нам приходится интегрировать систему 12 дифференциальных уравнений первого порядка. При аппроксимации элементов матрицы Якоби соответствующими разностными формулами нужно трижды интегрировать систему 4-х дифференциальных уравнений первого порядка. При этом объем вычислений для большой группы различных функций f и g оказывается приблизительно одинаковым. Иногда, правда, удается существенно сократить затраты машинного времени при переходе к вариационным уравнениям, например, при появлении функций exp, sin, cos, дифференцирование которых дает те же функции.

В случае ГУ1 дополнительные начальные условия к (6.1.3a) выбираются следующим образом:

$$x'(0)=\eta_1, \quad y'(0)=\eta_2. \tag{6.1.30}$$

При этом условия, которым нужно удовлетворить после интегрирования от $z=0$ до $z=1$, имеют вид (см. (6.1.3b)

$$F_1(\eta)=x(1)-\bar{x}=0, \quad F_2(\eta)=y(1)-\bar{y}=0. \tag{6.1.31}$$

Вариационные уравнения (6.1.27) остаются теми же самыми, а начальные условия для варьируемых переменных заменяются на условия

$$p_{xi}(0)=p_{yi}(0)=0, \quad i=1,\ 2, \\ p'_{x1}(0)=1, \quad p'_{x2}(0)=0, \quad p'_{y1}(0)=0, \quad p'_{y2}(0)=1. \tag{6.1.32}$$

Для ГУ3 в форме (6.1.5) с ненулевыми коэффициентами (с тем чтобы в точке $z=0$ эти условия не совпали в ГУ1 или ГУ2)

дополнительные начальные условия в этой точке можно выбрать в виде (6.1.24) или (6.1.30). В случае выбора условий (6.1.24) из (6.1.5a) следует

$$x'(0)=(\gamma_{x0}-\beta_{x0}\eta_1)/\alpha_{x0},\quad y'(0)=(\gamma_{y0}-\beta_{y0}\eta_2)/\alpha_{y0}. \qquad (6.1.33)$$

При этом вариационные дифференциальные уравнения остаются теми же, а начальные условия заменяются следующими:

$$\begin{gathered} p_{x1}(0)=1,\quad p_{x2}(0)=0,\quad p_{y1}(0)=0,\quad p_{y2}(0)=1,\\ p'_{x1}(0)=-\beta_{x0})/\alpha_{x0},\quad p'_{x2}(0)=0,\quad p'_{y1}(0)=0,\quad p'_{y2}(0)=-\beta_{y0})/\alpha_{y0}. \end{gathered} \qquad (6.1.34)$$

Конкретный вид функций F_i и производных $\partial F_i/\partial\eta_j$ читатель может легко получить с помощью формул (6.1.5b).

Конечно, мы могли выбирать недостающие начальные условия в точке $z=1$ взамен точки $z=0$ и находить решения соответствующих задач Коши на промежутке от $z=1$ до $z=0$. В некоторых задачах выбор направления интегрирования может играть существенную роль, поскольку иногда численное интегрирование в одном из направлений оказывается труднореализуемым (соответствующая задача Коши неустойчива по отношению к начальным условиям). Это имеет место, например, в *задачах* 14 и 15 при больших значениях критерия Пекле, а также в *задаче* 16. Если задача Коши неустойчива в обоих направлениях, метод стрельбы применять нельзя и следует использовать, например, разностные методы решения, описанные в подпункте 6.1.1.

Рассмотрим теперь примеры расчетов методом стрельбы, иллюстрирующие процесс построения стационарных решений некоторых задач из гл. 4. В качестве первой из этих задач исследуем *задачу* 11, т. е. систему типа «реакция—диффузия» (6.1.1), (6.1.2), функции f и g для которой имеют вид (P11-1). В табл. 6.2 приведены некоторые результаты для ГУ2 при выборе начальных условий типа (6.1.24). Отметим, что второе из представленных в таблице решений однородно по пространству. Первое и третье решения зависят от z и получаются друг из друга симметрией: $x^{\mathrm{I}}(z)=x^{\mathrm{III}}(1-z)$, $y^{\mathrm{I}}(z)=y^{\mathrm{III}}(1-z)$. В табл. 6.3 представлены соответствующие результаты для ГУ1, при выборе начальных условий типа (6.1.30). Здесь третье решение пространственно однородно: $x(z)\equiv 2$; $y(z)\equiv 2,3$. В обеих этих ситуациях применялся метод Ньютона, причем матрица Якоби подсчитывалась с помощью соответствующих уравнений в вариациях.

Таблица 6.2. Метод стрельбы для *задачи* 11 в случае ГУ2 ($A = 2$, $B = 4{,}6$, $D_x = 0{,}0016$, $D_y = 0{,}008$, $L = 0{,}12$).

Номер итерации	$\eta_1 = x(0)$	$\eta_2 = y(0)$	$x(1)$	$y(1)$	$x'(1)$	$y'(1)$
0	3,5000	1,7000	−0,2564	2,6782	−5,1186	0,2580
1	3,9027	1,4394	−0,0558	2,9157	−4,3643	0,8921
2	3,7014	1,5278	0,5184	2,7347	−1,1253	0,2277
3	3,6059	1,5694	0,7393	2,6663	−0,1471	0,0307
4	3,5890	1,5769	0,7745	2,6550	−0,0036	0,0008
5	3,5886	1,5771	0,7754	2,6547	−0,0000	0,0000
0	2,1000	2,1000	1,8789	2,3682	−1,8666	0,8124
1	1,9275	2,3183	1,9988	2,2996	−0,3599	0,1033
2	1,9998	2,3008	2,0002	2,2998	0,0076	−0,0034
3	2,0000	2,3000	2,0000	2,3000	−0,0000	0,0000
0	1,0000	2,0000	6,9064	1,1497	−5,5541	3,9497
1	0,7167	2,3767	5,7052	0,9801	6,4628	−0,4866
2	0,7018	2,5763	4,4305	1,2720	3,2316	−0,5172
3	0,7449	2,6483	3,8006	1,4920	0,8956	−0,1854
4	0,7713	2 6554	3,6110	1,5677	0,1068	−0,0254
5	0,7753	2,6548	3,5889	1,5769	0,0170	−0,0004
6	0,7754	2,6548	3,5886	1,5771	0,0000	−0,0000

Таблица 6.3. Метод стрельбы для *задачи* 11 в случае ГУ1 ($A = 2$; $B = 4{,}6$; $D_x = 0{,}0016$; $D_y = 0{,}008$; $L = 0{,}12$; $x(0) = \bar{x} = 2$; $y(0) = \bar{y} = 2{,}3$).

Номер итерации	$\eta_1 = x'(0)$	$\eta_2 = y'(0)$	$x(1)$	$y(1)$	$x'(1)$	$y'(1)$
0	−4,0000	1,0000	2,4731	1,7722	6,1923	−2,1973
1	−3,5963	1,3204	1,9791	2,2939	3,6558	−1,3613
2	−3,5553	1,3126	1,9984	2,3002	3,5570	−1,3137
3	−3,5534	1,3118	2,0000	2,3000	3,5534	−1,3118
4	−3,5534	1,3118	2,0000	2,3000	3,5534	−1,3118
0	13,5000	−4,5000	1,0740	2,3345	−5,7930	2,0101
1	13,9334	−4,8847	2,3480	2,3821	−2,1301	7,0122
2	13,3987	−4,7051	2,1336	2,2969	−14,8827	5,1427
3	13,4019	−4,6870	2,0092	2,2992	−13,4846	4,7116
4	13,4062	−4,6868	2,0000	2,3000	−13,4063	4,6869
5	13,4062	−4,6868	2,0000	2,3000	−13,4063	4,6868
0	0,1000	0,1000	1,7988	2,4321	0,0376	−0,0237
1	−0,0440	0,0138	2,0072	2,2988	0,0001	−0,0002
2	0,0001	−0,0001	2,0000	2,3000	−0,0000	0,0000

Используем теперь метод стрельбы для нахождения стационарных решений задачи 14, т. е. для решения уравнений

$$\frac{1}{\mathrm{Pe_M}} y'' - y' + \mathrm{Da}\,(1-y)\exp\frac{\Theta}{1+\Theta/\gamma} = 0, \qquad (6.1.35a)$$

$$\frac{1}{\mathrm{Pe_H}} \Theta'' - \Theta' + B\,\mathrm{Da}\,(1-y)\exp\frac{\Theta}{1+\Theta/\gamma} - \beta(\Theta - \Theta_c) = 0, \qquad (6.1.35b)$$

соответствующих уравнениям (P14-7), (P14-8). Граничные условия при этом имеют вид (P14-9), (P14-10), т. е.

$$\mathrm{Pe_M} y(0) - y'(0) = 0, \quad \mathrm{Pe_H}\Theta(0) - \Theta'(0) = 0, \qquad (6.1.36a)$$

$$y'(1) = 0, \quad \Theta'(1) = 0. \qquad (6.1.36b)$$

Выберем два недостающих начальных условия в точке $z = 1$:

$$y(1) = \eta_1, \quad \Theta(1) = \eta_2. \qquad (6.1.37)$$

Тогда после интегрирования уравнений (6.1.35) с начальными условиями (6.1.36b) и (6.1.37) на промежутке от $z = 1$ до $z = 0$ мы имеем

$$F_1(\eta) = \mathrm{Pe_M} y(0) - y'(0) = 0, \quad F_2(\eta) = \mathrm{Pe_H}\Theta(0) - \Theta'(0) = 0. \qquad (6.1.38)$$

Результаты решения уравнений (6.1.38) методом Ньютона с использованием соответствующих вариационных уравнений приведены в табл. 6.4. В ней представлен случай, когда существует пять решений данной задачи. Отметим, что область сходимости метода Ньютона для некоторых решений мала. В частности, так обстоит дело для пятого решения. Сходимость к этому решению даже из близкого к нему начального приближения может быть медленной (см. вторую половину таблицы). Наконец, в табл. 6.5 приведены окончательные решения задачи для нескольких различных значений числа Дамкёлера.

Замечание. Во многих задачах концы интервала равноправны и можно использовать метод стрельбы в любом направлении — как «справа налево», так и «слева направо». В этой задаче есть выделенное направление: решение задачи Коши от $z = 0$ к $z = 1$ при больших числах Пекле сильно неустойчиво, и такая реализация метода стрельбы здесь не годится.

В качестве последнего примера использования метода стрельбы рассмотрим *задачу* 15, в которой наряду с дифференциальными уравнениями появляются и иные соотношения (нелинейные алгебраические уравнения).

Будем искать решение $y(z)$, $\Theta(z)$ дифференциальных уравнений (P15-6) и (P15-7) с граничными условиями вида (6.1.36).

Таблица 6.4. Метод стрельбы для *задачи* 14, $Pe_H = 5$, $Pe_M = 10$, $\gamma = 20$, $B = 15$, $\beta = 2$, $\Theta_c = 0$, $Da = 0{,}07$.

η_1	η_2	$y(0)$	$y'(0)$	$\Theta(0)$	$\Theta'(0)$
0,10323	0,64076	0,00863	0,08630	0,15613	0,78066
0,77944	6,68368	0,01036	0,10359	0,23509	1,17548
0,92527	6,98339	0,01299	0,12988	0,33374	1,66870
0,97005	4,56616	0,06795	0,67949	1,56244	7,81220
0,99737	3,22178	0,50748	5,07476	7,11260	35,5633

Сходимость метода Ньютона

Номер итерации	η_1	η_2	$\sqrt{F_1^2+F_2^2}$
0	0,99900	3,10000	27,1
1	0,99815	3,17240	7,6
2	0,99759	3,20899	1,5
3	0,99739	3,22070	0,12
4	0,99737	3,22177	0,00073
5	0,99737	3,22178	

Таблица 6.5. Метод стрельбы для *задачи* 14 ($Pe_H = 5$, $Pe_M = 10$, $\gamma = 20$, $B = 15$, $\beta = 2$, $\Theta_c = 0$).

Решения для последовательных значений Da

Da	η_1	η_2
0,05	0,06382	0,38987
0,063	0,08787 0,97818 0,99412	0,54198 3,81826 3,30132
0,08	0,12961 0,65975 0,99890	0,81376 0,56212 3,17394
0,1	0,22126 0,45900 0,99973	1,45190 3,47824 3,13205
0,12	0,99992	3,11272

При этом в уравнения входят также неизвестные функции $\omega(z)$ и $\theta(z)$, которые должны удовлетворять соотношениям (P15-8) и (P15-9). Для практических вычислений вместо этих нелинейных (алгебраических) соотношений более удобно использовать формулы (P15-10) и (P15-11). При фиксированных значениях параметров $J_{\text{м}}$, $J_{\text{н}}$, Da, B, γ и заданных значениях функций $y(z)$ и $\Theta(z)$ уравнение (P15-11) представляет собой при каждом z нелинейное уравнение относительно неизвестной $\omega(z)$. Решая уравнение (P15-11), мы находим значения $\omega(z)$, после чего подставляя их в формулу (P15-10), вычисляем значения функции $\theta(z)$.

Используем для решения этой задачи метод стрельбы. Два недостающих начальных условия опять выберем в точке $z=1$ в форме (6.1.37). Затем проинтегрируем уравнения (P15-6), (P15-7) с начальными условиями (6.1.36b) и (6.1.37) на промежутке от $z=1$ до $z=0$. На каждом шаге интегрирования нам необходимо вычислять правые части дифференциальных уравнений, в которые наряду с параметрами и значениями функций y и Θ, входят также значения функций ω и θ. Эти значения определяются из формул (P15-11) и (P15-10). После проведенного таким образом интегрирования, когда на каждом шаге решается одно нелинейное уравнение, мы получаем в точке $z=0$ систему двух уравнений (6.1.38) относительно двух неизвестных η_1 и η_2. Эта система может быть решена методом Ньютона с использованием вариационных уравнений для переменных

$$p_{yi}=\partial y/\partial\eta_i, \quad p_{\Theta i}=\partial\Theta/\partial\eta_i, \quad i=1,\ 2. \tag{6.1.39}$$

Первое из этих уравнений имеет вид

$$p''_{y1}-\mathrm{Pe}_{\text{м}}p'_{y1}+\mathrm{Pe}_{\text{м}}J_{\text{м}}\left(\frac{\partial\omega}{\partial y}p_{y1}+\frac{\partial\omega}{\partial\Theta}p_{\Theta 1}-p_{y1}\right)=0. \tag{6.1.40}$$

Из этого примера видно, что наряду с вариационными переменными, определяемыми формулами (6.1.39), у нас возникают еще и другие переменные

$$\frac{\partial\omega}{\partial y},\ \frac{\partial\omega}{\partial\Theta},\ \frac{\partial\theta}{\partial y},\ \frac{\partial\theta}{\partial\Theta}. \tag{6.1.41}$$

Значения этих переменных на каждом шаге интегрирования вычисляются из соотношений (P15-8), (P15-9), определяющих $\omega=\omega(y,\Theta)$ и $\theta=\theta(y,\Theta)$. Запишем их в виде

$$G_i(y,\ \Theta,\ \omega,\ \theta)=0, \quad i=1,\ 2. \tag{6.1.42}$$

Предположим, что функции G_i удовлетворяют условиям теоремы о неявных функциях, и пусть значения $\omega(y,\Theta)$ и $\theta(y,\Theta)$

для заданных y и Θ найдены. Тогда производные (6.1.41) можно найти, решая две системы линейных алгебраических уравнений

$$\Gamma \cdot \begin{bmatrix} \dfrac{\partial \omega}{\partial y} \\ \dfrac{\partial \theta}{\partial y} \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \dfrac{\partial G_1}{\partial y} \\ \dfrac{\partial G_2}{\partial y} \end{bmatrix}, \tag{6.1.43a}$$

$$\Gamma \cdot \begin{bmatrix} \dfrac{\partial \omega}{\partial \Theta} \\ \dfrac{\partial \theta}{\partial \Theta} \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \dfrac{\partial G_1}{\partial \Theta} \\ \dfrac{\partial G_2}{\partial \Theta} \end{bmatrix}, \tag{6.1.43b}$$

где $\partial G_1/\partial y = -J_{\text{м}}$, $\partial G_2/\partial y = 0$, $\partial G_1/\partial \Theta = 0$, $\partial G_2/\partial \Theta = -J_{\text{н}}$, а матрица Γ определяется как

$$\Gamma = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial G_1}{\partial \omega} & \dfrac{\partial G_1}{\partial \theta} \\ \dfrac{\partial G_2}{\partial \omega} & \dfrac{\partial G_2}{\partial \theta} \end{bmatrix}. \tag{6.1.44}$$

Описанный подход несложно реализовать в случае, когда нелинейное уравнение (Р15-11) имеет одно и только одно решение ω, которое должно удовлетворять естественному с физической точки зрения требованию $y < \omega < 1$ (см. формулу (Р15-5)).

Значительные сложности возникают тогда, когда уравнение (Р15-11) при определенной комбинации параметров и переменных y и Θ будет иметь несколько допустимых решений (как правило, три различных решения ω). Такая ситуация имеет место, в частности, при больших значениях параметра B. В этом случае метод Ньютона, используемый для решения уравнения (Р15-11), может оказаться расходящимся или же будет сходиться к какому-либо другому решению, а не к тому, которое ожидалось. В зависимости от того, какой из корней уравнения (Р15-11) выбрать, получаются различные функции $y(z)$ и $\Theta(z)$.

Из физических соображений[1] (в случае трех решений) интерес представляют прежде всего два крайних решения ω уравнения (Р15-11), а именно значение ω, лежащее в окрестности значения y, $\omega > y$ (так называемое нижнее решение), и корень, располагающийся в окрестности 1, $\omega < 1$ (так называемое верхнее решение). При решении дифференциальных уравнений (Р15-6), (Р15-7) мы поступаем следующим образом: в областях параметров, где существует несколько решений уравнения (Р15-11), мы всегда рассматриваем (если это возможно) только нижнее решение ω (или соответственно верхнее решение ω) и

[1] Обычно связанных с устойчивостью найденных распределений концентраций и температуры. — *Прим. ред.*

тем самым получаем два различных (основных) решения дифференциальных уравнений. Если же комбинировать на разных подынтервалах $z \in [0, 1]$ верхнее и нижнее решения ω, то мы получим разрывные профили $\omega(z)$, $\theta(z)$.

На рис. 6.1a приведены профили $\Theta(z)$, $y(z)$, $\omega(z)$, $\theta(z)$, найденные для случая, когда при всех z выбиралось нижнее решение ω уравнения (P15-11). На рис. 6.1b представлен пример профилей решений (для тех же значений параметров), когда

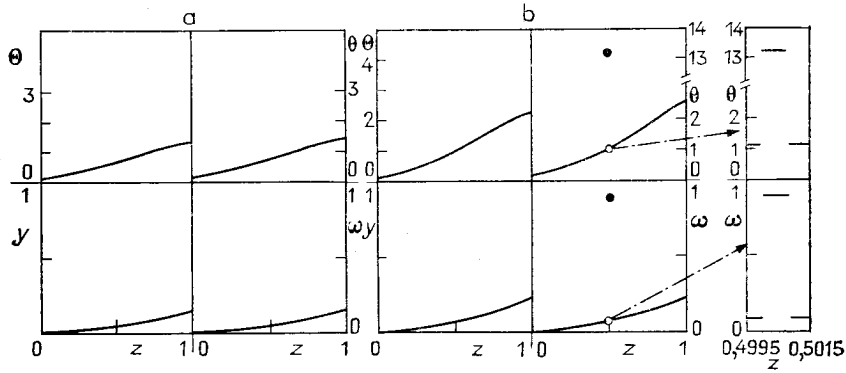


Рис. 6.1. Аксиальные профили конверсии и температуры, *задача* 15; $\mathrm{Da} = 0{,}065$, $Pe_M = 20$, $Pe_H = 10$, $\beta = 1$, $B = 15$, $\gamma = 20$, $\Theta_c = 0$, $J_M = J_H = 25$; *a*) непрерывные профили ω и θ, *b*) разрывные профили ω и θ.

$\omega(z)$ и $\theta(z)$ не являются непрерывными функциями (на промежутке $z \in [0{,}4995;\ 0{,}5015]$ мы рассматривали верхнее решение ω). Из сравнения рисунков видно, что профили решений $y(z)$ и $\Theta(z)$ изменились.

6.1.3. Метод многократной стрельбы

Метод стрельбы, описанный в предыдущем пункте, иногда не позволяет получить удовлетворительные результаты. Так, решение соответствующих задач Коши (включая дифференциальные уравнения в вариациях) может оказаться практически невозможным при наличии сильной чувствительности к начальным условиям. В таких случаях часто оказывается удобным использовать метод многократной стрельбы (см., например, [6.34]).

Опишем кратко идею этого метода на примере задачи (6.1.1), (6.1.2) с граничными условиями ГУ2 вида (6.1.4). По аналогии с п. 6.1.1 выберем на промежутке $z \in [0, 1]$ сетку узловых точек $z_0 = 0$, $z_1, \ldots, z_n = 1$, $z_{i+1} > z_i$, которая, вообще говоря,

может не быть эквидистантной. В практических задачах эта сетка узловых точек выбирается гораздо менее плотной, чем при использовании метода конечных разностей.

На каждом подынтервале $[z_i, z_{i+1}]$, $i=0, \ldots, n-1$ уравнения (6.1.1), (6.1.2) интегрируются независимо. Для этого нам необходимо задать начальные условия в точках z_i, $i=0, \ldots, n-1$; эти начальные значения мы обозначим как η_i. В точке $z_0=0$ уже заданы два условия (6.1.4a), и поэтому здесь, аналогично тому, как это делалось в п. 6.1.2, мы выбираем два дополнительных условия вида (6.1.24). При этом вектор η_0 будет иметь только две составляющих $\eta_{01}=x(0)$ и $\eta_{02}=y(0)$. Остальные векторы η_i, $i=1, \ldots, n-1$ будут иметь по четыре составляющих

$$\eta_i=(x(z_i),\ x'(z_i),\ y(z_i),\ y'(z_i)). \tag{6.1.45}$$

Обозначим решение соответствующей задачи Коши на каждом подынтервале $[z_i, z_{i+1}]$ через $x(z)=x(z; z_i, \eta_i)$ (и аналогично для $x'(z)$, $y(z)$, $y'(z)$). Метод многократной стрельбы состоит в следующем: так подобрать векторы η_i, $i=0, \ldots, n-1$, чтобы функции $x(z)$, $x'(z)$, $y(z)$, $y'(z)$, полученные «частями» на отдельных подынтервалах $[z_i, z_{i+1}]$, оказались непрерывными и чтобы при этом были удовлетворены граничные условия (6.1.4b).

Для этого в точках z_i, $i=1, \ldots, n-1$, должны выполняться условия

$$\begin{gathered}(x(z_i;\ z_{i-1},\ \eta_{i-1}),\ x'(z_i;\ z_{i-1},\ \eta_{i-1}),\ y(z_i;\ z_{i-1},\ \eta_{i-1}),\\ y'(z_i;\ z_{i-1},\ \eta_{i-1}))=\eta_i,\end{gathered} \tag{6.1.46}$$

а в точке $z_n=1$ (в соответствии с условиями (6.1.4b)) должны быть выполнены соотношения

$$x'(1;\ z_{n-1},\ \eta_{n-1})=0, \qquad y'(1;\ z_{n-1},\ \eta_{n-1})=0. \tag{6.1.47}$$

Уравнения (6.1.46) и (6.1.47) представляют собой систему из $4(n-1)+2$ нелинейных уравнений относительно $4(n-1)+2$ неизвестных — составляющих векторов $\eta_0, \eta_1, \ldots, \eta_{n-1}$. Эти уравнения можно решать с помощью любого подходящего метода (например, с помощью метода Ньютона). Для вычисления матрицы Якоби можно опять использовать вариационные дифференциальные уравнения (см. п. 6.1.2). Указанный алгоритм легко модифицируется на случай ГУ1 и ГУ3; при этом в случае ГУ3 мы выбираем две неизвестных, например $x(0)$, $y(0)$, а затем из уравнений (6.1.5a) находим остальные неизвестные, т. е. $x'(0)$, $y'(0)$. Далее, с помощью условий (6.1.5b) мы легко получаем соотношения, аналогичные (6.1.47).

6.2. ЗАВИСИМОСТЬ СТАЦИОНАРНЫХ РЕШЕНИЙ ОТ ПАРАМЕТРА

Так же как и для «сосредоточенных» систем (описываемых обыкновенными дифференциальными уравнениями, см. § 5.2),

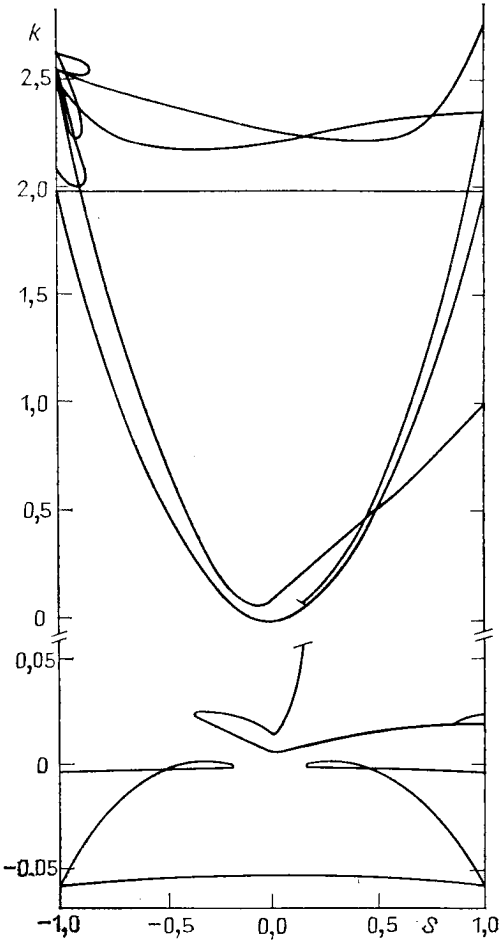


Рис. 6.2. Диаграмма стационарных решений *задачи* 17, Re = 625.

существует целый ряд методов и подходов, позволяющих находить зависимость стационарных решений от параметров в случае «распределенных» систем, описываемых уравнениями

с частными производными. Набор методов оказывается здесь даже более широким, поскольку здесь есть еще и проблема аппроксимации задачи в бесконечномерном пространстве посредством задачи в пространстве конечной размерности.

Наиболее простым подходом является, конечно, последовательное использование какого-либо метода предыдущего параграфа для каждого значения параметра. Слова «наиболее простым» означают, что при этом мы не должны строить специальный алгоритм продолжения по параметру. Недостатком подобного подхода является, однако, необходимость осуществлять переходы через точки бифуркации с помощью вмешательства человека. В результате время, которое необходимо затратить в этом случае на диалог «человек — машина», существенно возрастает. Иногда, тем не менее, предпочтение отдается именно этому подходу, особенно в случаях, когда нам нужно построить лишь небольшую совокупность решений (задан небольшой диапазон значений параметра) или же в случаях, когда частое появление бифуркационных значений параметра не ожидается.

Результаты последовательного использования метода Ньютона для системы разностных уравнений (6.1.23), которая возникает в *задаче* 17, представлены на диаграмме стационарных решений, показанной на рис. 6.2. В данном случае уже само решение системы (6.1.23) для больших n являлось достаточно серьезной проблемой.

В последующих пунктах мы рассмотрим методы продолжения по параметру стационарных решений для распределенных систем. Там, где это окажется более целесообразным, описание соответствующей методики будет проводиться на примерах конкретных задач из гл. 4.

Отметим, что методы, изложенные в п. 6.2.1 и 6.2.2, могут использоваться в качестве предиктора в схеме типа «предиктор—корректор», описанной в п. 6.2.3, аналогично тому, как это делалось в § 5.2.

6.2.1. Метод дифференцирования по параметру

Рассматриваемая здесь методика аналогична описанной в п. 5.2.2 для конечномерных задач. Продемонстрируем здесь одну из возможных численных реализаций этого метода на примере продолжения по параметру α решения краевой задачи для (одного) дифференциального уравнения второго порядка ($' = d/dz$)

$$y'' - f(z, y, y', \alpha) = 0 \qquad (6.2.1)$$

с граничными условиями

$$a_0 y(0) + b_0 y'(0) = c_0, \tag{6.2.2a}$$

$$a_1 y(1) + b_1 y'(1) = c_1. \tag{6.2.2b}$$

Подставив в уравнение (6.2.1) $y = y(z, \alpha)$ и дифференцируя по α, мы получаем уравнение

$$\frac{\partial^3 y}{\partial z^2 \partial \alpha} - \frac{\partial f}{\partial y}\frac{\partial y}{\partial \alpha} - \frac{\partial f}{\partial y'}\frac{\partial^2 y}{\partial z \partial \alpha} - \frac{\partial f}{\partial \alpha} = 0 \tag{6.2.3}$$

с граничными условиями вида

$$\begin{aligned} a_0 y(0, \alpha) + b_0 \frac{\partial y(0, \alpha)}{\partial z} &= c_0, \\ a_1 y(1, \alpha) + b_1 \frac{\partial y(1, \alpha)}{\partial z} &= c_1. \end{aligned} \tag{6.2.4}$$

Предположим, что известно решение краевой задачи (6.2.1)—(6.2.2) при $\alpha = \alpha_0$

$$y(z, \alpha_0) = \varphi(z). \tag{6.2.5}$$

Дифференциальное уравнение в частных производных третьего порядка (6.2.3) можно решать разностными методами, аналогично простейшим уравнениям параболического типа (см. § 6.4). Выберем прямоугольную сетку узловых точек (z_i, α_j), $z_i = ih$, $i = 0, 1, \ldots, n$; $\alpha_j = \alpha_0 + jk$, $j = 0, 1, \ldots$, и обозначим $y_i^j \sim y(z_i, \alpha_j)$. Простейшая разностная аппроксимация уравнения (6.2.3) с использованием шеститочечной схемы имеет вид

$$\begin{gathered} \frac{1}{kh^2}\left(y_{i-1}^{j+1} - 2y_i^{j+1} + y_{i+1}^{j+1} - y_{i-1}^j + 2y_i^j - y_{i+1}^j\right) - \bar{f}_y \frac{1}{k}\left(y_i^{j+1} - y_i^j\right) - \\ - \bar{f}_{y'} \frac{1}{2kh}\left(y_{i+1}^{j+1} - y_{i-1}^{j+1} - y_{i+1}^j + y_{i-1}^j\right) - \bar{f}_\alpha = 0, \\ i = 1, 2, \ldots, n-1. \end{gathered} \tag{6.2.6}$$

Здесь $\bar{f}_y$, $\bar{f}_{y'}$, $\bar{f}_\alpha$ — соответствующие частные производные функции f, вычисленные, например, для значений переменных y_i на j-м (уже найденном) «слое»: так,

$$\bar{f}_{y'} = \frac{\partial f\left(z_i, y_i^j, \left(y_{i+1}^j - y_{i-1}^j\right)/2h, \alpha_j\right)}{\partial y'}. \tag{6.2.7}$$

Используя подходящие разностные замены в граничных условиях (6.2.4) (см. п. 6.1.1 и § 6.4), мы получаем, вместе с соотношением (6.2.6), систему линейных алгебраических уравнений

относительно неизвестных $y_0^{j+1}, y_1^{j+1}, \ldots, y_n^{j+1}$ (переменные с верхним индексом j нам известны). Матрица системы является трехдиагональной, и поэтому мы можем воспользоваться алгоритмом исключения Гаусса, работающим только с ненулевыми элементами.

Поскольку разностная замена (6.2.6) центрирована относительно точки $(i, j+1/2)$, то уменьшения погрешностей аппроксимации можно достичь, заменяя коэффициенты $\bar{f}_y$, $\bar{f}_{y'}$, $\bar{f}_\alpha$ в этой точке, т. е. вводя в соотношения (6.2.7) аргументы

$$\left(z_i,\ \frac{y_i^j + y_i^{j+1}}{2},\ \frac{y_{i+1}^j + y_{i+1}^{j+1} - y_{i-1}^j - y_{i-1}^{j+1}}{4h},\ \frac{\alpha_j + \alpha_{j+1}}{2}\right). \quad (6.2.8)$$

В результате мы получаем систему нелинейных уравнений относительно неизвестных с верхним индексом $j+1$, для решения которой можно использовать какой-либо итерационный метод, например, метод Ньютона.

Уравнение (6.2.3) можно также аппроксимировать методом прямых (см. § 6.4). Более подробный анализ метода дифференцирования по параметру можно найти в книге [6.8].

Выше мы сначала проводили дифференцирование по параметру α, а затем решали задачу численно (дискретизировали ее). Обратный порядок действий также возможен. Так, сначала мы можем преобразовать задачу (6.2.1), (6.2.2) с помощью соответствующих разностных формул, например, приводя ее к виду

$$\frac{y_{i-1} - 2y_i + y_{i+1}}{h^2} - f\left[z_i,\ y_i,\ \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h},\ \alpha\right] = 0, \quad (6.2.9)$$

$$\begin{gathered} i = 0,\ 1,\ \ldots,\ n, \\ a_0 y_0 + b_0 (y_1 - y_{-1})/2h = c_0, \\ a_1 y_n + b_1 (y_{n+1} - y_{n-1})/2h = c_1. \end{gathered} \quad (6.2.10)$$

Переменные y_{-1} и y_{n+1} можно найти из условий (6.2.10), а затем подставить их в уравнение (6.2.9). К полученной таким образом системе $n+1$ нелинейных уравнений $f_i(y_0, y_1, \ldots, y_n) = 0$, $i = 0, 1, \ldots, n$ можно затем применить метод п. 5.2.2. Интегрируя дифференциальные уравнения (5.2.8) методом Эйлера, мы получаем алгоритм, сходный с тем, который описывался выше.

Точно так же, как и в случае задач конечной размерности, здесь метод дифференцирования по параметру α не позволяет преодолевать точку поворота на диаграмме решений. Метод дифференцирования по длине дуги в том виде, как он был описан в п. 5.2.2, позволяет спокойно проходить точку поворота,

хотя для задач типа (6.2.9) при большом n без преобразований, использующих специальные структуры матрицы Якоби, этот метод применять невозможно. Использование указанного метода будет обсуждаться ниже, в п. 6.2.3, а также в связи с методом дифференцирования по граничному условию (п. 6.2.2).

Продемонстрируем теперь применение метода дифференцирования по параметру на примере *задачи* 16. В предыдущем пункте мы вывели уравнение (6.1.21), которое можно представить в виде (6.2.1), полагая $z=r$ и $\alpha=\Phi$. Если теперь обозначить

$$E(y)=\exp\frac{\gamma\beta(1-y)}{1+\beta(1-y)},$$

то уравнение (6.2.3) для (6.1.21) принимает вид

$$\frac{\partial^3 y}{\partial r^2\,\partial\Phi}+\frac{a}{r}\frac{\partial^2 y}{\partial r\,\partial\Phi}-\Phi^2\left[1-\frac{\gamma\beta y}{(1+\beta(1-y))^2}\right]E(y)\frac{\partial y}{\partial\Phi}-$$
$$-2\Phi y\cdot E(y)=0. \qquad (6.2.11)$$

Граничные условия при $\mathrm{Nu}\to\infty$, $\mathrm{Sh}\to\infty$ записываются как

$$\frac{\partial y\,(0,\,\Phi)}{\partial r}=0,\quad y(1,\,\Phi)=1. \qquad (6.2.12)$$

Начальное условие (6.2.5) легко получается аналитически в виде

$$\Phi=0:y(r,\,0)\equiv 1. \qquad (6.2.13)$$

При этом разностная аппроксимация уравнения (6.2.11) проводилась в соответствии с формулами (6.2.6) и (6.2.7), а замена граничного условия в точке $r=0$ осуществлялась точно так же, как в уравнении (6.1.22b). Влияние выбора шагов сетки h и k иллюстрируется табл. 6.6. Заметим, что для получения значения $y(0,1)$ при $h=0{,}025$ и $k=0{,}002$ нам пришлось 500 раз

Таблица 6.6. Метод дифференцирования по параметру Φ для *задачи* 16, $a=0$, $\gamma=20$, $\beta=0{,}05$. Приведены значения $y(0,\,1)$, т. е. значения концентрации в центре частицы при $\Phi=1$ (точное значение равно 0,5521). Видно влияние шагов h и k.

k	$h=0{,}1$	$h=0{,}025$
0,05	0,5670	0,5669
0,02	0,5580	0,5579
0,01	0,5550	0,5560
0,002	0,5528	0,5527

решить систему 40 линейных алгебраических уравнений с трехдиагональной матрицей. Тем самым было найдено 500 точек на диаграмме, описывающей зависимость стационарного решения от параметра.

Применение метода дифференцирования по параметру мы продемонстрировали на примере одного уравнения второго порядка. Переход к системе таких уравнений также не представляет особых трудностей — при этом лишь увеличится размерность решаемых задач и вместо трехдиагональной мы будем иметь дело с ленточной матрицей. Читатель может легко вывести соответствующие уравнения в частных производных для *задач* 11, 12, 13, 14. *Задача* 17 была решена этим методом в работе [6.12]. В следующем пункте описывается модификация данного метода, с помощью которой мы можем проходить точки поворота на диаграмме стационарных решений.

6.2.2. Метод дифференцирования по граничному условию

Обратимся вновь к задаче (6.2.1), (6.2.2), предполагая, что $b_0 \neq 0$. В качестве нового «параметра» задачи ξ введем значение решения в точке $z=0$:

$$y(0)=\xi. \tag{6.2.14}$$

Решение y задачи (6.2.1), (6.2.2) будет зависеть от пространственной переменной z и параметра ξ, т. е. $y=y(z,\xi)$. Дифференцируя уравнение (6.2.1) по ξ, находим

$$\frac{\partial^3 y}{\partial z^2\,\partial\xi}-\frac{\partial f}{\partial y}\frac{\partial y}{\partial\xi}-\frac{\partial f}{\partial y'}\frac{\partial^2 y}{\partial z\,\partial\xi}-\frac{\partial f}{\partial\alpha}\frac{d\alpha}{d\xi}=0. \tag{6.2.15}$$

Граничные условия (6.2.2) принимают вид

$$a_0 y(0,\xi)+b_0\frac{\partial y(0,\xi)}{\partial z}=c_0,\quad a_1 y(1,\xi)+b_1\frac{\partial y(1,\xi)}{\partial z}=c_1, \tag{6.2.16a}$$

причем из формулы (6.2.14) следует, что

$$y(0,\xi)=\xi. \tag{6.2.16b}$$

Теперь α есть функция от ξ, и в уравнение (6.2.15) входит неизвестная величина

$$C=d\alpha/d\xi. \tag{6.2.17}$$

Поэтому три граничных условия (6.2.16) не делают задачу переопределенной. Начальное условие для продолжения по параметру мы задаем в форме

$$\xi=\xi_0:\alpha=\alpha_0,\quad y(z,\xi_0)=\varphi(z), \tag{6.2.18}$$

где функция $\varphi(z)$ есть решение исходной краевой задачи (6.2.1), (6.2.2) при $\alpha=\alpha_0$ и $\varphi(0)=\xi_0$. В этом случае функцию $\varphi(z)$ часто можно найти в аналитическом виде для некоторого промежуточного значения параметра α.

Дифференциальное уравнение в частных производных (6.2.15), точно так же, как и в предыдущем пункте, нетрудно аппроксимировать соответствующими разностными уравнениями. Обозначим $z_i=ih$, $i=0, 1, \ldots, n$, $\xi_j=\xi_0+jk$, $j=1, 2, \ldots$, $y(z_i, \xi_j)\sim y_i^j$, $\alpha(\xi_j)\sim\alpha_j$, $h=1/n$. Тогда разностная аппроксимация уравнений (6.2.15) и (6.2.16) приводит к соотношениям

$$s_{i-1}^j y_{i-1}^{j+1}+s_i^j y_i^{j+1}+s_{i+1}^j y_{i+1}^{j+1}+r_i^j C=q_i^j, \quad i=0, 1, \ldots, n, \tag{6.2.19a}$$

$$a_0 y_0^{j+1}+b_0\left(y_1^{j+1}-y_{-1}^{j+1}\right)/2h=c_0, \tag{6.2.19b}$$

$$a_1 y_n^{j+1}+b_1\left(y_{n+1}^{j+1}-y_{n-1}^{j+1}\right)/2h=c_1, \tag{6.2.19c}$$

$$y_0^{j+1}=\xi_j+k. \tag{6.2.19d}$$

Коэффициенты s_{i-1}^j, s_i^j, s_{i+1}^j, r_i^j, q_i^j вычисляются с помощью известных значений решения на предыдущем «слое» при $\xi=\xi_j$ (т. е. при $\alpha=\alpha_j$). Соотношения (6.2.19) представляют собой систему $n+4$ линейных алгебраических уравнений относительно $n+4$ неизвестных $y_{-1}^{j+1}, \ldots, y_{n+1}^{j+1}$, C с почти ленточной матрицей. Решив эту систему, мы получим значения решения y^{j+1} для $\xi=\xi_{j+1}=\xi_j+k$. Для нахождения α воспользуемся методом Эйлера, т. е. формулой

$$\alpha_{j+1}=\alpha_j+kC, \tag{6.2.20}$$

которая следует из уравнения (6.2.17).

Продемонстрируем применение метода дифференцирования по граничному условию на примере *задачи* 16. По аналогии с уравнением (6.2.11) найдем производную уравнения (6.1.21) по $\xi=y(0)$, рассматривая его как уравнение относительно $y(r, \xi)$, $\delta(\xi)$ ($\delta=\Phi^2$, при сравнении с общими формулами (6.2.1) и (6.2.15) $z=r$ и $\alpha=\delta$):

$$\frac{\partial^3 y}{\partial r^2\,\partial\xi}-\frac{a}{r}\frac{\partial^2 y}{\partial r\,\partial\xi}-\delta\left[1-\frac{\gamma\beta y}{(1+\beta(1-y))^2}\right]E(y)\frac{\partial y}{\partial\xi}-$$
$$-yE(y)\frac{d\delta}{d\xi}=0. \tag{6.2.21}$$

Граничные условия записываются в виде

$$\frac{\partial y(0, \xi)}{\partial r}=0, \quad y(1, \xi)=1, \quad y(0, \xi)=\xi. \tag{6.2.22}$$

При $\delta_0 = 0$ решение задачи (6.2.1) и (6.2.2) (здесь — уравнения (6.1.21) при условиях $y'(0) = 0$, $y(1) = 1$) имеет вид $y(r) \equiv 1$ и, следовательно, можно положить

$$\xi_0 = 1: \; y(r, 1) \equiv 1, \quad \delta(1) = 0. \tag{6.2.23}$$

В табл. 6.7 показано влияние шагов h и k на точность получаемых результатов. Ясно, что найденные значения решения даже при сравнительно большом числе шагов по переменной ξ не слишком точны. Это лишь подтверждает наши выводы, сделанные в п. 5.2.2, о том, что сам по себе метод дифференцирования по параметру (или по граничному условию) не доставляет эффективного алгоритма для продолжения решения по параметру. Эффективный алгоритм, в котором вышеприведенные методы используются в качестве предиктора, а метод Ньютона — в качестве корректора, будет рассмотрен нами в следующем пункте.

Таблица 6.7. Метод дифференцирования по граничному условию для *задачи* 16 ($a = 0$, $\gamma = 20$, $\beta = 0{,}05$). Приведены значения параметра $\delta = \Phi^2$ при $\xi = y(0) = 0{,}5$ (точное значение равно $\delta = 1{,}1546$). Видно влияние шагов h и k.

k	$h=0{,}1$	$h=0{,}025$
−0,05	1,1266	1,1263
−0,02	1,1432	1,1428
−0,01	1,1490	1,1486
−0,005	1,1520	1,1516

В заключение этого пункта отметим, что метод дифференцирования по граничному условию позволяет проходить точки поворота на диаграмме решений (построенной по параметру α), но не способен, однако, преодолевать точки, где $d\xi/d\alpha = 0$ (т. е. $C = \infty$). Более подробный анализ метода дифференцирования по граничному условию читатель может найти в работе [6.8].

6.2.3. Алгоритм продолжения типа предиктор — корректор

Как уже отмечалось в предыдущем пункте, зависимости решения от параметра, полученные методом дифференцирования по параметру (или методом дифференцирования по граничному условию) при продвижении вдоль кривой на диаграмме решений могут все более отклоняться от нее. Поэтому здесь, так же как и в § 5.2, мы попробуем построить алгоритм, который будет корректировать такого рода отклонения. В качестве корректора будет использоваться метод Ньютона для соответствую-

щим образом сформулированной задачи, а функцию предиктора возьмут на себя описанные выше методы. Это и будет первый вариант алгоритма продолжения типа «предиктор—корректор», основанный на соответствующих разностных заменах исходной задачи (п. п. 6.2.3.1). Другой вариант этого алгоритма (п. п. 6.2.3.2) основывается на использовании метода стрельбы.

6.2.3.1. Алгоритм, основанный на разностных методах

В качестве примера рассмотрим вновь задачу (6.2.1) и (6.2.2). Точно так же как и в п. 5.2.2, введем новый параметр u, полагая при этом

$$\Omega(z, u) = \frac{\partial y}{\partial u}, \quad C(u) = \frac{d\alpha}{du}. \tag{6.2.24}$$

Дифференцируя уравнения (6.2.1) и (6.2.2) по u, получаем

$$\Omega'' - \frac{\partial f}{\partial y}\Omega - \frac{\partial f}{\partial y'}\Omega' - \frac{\partial f}{\partial \alpha}C = 0, \tag{6.2.25}$$

$$a_0\Omega(0) + b_0\Omega'(0) = 0, \quad a_1\Omega(1) + b_1\Omega'(1) = 0. \tag{6.2.26}$$

Заметим, что u играет здесь роль переменной z из уравнений (5.2.12). Для того чтобы u было длиной дуги в пространстве $\mathbf{B} \times \mathbf{R}^1$, где $y \in \mathbf{B}$ и $\alpha \in \mathbf{R}^1$, должно выполняться условие, аналогичное соотношению (5.2.13), а именно [1]

$$\|\Omega\|^2 + C^2 = 1. \tag{6.2.27}$$

Численная реализация этого равенства при разностной аппроксимации уравнений (6.2.25), (6.2.26) приводит к алгоритму, почти идентичному алгоритму DERPAR, описанному в п. 5.2.3. Размерность решаемых задач, однако, может оказаться значительной (при большом числе узловых точек или в случае, когда вместо одного уравнения (6.2.1) у нас имеется система дифференциальных уравнений). Кроме того, здесь всегда приходится использовать специальные методы решения возникающих разреженных систем линейных алгебраических уравнений со специальной (почти ленточной) структурой.

Ниже будет рассмотрена упрощенная схема данного алгоритма. Используя обозначения (6.2.24), выберем предиктор в форме метода Эйлера

$$y(z, u + \Delta u) = y(z, u) + \Delta u\Omega(z, u), \quad \alpha(u + \Delta u) = \alpha(u) + \Delta u C(u), \tag{6.2.28}$$

[1] Смысл этого равенства нуждается в пояснениях. Однако ниже выбор u как «длины дуги» не используется. — *Прим. ред.*

где Ω и C вычисляются из задачи (6.2.25), (6.2.26) при $y = y(z, u)$ и $\alpha = \alpha(u)$. При

$$C(u) = \pm 1 \tag{6.2.29}$$

мы получаем метод, формально аналогичный методу дифференцирования по параметру (п. 6.2.1), причем u играет здесь роль параметра α (на том участке, где $C = -1$, роль параметра α выполняет величина $-u$). Если теперь положить

$$\Omega(0, u) = \pm 1, \tag{6.2.30}$$

то мы получаем вариант метода дифференцирования по граничному условию, описанного в п. 6.2.2. Параметр u играет здесь роль задаваемого граничного значения $\xi = y(0)$, или, соответственно, $-\xi$. Шаг Δu в (6.2.28) можно выбирать в зависимости от того, используем ли мы соотношения (6.2.29) или (6.2.30).

Очевидно, что выбор типа (6.2.29) будет невыгоден в окрестности точки поворота и невозможен в самой этой точке[1]. И, наоборот, выбор типа (6.2.30) будет непригодным в окрестности экстремума зависимости $y(0)$ от параметра α на диаграмме решений. Из этих соображений вытекает алгоритм выбора между двумя указанными возможностями: если последнее вычисленное значение удовлетворяет условию

$$\Omega(0, u) < MC, \tag{6.2.31}$$

то для следующего шага принимается условие (6.2.29). В противоположном случае выбирается условие (6.2.30). Конечно, в обоих этих случаях мы должны соблюдать ориентацию вдоль кривой[2], т. е. знаки «+» или «—» определяются с учетом предыдущих значений C или $\Omega(0)$. Постоянную M в условии (6.2.31) можно полагать равной 1, если $y(0)$ и α соизмеримы, в противном же случае она выбирается с учетом того, какие относительные изменения $y(0)$ или α ожидаются вдоль ветви соответствующей диаграммы решений.

Таким образом, мы разрешили проблему предиктора. В качестве корректора, как и в § 5.2, можно использовать метод Ньютона, применяя его к системе разностных уравнений (6.2.9), (6.2.10). При этом вновь необходимо различать два случая. В первом из них выполнялось условие (6.2.31), и тогда предиктор выбирался в соответствии с формулой (6.2.29), во

---

[1] Речь идет о точке поворота по «исходному» параметру α. — *Прим. ред.*

[2] Имеется в виду кривая на диаграмме стационарных решений. — *Прим. ред.*

втором — имела место противоположная ситуация. В первом случае мы решаем уравнения (6.2.9), (6.2.10) при фиксированном (предсказанном) значении параметра α; во втором случае — при фиксированном (предсказанном) значении $y_0 = y(0)$, а параметр α считается неизвестным. Блок-схему предложенного алгоритма продолжения типа «предиктор—корректор» читатель легко может построить самостоятельно.

6.2.3.2. Алгоритм, основанный на методе стрельбы

Идею этого метода мы теперь продемонстрируем на примере задачи (6.1.1), (6.1.2) с граничными условиями (6.1.4). Зададим снова два недостающих начальных условия в точке $z = 0$ (см. (6.1.24)): $x(0) = \eta_1$, $y(0) = \eta_2$. Интегрируя уравнения (6.1.1), (6.1.2) с начальными условиями (6.1.4а), (6.1.24) при некотором значении параметра L, мы должны получить в точке $z = 1$

$$F_1(\eta_1, \eta_2, L) = x'(1, \eta, L) = 0, \quad F_2(\eta_1, \eta_2, L) = y'(1, \eta, L) = 0. \tag{6.2.32}$$

Таким образом, у нас имеются два уравнения относительно трех неизвестных η_1, η_2, L. Для нахождения соответствующей кривой в пространстве (η_1, η_2, L) мы можем использовать алгоритм DERPAR, описанный в § 5.2. Для вычисления матрицы Якоби

$$\begin{bmatrix} \dfrac{\partial F_1}{\partial \eta_1}, & \dfrac{\partial F_1}{\partial \eta_2}, & \dfrac{\partial F_1}{\partial L} \\ \dfrac{\partial F_2}{\partial \eta_1}, & \dfrac{\partial F_2}{\partial \eta_2}, & \dfrac{\partial F_2}{\partial L} \end{bmatrix} \tag{6.2.33}$$

используем вариационные переменные p_{xi}, p_{yi}, определяемые соотношениями (6.1.26)—(6.1.28), а также переменные

$$p_{xL} = \partial x/\partial L, \quad p_{yL} = \partial y/\partial L, \tag{6.2.34}$$

для которых нетрудно получить следующие уравнения в вариациях:

$$\begin{aligned} p''_{xL} + \frac{L^2}{D_x}\left(\frac{\partial f}{\partial x} p_{xL} + \frac{\partial f}{\partial y} p_{yL}\right) + \frac{2L}{D_x} f(x, y) = 0, \\ p''_{yL} + \frac{L^2}{D_y}\left(\frac{\partial g}{\partial x} p_{xL} + \frac{\partial g}{\partial y} p_{yL}\right) + \frac{2L}{D_y} g(x, y) = 0 \end{aligned} \tag{6.2.35}$$

с начальными условиями

$$p_{xL}(0) = p'_{xL}(0) = p_{yL}(0) = p'_{yL}(0) = 0. \tag{6.2.36}$$

Частные производные в уравнении (6.2.33) задаются формулами (6.1.29), а также соотношениями

$$\frac{\partial F_1}{\partial L}=p'_{xL}(1), \quad \frac{\partial F_2}{\partial L}=p'_{yL}(1). \tag{6.2.37}$$

Таким образом, мы имеем все необходимое для использования алгоритма продолжения DERPAR (см. п. 5.2.3): можем вычислить функции F_1 и F_2 по формулам (6.2.32), а также матрицу Якоби (6.2.33). Для одного такого вычисления нам необходимо решить задачу Коши для восьми дифференциальных уравнений второго порядка (6.1.1), (6.1.2), (6.1.27) и (6.2.35), т. е. для системы 16-го порядка.

В случае ГУ1 алгоритм изменяется в соответствии с формулами (6.1.30), (6.1.31), (6.1.32); при этом частные производные, входящие в матрицу Якоби (6.2.33), имеют вид

$$\begin{aligned} &\frac{\partial F_1}{\partial \eta_1}=p_{x1}(1), \quad \frac{\partial F_1}{\partial \eta_2}=p_{x2}(1), \quad \frac{\partial F_1}{\partial L}=p_{xL}(1),\\ &\frac{\partial F_2}{\partial \eta_1}=p_{y1}(1), \quad \frac{\partial F_2}{\partial \eta_2}=p_{y2}(1), \quad \frac{\partial F_2}{\partial L}=p_{yL}(1). \end{aligned} \tag{6.2.38}$$

Приведенный подход, основанный на методе стрельбы и вариационных дифференциальных уравнениях, называется в литературе методом GPM [6.8, 6.13, 6.14].

Диаграмма решений, найденная с помощью метода стрельбы и алгоритма продолжения DERPAR для *задачи* 11 в случае ГУ2, представлена на рис. 6.3 [6.15]. Здесь же приведены решения, полученные с помощью «суммирования» (профилей) решений (см. формулу (4.3.17)). Для некоторых ветвей указана устойчивость соответствующих решений. Из рисунка видно, что при больших L существует значительное число различных стационарных решений. Попробуем оценить это число. Рассмотрим ветвь элементарных решений, т. е. решений, которые не могут быть получены путем «сложения» решений с меньшими L. Пусть такая ветвь существует при $L \in (L_i, L_i+\Delta L_i)$. Если мы выберем максимально широкие промежутки существования, то тогда L_i и $L_i+\Delta L_i$ представляют собой координаты точек бифуркации. Фиксируем теперь длину L и исследуем, сколько различных решений, полученных «сложением» из решений этой ветви, будет существовать для такого L. Это число равняется разности

$$N_i=\left[\frac{L}{L_i}\right]-\left[\frac{L}{L_i+\Delta L_i}\right], \tag{6.2.39}$$

где квадратные скобки означают целую часть заключенного в них отношения. Если теперь взять все известные ветви элементарных решений, то общее число различных решений для

длины L будет равно

$$N = 1 + \sum_i N_i, \tag{6.2.40}$$

где единица представляет собой (при всех L) существующее тривиальное решение $x \equiv A$, $y \equiv B/A$. Эти рассуждения остаются справедливыми для любых систем типа «реакция—диффузия» с граничными условиями типа ГУ2. Если нам известны не

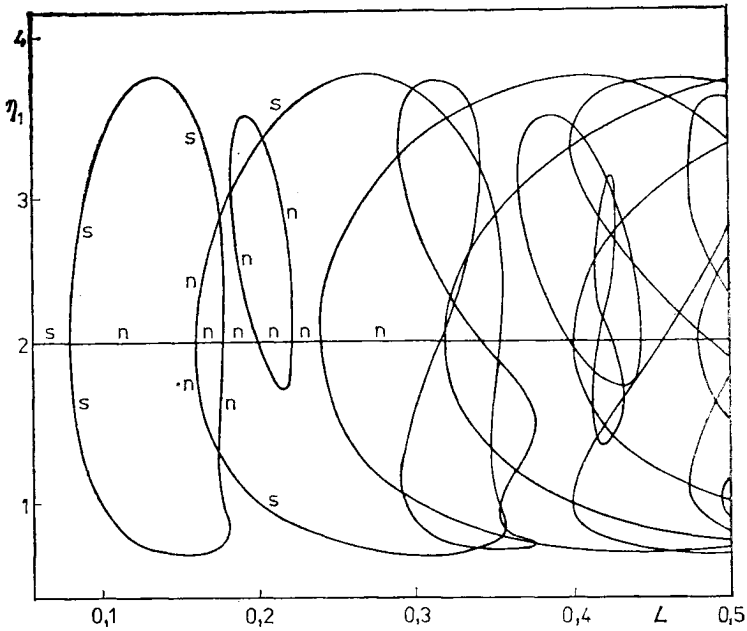


Рис. 6.3. Диаграмма стационарных решений для *задачи* 11 при ГУ2, $A = 2$, $B = 4{,}6$, $D_x = 0{,}0016$, $D_y = 0{,}008$, $\eta_1 = x(0)$; s — устойчивые, n — неустойчивые решения.

все ветви элементарных решений, то тогда выражение (6.2.40) дает нижнюю оценку числа решений для данного L. Так, при $L = 1$ на основании рис. 6.3 мы находим, что существует минимум 35 стационарных решений *задачи* 11 для случая ГУ2 (см. табл. 6.8 с учетом того, что существуют еще тривиальные решения задачи (при любых L)).

Пример диаграммы стационарных решений для *задачи* 11 в случае ГУ1 представлен на рис. 6.4, а более полную картину решений наряду с профилями $x(z)$, $y(z)$ читатель может найти в [6.15]. У некоторых ветвей на рис. 6.4 указан характер их

Таблица 6.8. Число N_i стационарных решений *задачи* 11 для случая ГУ2 ($L = 1$), полученных M_i-кратным «сложением» элементарных решений при $L = L_i$, $A = 2$, $B = 4{,}6$, $D_x = 0{,}0016$, $D_y = 0{,}008$.

i	N_i	M_i	L_i
1	2	12	1/12
2	2	11	1/11
3	2	10	0,1
4	2	9	1/9
5	2	8	0,125
6	2	7	1/7
7	2	6	1/6
8	2	5	0,2
9	4	3	1/3
10	14	2	0,5

устойчивости. Отметим также, что операция «сложения решений» в случае ГУ1 оказывается невозможной.

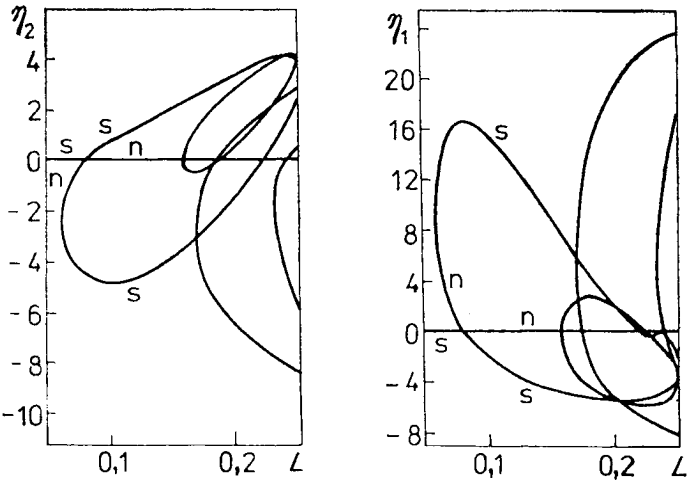


Рис. 6.4. Диаграмма решений для *задачи* 11 при ГУ1, $A = 2$, $B = 4{,}6$, $D_x = 0{,}0016$, $D_y = 0{,}008$, $\eta_1 = x'(0)$, $\eta_2 = y'(0)$; s — устойчивые, n — неустойчивые решения.

Часть диаграммы решений для задачи 12 в случае ГУ2, содержащая только элементарные решения, представлена на рис. 6.5. При выбранных параметрах задача имеет три тривиальных решения (они указаны в описании к рисунку, так что читатель может сравнить эти данные с данными рис. 5.6b и 5.20e). Точно так же, как и в случае рис. 6.3, мы можем под-

считать число решений при больших L, полученных путем сложения элементарных решений. Диаграммы решений с использованием условий типа ГУ1 представлены на рис. 6.6 для случая граничных условий, определяемых тривиальным решением № 3, указанным в описании к рис. 6.5.

На рис. 6.7 изображена диаграмма решений *задачи* 13 в случае граничных условий ГУ2. Здесь же частично представлены решения, полученные сложением решений, и указан характер устойчивости отдельных ветвей.

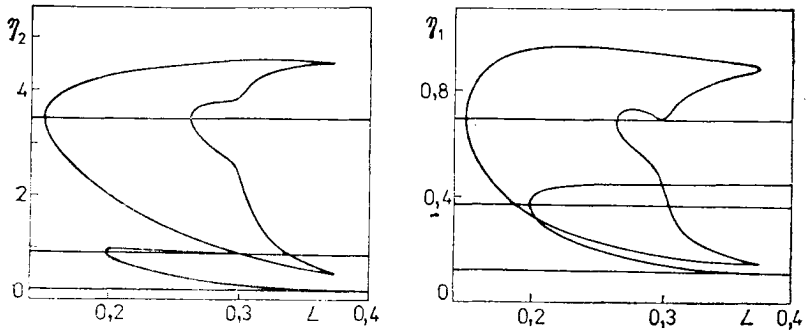


Рис. 6.5. Диаграмма решений для *задачи* 12 при ГУ2, $\alpha = 12$, $\beta = 1{,}5$, $\gamma = 3$, $\delta = 1$, $\nu_0 = 0{,}01$, $D_x = 0{,}008$, $D_y = 0{,}004$; $\eta_1 = x(0)$, $\eta_2 = y(0)$.

Тривиальные решения в системе без пространственных градиентов ($D_x = D_y = 0$):

i	$\bar{x}_i$	$\bar{y}_i$	Тип решения	Бифуркационная длина L^*
1	0,1157	0,1962	устойчивый фокус	—
2	0,3728	0,8915	седло	0,1965
3	0,7006	3,5106	неустойчивый фокус	0,1516, 0,2630

Покажем теперь, как изменится схема алгоритма в случае *задачи* 14. Будем искать зависимость решения уравнений (6.1.35a, b) с граничными условиями (6.1.36a, b) от параметра Da. Выберем два недостающих начальных условия в форме (6.1.37) и положим в точке $z = 0$

$$F_1(\eta, \mathrm{Da}) = \mathrm{Pe_M} y(0) - y'(0) = 0,$$
$$F_2(\eta, \mathrm{Da}) = \mathrm{Pe_H}\Theta(0) - \Theta'(0) = 0. \qquad (6.2.41)$$

Вариационные уравнения для переменных $p_{y1} = \partial y/\partial\eta_1$, $p_{y2} = \partial y/\partial\eta_2$, $p_{y\,\mathrm{Da}} = \partial y/\partial\,\mathrm{Da}$, $p_{\Theta 1} = \partial\Theta/\partial\eta_1$, $p_{\Theta 2} = \partial\Theta/\partial\eta_2$, $p_{\Theta\mathrm{Da}} = \partial\Theta/\partial\,\mathrm{Da}$ читатель может легко получить дифференцированием уравнений (6.1.35a, b) по η_1, η_2 и Da. Начальные условия

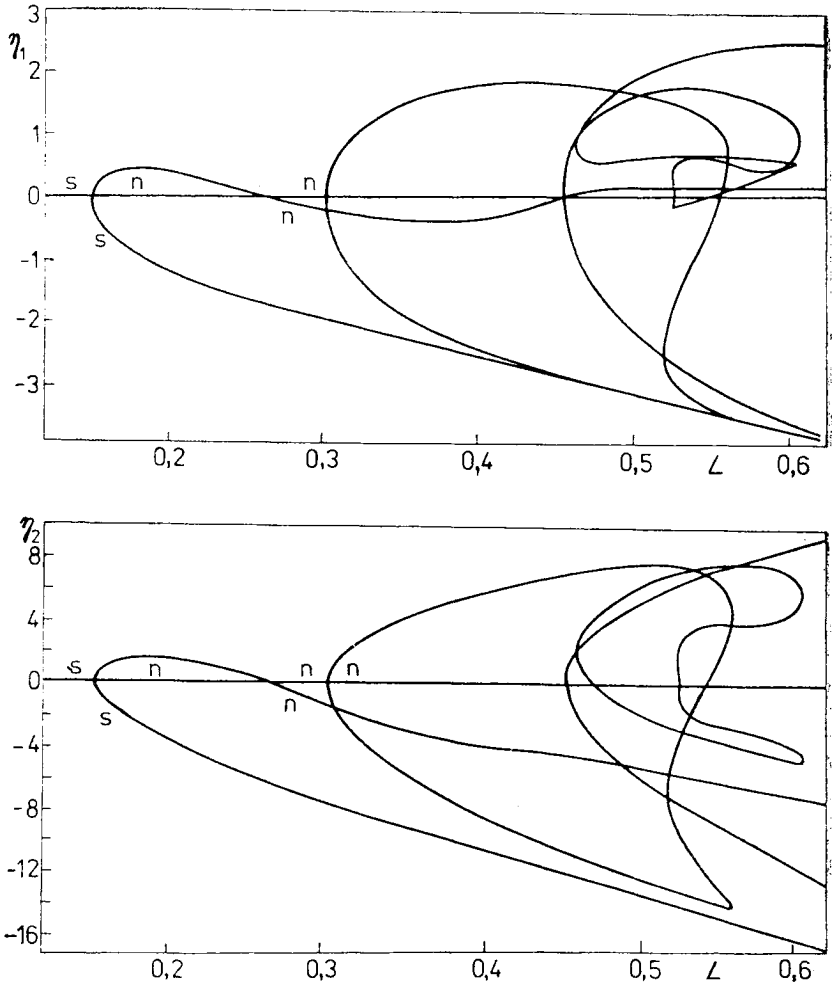


Рис. 6.6. Диаграмма решений для *задачи* 12 при ГУ1. $\bar{x} = 0{,}7006$, $\bar{y} = 3{,}5106$; $\eta_1 = x'(0)$, $\eta_2 = y'(0)$. Остальные параметры указаны на рис. 6.5; s — устойчивые, n — неустойчивые решения.

для них выбираются нулевыми, кроме условий $p_{y1}(1) = 1$, $p_{\theta 2}(1) = 1$. При этом матрица Якоби системы (6.2.41) будет иметь вид

$$\begin{bmatrix} \mathrm{Pe_M} p_{y1}(0) - p'_{y1}(0), & \mathrm{Pe_M} p_{y2}(0) - p'_{y2}(0), & \mathrm{Pe_M} p_{y\,\mathrm{Da}}(0) - p'_{y\,\mathrm{Da}}(0) \\ \mathrm{Pe_H} p_{\theta 1}(0) - p'_{\theta 1}(0), & \mathrm{Pe_H} p_{\theta 2}(0) - p'_{\theta 2}(0), & \mathrm{Pe_H} p_{\theta\,\mathrm{Da}}(0) - p'_{\theta\,\mathrm{Da}}(0) \end{bmatrix}. \tag{6.2.42}$$

Диаграмма стационарных решений, полученная этим методом [1], приведена на рис. 6.8. При Da = 0 начальную точку зависимости можно найти аналитически. Сравните число решений для различных значений параметра Da, приведенных в табл. 6.4 и 6.5.

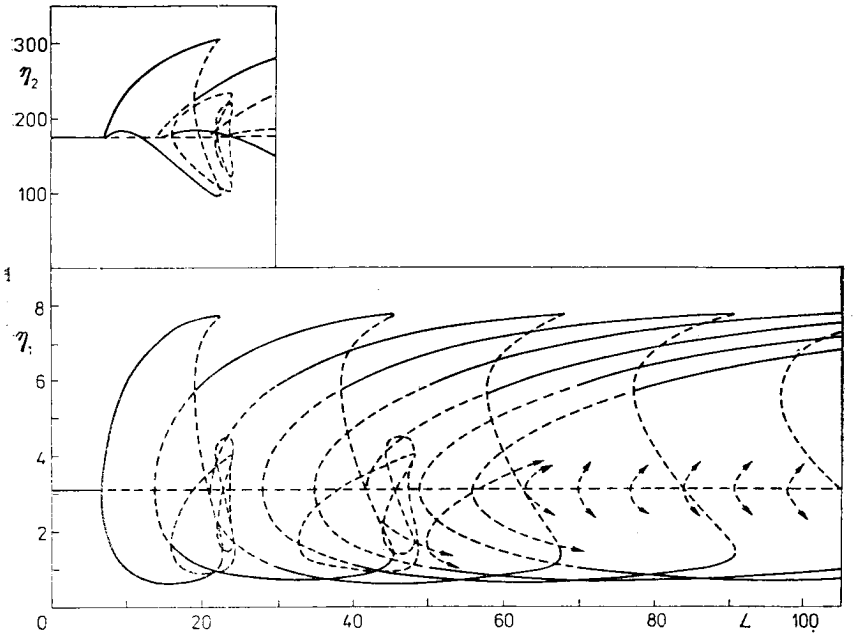


Рис. 6.7. Диаграмма решений для *задачи* 13 при ГУ2; $\mu = 0{,}0035$, $\nu = 0{,}0045$, $\rho_0 = 6\cdot 10^{-4}$, $c = 0{,}05$, $c' = 0{,}025$, $\rho = \rho' = 3{,}2$, $D_x = 0{,}01$, $D_y = 0{,}45$, $\eta_1 = x(0)$, $\eta_2 = y(0)$; сплошные линии — устойчивые, прерывистые — неустойчивые решения.

В заключение этого пункта проиллюстрируем, как найти зависимость решения от параметра в случае *задачи* 15. Здесь годится подход, вполне аналогичный тому, который использовался нами в *задаче* 14 (в чем, впрочем, мы могли убедиться еще в предыдущем параграфе). Итак, будем искать зависимость решения уравнений (P15-6), (P15-7) совместно с нелинейными (алгебраическими) уравнениями (P15-8), (P15-9) от параметра Da. Граничные условия вновь имеют форму (6.1.36a, b). Два недостающих начальных условия в точке $z = 1$ выбираем в

[1] То есть применением алгоритма DERPAR к нахождению кривой $F_1(\eta_1, \eta_2, \mathrm{Da}) = F_2(\eta_1, \eta_2, \mathrm{Da}) = 0$. — *Прим. ред.*

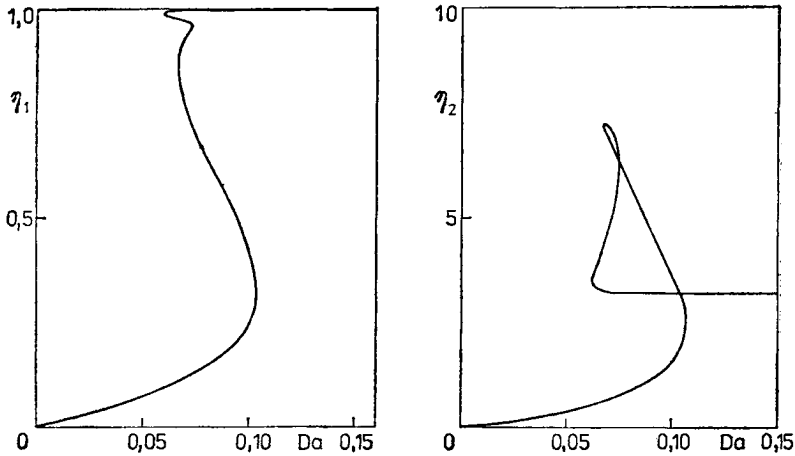


Рис. 6.8. Диаграмма решений для *задачи* 14. $Pe_м = 10$, $Pe_н = 5$, $B = 15$, $\beta = 2$, $\Theta_c = 0$, $\gamma = 20$, $\eta_1 = y(1)$, $\eta_2 = \Theta(1)$.

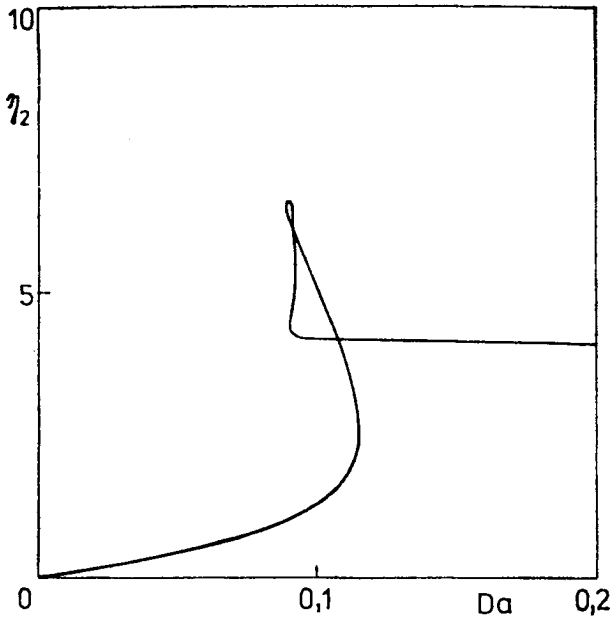


Рис. 6.9. Диаграмма решений *задачи* 15. Зависимость температуры на выходе $\eta_2 = \Theta(1)$ от параметра Da. $Pe_м = 20$, $Pe_н = 10$, $\beta = 1$, $B = 10$, $\gamma = 20$, $\Theta_c = 0$, $J_м = J_н = 25$.

соответствии с формулами (6.1.37), а в точке $z=0$ имеем два нелинейных уравнения вида (6.2.41). Вариационное уравнение для p_{y1} имеет вид (6.1.40). Вариационные уравнения для остальных переменных (6.1.39), а также для переменных $p_{y\,\mathrm{Da}}=\partial y/\partial \mathrm{Da}$, $p_{\Theta\mathrm{Da}}=\partial\Theta/\partial \mathrm{Da}$ выводятся аналогично. При этом матрица системы (6.2.41) имеет вид (6.2.42).

Напомним, что на каждом шаге интегрирования уравнений (P15-6), (P15-7), а также соответствующих вариационных уравнений нам необходимо вычислять значения переменных (6.1.41), т. е. переменных $\partial\omega/\partial y$, $\partial\omega/\partial\Theta$, $\partial\theta/\partial y$, $\partial\theta/\partial\Theta$. Эти значения мы находим по формулам (6.1.43) так же, как это делалось в § 6.1.

На рис. 6.9 приведена диаграмма решений рассматриваемой задачи в зависимости от параметра Da. Как видно из рисунка, в узком интервале значений параметра данная задача имеет 5 решений. Для указанных значений параметров уравнение (P15-11) имело только одно решение ω в промежутке $[y(z), 1]$ при любом $z\in[0, 1]$.

Построение диаграммы решений несколько осложняется в тех случаях, когда уравнение (P15-11) имеет несколько корней. Подробный анализ *задачи* 15 читатель может найти в сборнике [6.16].

6.2.4. Метод отображения параметра

В некоторых случаях оказывается возможным достаточно быстро построить диаграмму стационарных решений, если к выбранному значению некоторого начального условия с помощью интегрирования задачи Коши мы добавим соответствующее значение параметра. Аналогичный подход был описан для «сосредоточенных» систем в п. 5.2.1. Так же, как и там, возможность применения этого подхода зависит от конкретного вида дифференциальных уравнений и граничных условий, а также от того, как входит в уравнения выбранный параметр. Поэтому мы продемонстрируем применение указанного метода на двух конкретных задачах из гл. 4. Более общие соображения читатель может найти в книгах [6.8, 6.9] и в приведенной в них библиографии.

Будем строить зависимость решения *задачи* 16 от параметра Φ. Для стационарного случая мы свели эту задачу к одному дифференциальному уравнению второго порядка (6.1.21) с граничными условиями (6.1.16a, c). Введем новую независимую переменную

$$z=\Phi r. \tag{6.2.43}$$

Тогда дифференциальное уравнение (6.1.21) приведется к виду

$$\frac{d^2y}{dz^2}+\frac{a}{z}\frac{dy}{dz}-y\exp\frac{\gamma\beta(1-y)}{1+\beta(1-y)}=0, \qquad (6.2.44)$$

т. е. не будет содержать Ф.

Граничные условия приобретут вид

$$z=0:\ \frac{dy}{dz}=0, \qquad (6.2.45a)$$

$$z=\Phi:\ y=1. \qquad (6.2.45b)$$

Выберем теперь недостающее начальное условие в виде

$$y(0)=\eta, \quad 0<\eta<1 \qquad (6.2.46)$$

и проинтегрируем полученную задачу Коши (6.2.44), (6.2.45a), (6.2.46) от $z=0$ до точки $z=z_1$, в которой

$$y(z_1)=1. \qquad (6.2.47)$$

Значение z_1 определяет значение параметра Ф, соответствующее выбранному начальному условию η (и найденному решению $y(z)$):

$$z_1=\Phi. \qquad (6.2.48)$$

Для выполнения равенства (6.2.47) можно воспользоваться каким-либо методом последовательных приближений, например методом деления промежутка пополам. Процесс можно, например, реализовать так. Когда в процессе интегрирования становится $y(z)>1$, мы возвращаемся на один шаг назад и продолжаем интегрирование с более коротким шагом (например, уменьшенным вдвое). По достижении достаточно короткого шага процесс прекращается.

Опишем коротко неитерационный способ нахождения величины z_1. Проинтегрируем уравнение (6.2.44), переписав его в виде системы двух дифференциальных уравнений первого порядка,

$$\frac{dy}{dz}=w, \quad \frac{dw}{dz}=-\frac{a}{z}w+y\exp\frac{\gamma\beta(1-y)}{1+\beta(1-y)}, \qquad (6.2.49)$$

с начальными условиями (6.2.45a), (6.2.46), т. е. с условиями $y(0)=\eta$, $w(0)=0$. В некоторой точке $\bar{z}>0$, где $y(\bar{z})=\bar{y}<1$ и $dy/dz=\bar{y}'$, мы переходим к интегрированию дифференциальных уравнений вида

$$\frac{dw}{dy}=-\frac{a}{z}+\frac{y}{w}\exp\frac{\gamma\beta(1-y)}{1+\beta(1-y)}, \quad \frac{dz}{dy}=\frac{1}{w} \qquad (6.2.50)$$

от $y=\bar{y}$, где $w(\bar{y})=\bar{y}'$, $z(\bar{y})=\bar{z}$ до $y=1$. После этого полагаем $z(1)=\Phi$ (ср. аналогичный процесс вычисления отображения Пуанкаре, п. 5.9.2). Полученные таким образом значения Φ для последовательности значений η приведены в табл. 6.9. Из этих данных видно, что при $\beta=0{,}4$ для определенного интервала значений Φ (например для $\Phi=0{,}3$) существует три решения исходной краевой задачи. Читатель может сравнить результаты, полученные при $\beta=0{,}05$, с результатами, приведенными в табл. 6.1.

Таблица 6.9. Результаты применения метода отображения параметра для *задачи* 16 ($\gamma=20$, $a=0$). Значения Φ.

η	$\beta=0{,}05$	$\beta=0{,}2$	$\beta=0{,}25$	$\beta=0{,}4$
0,95	0,31639	0,29742	0,29139	0,27419
0,85	0,55044	0,45896	0,43259	0,36368
0,8	0,63823	0,50212	0,46467	0,37080
0,75	0,71757	0,53330	0,48487	0,36820
0,65	0,86298	0,57434	0,50498	0,34981
0,55	1,00294	0,60044	0,51174	0,32628
0,5	1,07453	0,61114	0,51324	0,31494
0,45	1,14920	0,62160	0,51468	0,30455
0,3	1,41268	0,66137	0,52646	0,28254
0,25	1,52519	0,68178	0,53618	0,27952
0,2	1,66101	0,70946	0,55150	0,27975
0,1	2 08042	0,81140	0,61687	0,29753
0,02	3,06664	1,09463	0,81559	0,37686
0,01	3,49531	1,22341	0,90755	0,41554
0,001	4,92385	1,65658	1,21770	0,54695

Другим примером, на котором мы рассмотрим возможности метода отображения параметра, является система типа «реакция—диффузия» (4.3.16) при $D_y\to 0$. В этом предельном случае второе уравнение системы (4.3.16) сводится к конечному уравнению вида

$$g(x,\ y)=0, \tag{6.2.51}$$

решая которое, мы находим зависимость $y(x)$ (часто в аналитическом виде). Подстановка в уравнение (6.1.1) дает

$$x''=-\frac{L^2}{D_x}f(x,\ y(x))=-\frac{L^2}{D_x}\bar{f}(x). \tag{6.2.52}$$

Положив

$$\xi=Lz, \tag{6.2.53}$$

получим уравнение, не содержащее параметра L:

$$\frac{d^2x}{d\xi^2} = -\frac{1}{D_x}\bar{f}(x). \tag{6.2.54}$$

Рассмотрим для примера граничные условия 1 рода (4.3.9). Для уравнения (6.2.54) они принимают вид

$$\xi = 0:\ x = \bar{x}; \quad \xi = L:\ x = \bar{x}. \tag{6.2.55}$$

Зададим дополнительно при $\xi = 0$

$$\frac{dx(0)}{d\xi} = \eta, \tag{6.2.56}$$

после чего проинтегрируем уравнение (6.2.54) от $\xi = 0$, где $x(0) = \bar{x}$, $x'(0) = \eta$, до такого значения $\xi = L$, где $x(L) = \bar{x}$. Это значение L мы и сопоставим выбранному η.

6.3. НАХОЖДЕНИЕ ТОЧЕК ВЕТВЛЕНИЯ

В этом параграфе мы рассмотрим итерационные методы для нахождения точек ветвления стационарных решений распределенных систем. В п. 6.3.1 мы будем находить так называемые точки первичной бифуркации. Пункт 6.3.2 посвящен более сложным (вторичным) бифуркациям.

6.3.1. Первичные бифуркации

Некоторые задачи обладают так называемыми тривиальными решениями, не зависящими от части параметров. К ним, в частности, относятся системы типа «реакция — диффузия», описанные в гл. 4. Тривиальное стационарное решение для такой двухкомпонентной системы (4.3.5), (4.3.6) однородно по пространству, т. е. имеет вид

$$x(z) \equiv \bar{x}, \quad y(z) \equiv \bar{y}. \tag{6.3.1}$$

Оно не зависит от величины параметра L, задающего размеры системы, а также от величины коэффициентов диффузии D_x и D_y.

Значения $\bar{x}$ и $\bar{y}$ определяются уравнениями $f(\bar{x}, \bar{y}) = 0$, $g(\bar{x}, \bar{y}) = 0$ и могут, естественно, зависеть от параметров, входящих в функции f и g. При изменении этих параметров могут происходить бифуркации, не нарушающие пространственной однородности. Их можно исследовать методами, описанными в гл. 5.

В этом пункте мы рассмотрим бифуркации тривиальных решений, нарушающие пространственную однородность и связан-

ные с изменением параметра L — размера системы. Такие бифуркации мы будем называть первичными.

Устойчивость тривиального решения (6.3.1) определяется собственными числами[1] линеаризованного оператора [2.32]

$$\mathscr{L}=\begin{bmatrix} \frac{D_x}{L^2}\frac{d^2}{dz^2}+a_{11}, & a_{12} \\ a_{21} & \frac{D_y}{L^2}\frac{d^2}{dz^2}+a_{22} \end{bmatrix} \tag{6.3.2}$$

при соответствующих (однородных) граничных условиях (типа ГУ2 или ГУ1). Здесь

$$\begin{aligned} a_{11}&=\frac{\partial f(\bar{x},\bar{y})}{\partial x}, & a_{12}&=\frac{\partial f(\bar{x},\bar{y})}{\partial y}, \\ a_{21}&=\frac{\partial g(\bar{x},\bar{y})}{\partial x}, & a_{22}&=\frac{\partial g(\bar{x},\bar{y})}{\partial y}. \end{aligned} \tag{6.3.3}$$

Тривиальное решение $(\bar{x},\bar{y})$ устойчиво, если все собственные числа оператора $\mathscr{L}$ имеют отрицательную вещественную часть и неустойчиво, если хотя бы одно собственное число имеет положительную вещественную часть.

Обсудим теперь устойчивость тривиального решения в зависимости от величины параметра L и типа граничных условий. Рассмотрим сначала очень малые L. В случае ГУ1 при $L\to+0$ (точнее, при $L<L_{\min}$) всякое тривиальное решение будет устойчивым [6.17]. В случае же ГУ2 вопрос об устойчивости при $L\to 0$ решается в зависимости от поведения системы при отсутствии пространственных градиентов. (Более формально — от поведения системы обыкновенных дифференциальных уравнений, получающейся при $D_x=D_y=0$). Именно, если все собственные числа матрицы

$$\mathbf{A}=\begin{bmatrix} a_{11}, & a_{12} \\ a_{21}, & a_{22} \end{bmatrix}$$

лежат в левой (комплексной) полуплоскости, тривиальное решение будет устойчивым в случае ГУ2 при $L\to+0$. Наоборот, наличие собственного числа матрицы $\mathbf{A}$ с положительной вещественной частью влечет за собой неустойчивость тривиального решения в случае ГУ2.

С ростом L какое-нибудь из собственных чисел оператора $\mathscr{L}$ может пересечь мнимую ось. При этом в результате веществен-

[1] Точнее, спектром $\mathscr{L}$; подробности см. в работе [2.32]. (Здесь это уточнение не нужно: спектр оператора $\mathscr{L}$ совпадает с совокупностью его собственных значений. — *Ред.*)

ной или комплексной бифуркации (бифуркации Андронова — Хопфа) может появиться новое решение (нелинейной) задачи. Значение параметра L, соответствующее первичной бифуркации, называют первичной бифуркационной длиной. Это значение находится следующим образом.

В рассматриваемом случае (тривиального стационарного решения) оператор $\mathscr{L}$ имеет постоянные коэффициенты и его собственные функции выписываются в явном виде. А именно:

$$\text{в случае ГУ1: } \mathbf{u} = [c_n \sin(n\pi z),\ d_n \sin(n\pi z)],\ n = 1,\ 2,\ \ldots, \tag{6.3.4}$$

$$\text{в случае ГУ2: } \mathbf{u} = [c_n \cos(n\pi z),\ d_n \cos(n\pi z)],\ n = 0,\ 1,\ 2,\ \ldots. \tag{6.3.5}$$

Подставив эти выражения в равенство $\mathscr{L}\mathbf{u} = \lambda\mathbf{u}$, мы получаем: 1) собственное число λ оператора $\mathscr{L}$, соответствующее собственной функции (6.3.4) или (6.3.5) при определенном значении n, одновременно является собственным числом матрицы

$$\mathbf{A}_n = \begin{bmatrix} -D_x E_{(n)} + a_{11}, & a_{12} \\ a_{21}, & -D_y E_{(n)} + a_{22} \end{bmatrix}, \quad E_{(n)} = \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2, \tag{6.3.6}$$

которая имеет один и тот же вид для ГУ1 и ГУ2; 2) вектор $\begin{pmatrix} c_n \\ d_n \end{pmatrix}$ есть собственный вектор матрицы $\mathbf{A}_n$. Собственные числа λ матрицы $\mathbf{A}_n$ — корни характеристического уравнения

$$\lambda^2 - P_n(L)\lambda + Q_n(L) = 0, \tag{6.3.7}$$

где

$$P_n(L) = a_{11} + a_{22} - (D_x + D_y) E_{(n)}, \tag{6.3.8}$$

$$Q_n(L) = D_x D_y E_{(n)}^2 - (D_x a_{22} + D_y a_{11}) E_{(n)} + a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}. \tag{6.3.9}$$

Для того, чтобы $\lambda = 0$ было собственным числом оператора $\mathscr{L}$, т. е. чтобы имела место вещественная бифуркация, необходимо [1], чтобы при некотором n

$$Q_n(L) = 0. \tag{6.3.10}$$

Для точки первичной комплексной бифуркации должно выполняться условие

$$P_n(L) = 0, \quad Q_n(L) > 0. \tag{6.3.11}$$

---

[1] Поскольку все собственные функции $\mathscr{L}$ имеют вид (6.3.4) (или (6.3.5)). — *Прим. ред.*

Значение $E^*_{(n)}$, которое удовлетворяет соотношению (6.3.10), не зависит от n:

$$E^*_{(n)} = E^*_{1,2} = \frac{1}{2D_xD_y}\{D_xa_{22} + D_ya_{11} \pm [(D_xa_{22} + D_ya_{11})^2 - \\ - 4D_xD_y(a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21})]^{1/2}\}. \quad (6.3.12)$$

Мы можем получить два, одно или ни одного значения E^*, для которых имеет место вещественная бифуркация. После этого находим бифуркационную длину

$$L^*_{(n)\,1,2} = \frac{n\pi}{\sqrt{E^*_{1,2}}}, \quad (6.3.13)$$

если $E^* > 0$. Из последней формулы также следует, что

$$L^*_{(n)} = nL^*_{(1)} \quad (6.3.14)$$

для обеих групп бифуркационных длин (определяемых индексами 1 и 2 в выражении (6.3.13)). Величину $L^*_{(1)}$ называют эле-

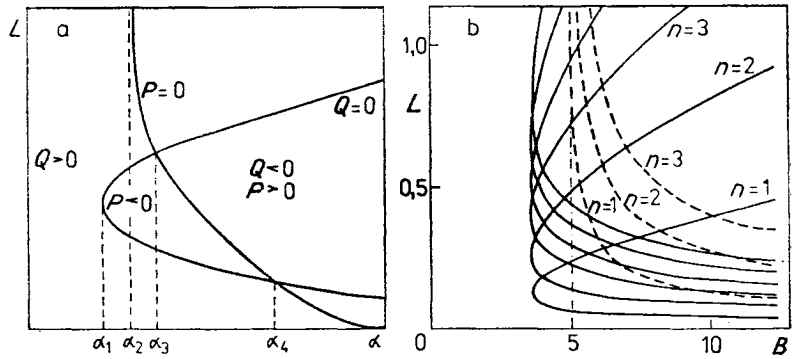


Рис. 6.10. Бифуркационная диаграмма первичных бифуркаций; *a*) общая схема, *b*) для *задачи* 11, $A = 2$, $D_x = 0{,}0016$, $D_y = 0{,}008$; сплошные линии — $Q = 0$, прерывистые — $P = 0$.

ментарной бифуркационной длиной; остальные бифуркационные длины оказываются кратными элементарным бифуркационным длинам.

Для значения L^+, при котором имеет место комплексная бифуркация, из соотношений (6.3.11) находим

$$L^+_{(1)} = \pi\left[\frac{D_x + D_y}{a_{11} + a_{22}}\right]^{1/2}, \quad Q_1(L^+_{(1)}) > 0. \quad (6.3.15)$$

Формула (6.3.14) остается справедливой и в этом случае, т. е.

$$L^{+}_{(n)} = nL^{+}_{(1)}. \tag{6.3.16}$$

Условия существования бифуркационных длин в зависимости от величины отношения D_x/D_y и коэффициентов a_{ij} приведены, например, в работе [5.10]. Если построить графики зависимостей величин L^* и L^+ от другого параметра задачи α, то мы получим бифуркационную диаграмму первичных бифуркаций. Такого рода бифуркационная диаграмма представлена схематически на рис. 6.10a. При $\alpha < \alpha_1$ не существует какой-либо бифуркационной длины, при $\alpha \in (\alpha_1, \alpha_2) \cup (\alpha_3, \alpha_4)$ имеются два значения $L^*_{(1)}$ а при $\alpha \in (\alpha_2, \alpha_3) \cup (\alpha_4, \infty)$ имеются два значения $L^*_{(1)}$ и одно значение $L^+_{(1)}$. На рис. 6.10b эта диаграмма изображена для *задачи* 11 (показаны также значения некоторых «кратных» бифуркационных длин $L_{(n)}$). Читатель может сравнить точки первичных бифуркаций на рис. 6.3 и 6.4 со значениями L на рис. 6.10b.

6.3.2. Нахождение точек вещественной бифуркации

Рассмотрим теперь две группы методов нахождения точек вторичных вещественных бифуркаций. (Эти методы, разумеется, пригодны и для нахождения точек первичной бифуркации, однако для этого случая выше описан более простой подход.) Первую группу составляют разностные методы, тогда как методы второй группы основываются на методе стрельбы.

6.3.2.1. Разностные методы

Рассмотрим для простоты краевую задачу (6.2.1), (6.2.2). Необходимым условием существования вещественной бифуркации является требование, чтобы линеаризованное уравнение

$$\delta'' - \frac{\partial f(z, y, y', \alpha)}{\partial y}\delta - \frac{\partial f(z, y, y', \alpha)}{\partial y'}\delta' = 0 \tag{6.3.17}$$

с граничными условиями

$$a_0\delta(0) + b_0\delta'(0) = 0, \quad a_1\delta(1) + b_1\delta'(1) = 0 \tag{6.3.18}$$

имело ненулевое решение. Если такое решение $\delta(z)$ существует, то $c\delta(z)$ также будет решением. Чтобы выделить одно конкретное решение, нужно некое условие нормировки. Одна из возможностей заключается в том, чтобы выбрать

$$\delta(0) = 1 \tag{6.3.19}$$

в случае, когда $b_0 \neq 0$. (Если $b_0 = 0$, то можно положить $\delta'(0) = 1$.) Уравнения (6.2.1), (6.3.17) вместе с граничными условиями (6.2.2), (6.3.18), (6.3.19) представляют собой нелинейную краевую задачу, число условий в которой на единицу превышает порядок системы. Это, однако, компенсируется тем, что параметр α мы рассматриваем в качестве неизвестной; решив краевую задачу, мы получим значение α, отвечающее вещественной бифуркации. Замена данной задачи соответствующими разностными формулами приводит к системе нелинейных (алгебраических) уравнений с почти ленточной схемой размещения (ленточный характер матрицы нарушает столбец, который соответствует неизвестной α). Результаты так проведенных расчетов для *задачи* 16 представлены в работе [6.10].

Другую возможность применения разностных методов можно продемонстрировать при нахождении точек поворота в *задаче* 17 [1]. Введем следующие обозначения:

$$f = \frac{\partial F}{\partial k}, \quad g = \frac{\partial G}{\partial k}, \quad h = \frac{\partial H}{\partial k}. \tag{6.3.20}$$

Продифференцировав уравнения (P17-16)—(P17-18) по переменной k, найдем

$$f'' = \sqrt{\mathrm{Re}}\,(hF' + Hf') + \mathrm{Re}\,(2Ff - 2Gg + 1), \tag{6.3.21a}$$

$$g'' = 2\,\mathrm{Re}\,(Fg + fG) + \sqrt{\mathrm{Re}}\,(g'H + G'h), \tag{6.3.21b}$$

$$h' = -2\sqrt{\mathrm{Re}}\,f, \tag{6.3.21c}$$

$$h(0) = f(0) = h(1) = f(1) = g(0) = 0, \quad g(1) = S'(k). \tag{6.3.21d}$$

В точке поворота (по параметру S) должно быть

$$\frac{dS}{dk} = 0, \quad \text{т. е. } g(1) = 0. \tag{6.3.22}$$

Таким образом мы получаем систему шести дифференциальных уравнений (P17-16), (P17-17), (P17-18), (6.3.21a), (6.3.21b), (6.3.21c) (имеющую суммарно десятый порядок) и двенадцать граничных условий (P17-19), (P17-20), (6.3.21d), (6.3.22). На

[1] Напомним, что в этой задаче: а) искомыми являются функции $F(z)$, $G(z)$, $H(z)$ и число K; б) в уравнение (P17-16)—(P17-18) входят два (безразмерных) параметра — число Рейнольдса Re и отношение угловых скоростей дисков S. Зафиксируем Re и будем искать «точку поворота» по параметру S. При приближении S к критическому значению S^* $k'(S) \sim \sim |S - S^*|^{-1/2} \to \infty$ $\left(\text{аналогично ведут себя } \frac{\partial F}{\partial S}, \frac{\partial G}{\partial S}, \frac{\partial H}{\partial S}\right)$.

Для S, близких к S^*, примем за параметр k и положим $S = S(k)$, $F = F(z, k)$ . . . . — *Прим. ред.*

первый взгляд задача переопределена; на самом деле это не так, поскольку кроме $f(z)$, $g(z)$, $h(z)$ ищутся значения двух неизвестных k и S.

Для решения указанной нелинейной краевой задачи использовались стандартные разностные замены на сетке с узлами $z_i = ih$, $i = 0, 1, \ldots, n$, $h = 1/n$ (аналогичные заменам вида

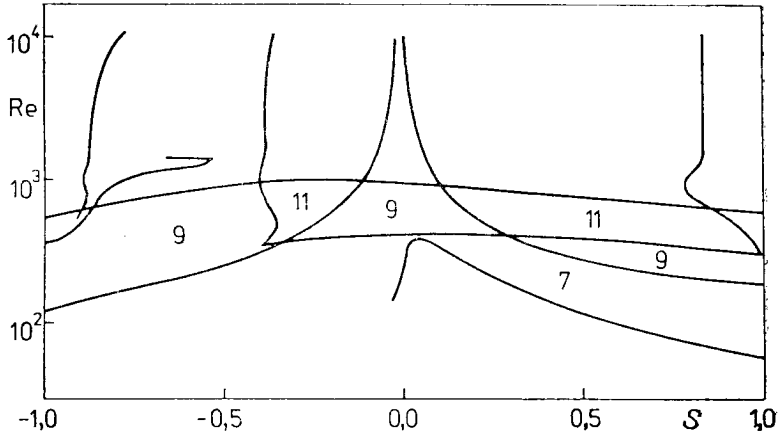


Рис. 6.11. Бифуркационная диаграмма *задачи* 17.

(6.1.23)). В частности, уравнению (6.3.21b) отвечает разностная система

$$\frac{g_{i-1} - 2g_i + g_{i+1}}{h^2} = 2\,\mathrm{Re}\,(F_i g_i + f_i G_i) + \\ + \sqrt{\mathrm{Re}}\left[\frac{g_{i+1} - g_{i-1}}{2h} H_i + \frac{G_{i+1} - G_{i-1}}{2h} h_i\right],$$

а уравнению (6.3.21c) — соотношения вида

$$\frac{h_i - h_{i-1}}{h} = -\sqrt{\mathrm{Re}}\,(f_i + f_{i-1}), \quad i = 1, 2, \ldots, n.$$

Если ввести вектор неизвестных величин

$$\mathbf{X} = (H_0, h_0, F_0, f_0, G_0, g_0, H_1, h_1, F_1, \ldots \\ \ldots, H_n, h_n, F_n, f_n, G_n, g_n, k, S) \qquad (6.3.23)$$

и подходящим образом упорядочить разностные уравнения, то мы получим систему $6(n-1)+2$ нелинейных уравнений

$$\varphi(\mathbf{X}) = 0 \qquad (6.3.24)$$

с матрицей размещения, близкой к 15-диагональной. Для решения системы (6.3.24) можно снова воспользоваться методом

Ньютона, а для решения систем линейных уравнений на каждой итерации использовать специальные алгоритмы для структурированных матриц. Размерность решаемых задач оказывается достаточно большой.

На рис. 6.11 приведена бифуркационная диаграмма в плоскости параметров Re и S, построенная с помощью описанного выше подхода. Эта бифуркационная диаграмма не является полной. В некоторых ее областях указано число решений *задачи* 17 при соответствующих значениях параметров Re и S. На рис. 6.11 при $\mathrm{Re}=625$ легко найти все шесть точек поворота, указанных на рис. 6.2.

6.3.2.2. Метод стрельбы

Опишем кратко этот метод на примере системы «реакция — диффузия» (6.1.1), (6.1.2) с граничными условиями типа 2, т. е. с условиями (6.1.4). Выбирая η в (6.1.24) и используя условия (6.1.4a), мы можем решить задачу Коши для уравнений (6.1.1), (6.1.2) на промежутке от точки $z=0$ до точки $z=1$, где нам нужно удовлетворить условию (6.1.4b), т. е. соотношению (6.2.32). Если ввести матрицу Якоби

$$\mathbf{J}(\eta, L)=\left[\frac{\partial F_i}{\partial \eta_k}\right], \tag{6.3.25}$$

то, в соответствии с п. 5.4.1, необходимым условием вещественной бифуркации будет выполнение соотношения

$$F_3(\eta_1, \eta_2, L)=\det \mathbf{J}(\eta, L)=0 \text{ [1]}. \tag{6.3.26}$$

Преимуществом метода стрельбы является то обстоятельство, что бифуркационное условие (6.3.26) записывается в пространстве меньшей размерности. Используя теперь формулу (6.1.29), перепишем (6.3.26) в виде

$$F_3(\eta_1, \eta_2, L)=p'_{x1}(1)\,p'_{y2}(1)-p'_{x2}(1)\,p'_{y1}(1)=0. \tag{6.3.27}$$

Точно так же, как и в п. 5.4.1, мы будем рассматривать уравнения (6.2.32), (6.3.27) как систему трех нелинейных уравнений относительно трех неизвестных η_1, η_2 и L («координат» точки вещественной бифуркации). Для решения этой системы

---

[1] Действительно, если $\mathbf{J}\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}=0$, то существует ненулевое решение (φ, ψ) линеаризованной задачи:

$$\varphi(z)=a\frac{\partial x}{\partial \eta_1}+b\frac{\partial x}{\partial \eta_2};\quad \psi(z)=a\frac{\partial y}{\partial \eta_1}+b\frac{\partial y}{\partial \eta_2}.$$

— *Прим. ред.*

можно воспользоваться, например, методом Ньютона. Матрица Якоби для метода Ньютона вычисляется следующим образом. Из соотношений (6.1.29), (6.2.37) найдем значения производных $\partial F_i/\partial\eta_1$, $\partial F_i/\partial\eta_2$, $\partial F_i/\partial L$, $i=1, 2$. Производные для $i=3$ можно получить, либо используя разностные формулы, либо с помощью вариационных переменных второго порядка

$$p_{xij}=\frac{\partial^2 x}{\partial\eta_i\,\partial\eta_j}, \quad p_{xiL}=\frac{\partial^2 x}{\partial\eta_i\,\partial L},$$
$$p_{yij}=\frac{\partial^2 y}{\partial\eta_i\,\partial\eta_j}, \quad p_{yiL}=\frac{\partial^2 y}{\partial\eta_i\,\partial L}.$$

Дифференцируя уравнения в вариациях (6.1.27) по η_1, η_2 и L, можно получить дифференциальные уравнения для этих переменных и соответствующие начальные условия.

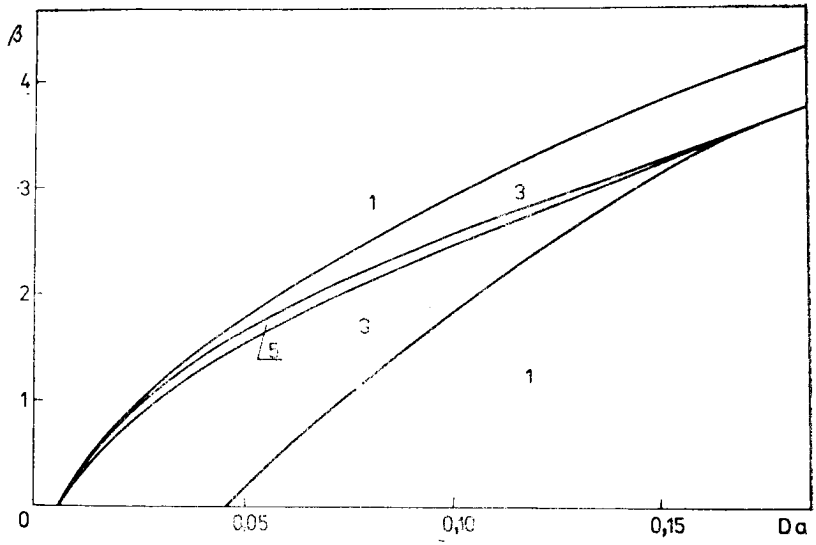


Рис. 6.12. Бифуркационная диаграмма для *задачи* 14; $\gamma=20$, $Pe_M=10$, $Pe_H=5$, $B=15$, $\Theta_c=0$. В отдельных областях указано число решений.

Для нахождения точки ветвления (см. п. 5.4.1) потребуем, помимо выполнения соотношений (6.2.32), (6.3.27), чтобы было выполнено также уравнение

$$F_4(\eta_1, \eta_2, L)=\det\bar{\mathbf{G}}(\eta, L)=p'_{x1}(1)\,p'_{yL}(1)-$$
$$-p'_{xL}(1)\,p'_{y1}(1)=0, \qquad (6.3.28)$$

где матрица $\bar{\mathbf{G}}$ получается из матрицы (6.2.33) вычеркиванием среднего столбца. Для решения системы четырех уравнений

(6.2.32), (6.3.27), (6.3.28), так же как в п. 5.4.1, используется метод Гаусса — Ньютона. Приложение указанного подхода к *задаче* 11 читатель может найти в работе [5.10].

Продемонстрируем использование этого метода для нахождения точек поворота в *задаче* 14 в случае, когда параметром является число Da. Таким образом, нас будет интересовать нахождение $y(z)$, $\Theta(z)$ — решения краевой задачи (6.1.35), (6.1.36). Недостающие начальные условия в точке $z=1$ выберем как в (6.1.37): $y(1)=\eta_1$, $\Theta(1)=\eta_2$. Требуя выполнения краевых условий в точке $z=0$ (см. 6.1.36а), мы получаем два уравнения:

$$F_1(\eta_1, \eta_2, \mathrm{Da}) \stackrel{\mathrm{def}}{=} \mathrm{Pe_M} y(0) - y'(0) = 0,$$

$$F_2(\eta_1, \eta_2, \mathrm{Da}) \stackrel{\mathrm{def}}{=} \mathrm{Pe_H} \Theta(0) - \Theta'(0) = 0$$

(см. 6.2.41). Третье, бифуркационное уравнение здесь имеет вид (ср. с (6.2.42)):

$$F_3(\eta, \mathrm{Da}) = (\mathrm{Pe_M} p_{y1}(0) - p'_{y1}(0))(\mathrm{Pe_H} p_{\Theta 2}(0) - p'_{\Theta 2}(0)) - \\ - (\mathrm{Pe_H} p_{\Theta 1}(0) - p'_{\Theta 1}(0))(\mathrm{Pe_M} p_{y2}(0) - p'_{y2}(0)) = 0. \quad (6.3.29)$$

Результаты, полученные при решении этих 3 уравнений методом Ньютона (с использованием уравнений второго порядка в вариациях), приведены в табл. 6.10. Читатель может сравнить координаты полученных точек поворота с данными рис. 6.8. Если продолжить теперь полученные координаты точек поворота в зависимости от какого-либо другого параметра задачи, то мы получим соответствующую бифуркационную диаграмму. Пример такого продолжения по параметру представлен на рис. 6.12 в плоскости параметров Da — β [6.18][1)]

6.3.3. Нахождение точек комплексной бифуркации (бифуркации Андронова — Хопфа)

Нахождение точек комплексной бифуркации для тривиального пространственно-однородного решения рассматривалось нами в п. 6.3.1. В этом пункте мы займемся нахождением точек комплексной бифуркации на нетривиальных ветвях стационарных решений[2)]. Наиболее простым методом является здесь

[1)] Точный смысл сказанного таков. Разрешив меняться β, мы получаем систему $F_i(\eta_1, \eta_2, \mathrm{Da}, \beta) = 0$ ($i = 1, 2, 3$). Ее решение определяет кривую в пространстве (η_1, η_2, Da, β), связные компоненты которой можно находить, используя какой-либо «алгоритм продолжения». Проекция найденной кривой на плоскость (Da, β) дает часть линий бифуркационной диаграммы. — *Прим. ред.*

[2)] Мы называем эти точки точками вторичной комплексной бифуркации.

Таблица 6.10. Метод Ньютона для определения точек поворота в *задаче* 14 ($\gamma = 20$, $B = 15$, $\beta = 2$, $\Theta_c = 0$, $Pe_м = 10$, $Pe_н = 5$)

Итерация	η_1	η_2	Da
0	0,9900	3,5000	0,06000
1	0,9876	3,4704	0,05998
2	0,9872	3,4709	0,05989
3	0,9872	3,4709	0,05989
0	0,8000	7,0000	0,07000
1	0,8646	7,3348	0,06566
2	0,8614	7,1811	0,06734
3	0,8610	7,1773	0,06735
4	0,8610	7,1773	0,06735
0	0,9500	6,0000	0,07000
1	0,9604	5,7672	0,07320
2	0,9590	5,7649	0,07333
3	0,9590	5,7637	0,07332
4	0,9590	5,7637	0,07332
0	0,5000	5,0000	0,10000
1	0,4399	3,3693	0,11790
2	0,3326	2,2190	0,11391
3	0,3261	2,2714	0,10548
4	0,3261	2,2706	0,10575
5	0,3261	2,2706	0,10575

метод имитации динамического поведения для последовательности значений исследуемого параметра. Начальные условия при этом выбираются в достаточно малой окрестности стационарного решения. При таком подходе можно обнаружить потерю устойчивости стационарного решения в процессе продолжения этого решения по параметру. Ясно, что указанным способом можно находить только те точки комплексной бифуркации, в которых (при продвижении вдоль ветви стационарных решений) стационарное решение теряет устойчивость.

6.3.3.1. *Метод прямых — переход к системе с сосредоточенными параметрами*

Другой, более общий подход к нахождению точек комплексной бифуркации основан на полудискретизации исходных дифференциальных уравнений в частных производных, т. е. их аппроксимации посредством систем обыкновенных дифференци-

альных уравнений, методы анализа которых рассматривались в гл. 5.

Рассмотрим, к примеру, систему типа «реакция — диффузия» (4.3.7) с граничными условиями типа 1 (см. (4.3.9)). Выберем равномерную сетку узловых точек ($z_i = ih$, $i = 0, 1, \ldots, n$, $h = 1/n$) и обозначим приближенные значения решения в этих точках как

$$x_i(t) \sim x(z_i, t), \quad y_i(t) \sim y(z_i, t). \tag{6.3.30}$$

Аппроксимируем теперь производные по координате z с помощью простейших (трехточечных) разностных формул. Мы получим систему обыкновенных дифференциальных уравнений для $i = 1, 2, \ldots, n-1$:

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{D_x}{L^2h^2}(x_{i-1} - 2x_i + x_{i+1}) + f(x_i, y_i), \tag{6.3.31a}$$

$$\frac{dy_i}{dt} = \frac{D_y}{L^2y^2}(y_{i-1} - 2y_i + y_{i+1}) + g(x_i, y_i).$$

Граничные условия (4.3.9) дают

$$x_0(t) \equiv \bar{x}, \quad x_n(t) \equiv \bar{x}, \quad y_0(t) \equiv \bar{y}, \quad y_n(t) \equiv \bar{y}. \tag{6.3.31b}$$

Таким образом, мы имеем систему $2(n-1)$ обыкновенных дифференциальных уравнений, для решения которой можно использовать методы, рассмотренные в § 5.5. Система (6.3.31a, b) представляет собой некоторую аппроксимацию исходной «распределенной» системы. Погрешность аппроксимации зависит от h и имеет порядок $O(h^2)$. При уменьшении h (т. е. с увеличением точности аппроксимации) возрастают размеры системы (6.3.31) и возникают трудности с вычислением собственных чисел соответствующих матриц. Поэтому описываемый подход применим лишь для не очень точного нахождения точек комплексной бифуркации, хотя в некоторых случаях даже при сравнительно большом шаге h он дает вполне удовлетворительные результаты. Дискретизацию по координате z можно проводить и с помощью более точных формул, например посредством ортогональной коллокации. Читателя, который более глубоко заинтересуется применением метода прямых для нахождения точек комплексной бифуркации, мы отсылаем к оригинальным работам [6.19, 6.20, 6.21, 6.22].

6.3.3.2. Прямой итерационный метод

Третьим подходом к определению точек комплексной бифуркации, который мы здесь рассмотрим, является прямой итерационный метод. Этот метод (при подходящей его реали-

зации) позволяет находить точку комплексной бифуркации гораздо точнее. Результаты, полученные с помощью первых двух подходов, удобно использовать в качестве начального приближения для прямого итерационного метода. Обратимся вновь к системе (4.3.7) с граничными условиями типа 1, т. е. условиями $x(0,t)=x(1,t)\equiv\bar{x}$; $y(0,t)=y(1,t)\equiv\bar{y}$ (см. (4.3.9)). Обозначим через $\mathscr{L}$ линеаризованный оператор правых частей уравнений (4.3.7) и вычислим его для стационарного решения $x_0(z)$, $y_0(z)$, т. е. для решения уравнений (6.1.1), (6.1.2). Вид оператора $\mathscr{L}$ задается выражением (6.3.2) $\left(a_{11}=\frac{\partial f}{\partial x}(x_0(z),\ y_0(z))\right.$ и т. д.$\left.\right)$.

В точке комплексной бифуркации оператор $\mathscr{L}$ имеет чисто мнимое собственное число $\lambda=is$ и, следовательно, имеется ненулевое решение $\mathbf{u}$ уравнения

$$\mathscr{L}\mathbf{u}=is\mathbf{u};\quad \mathbf{u}=\begin{pmatrix} v \\ w \end{pmatrix}. \tag{6.3.32}$$

Положим $\mathbf{u}=\mathbf{u}_R+i\mathbf{u}_I$, $v=v_R+iv_I$ и $w=w_R+iw_I$. Отделяя теперь вещественную и мнимую части в соотношении (6.3.32), находим

$$\mathscr{L}\mathbf{u}_R=-s\mathbf{u}_I, \tag{6.3.33}$$
$$\mathscr{L}\mathbf{u}_I=s\mathbf{u}_R,$$

или, более подробно,

$$\begin{aligned} v_R''+\frac{L^2}{D_x}\left[\frac{\partial f}{\partial x}v_R+\frac{\partial f}{\partial y}w_R\right]&=-sv_I,\\ v_I''+\frac{L^2}{D_x}\left[\frac{\partial f}{\partial x}v_I+\frac{\partial f}{\partial y}w_I\right]&=sv_R,\\ w_R''+\frac{L^2}{D_y}\left[\frac{\partial g}{\partial x}v_R+\frac{\partial g}{\partial y}w_R\right]&=-sw_I,\\ w_I''+\frac{L^2}{D_y}\left[\frac{\partial g}{\partial x}v_I+\frac{\partial g}{\partial y}w_I\right]&=sw_R. \end{aligned} \tag{6.3.34}$$

Граничные условия для функций v_R, v_I, w_R, w_I с учетом формул (4.3.9) имеют вид

$$v_R(0)=v_I(0)=w_R(0)=w_I(0)=0, \tag{6.3.35}$$
$$v_R(1)=v_I(1)=w_R(1)=w_I(1)=0. \tag{6.3.36}$$

Собственная функция $\mathbf{u}=(v,w)$ определена с точностью до ненулевого комплексного множителя. Это означает, что для функций $v(z)$ и $w(z)$ мы можем достаточно произвольно задать два фиксированных ненулевых значения. Двумя возмож-

ными примерами такого выбора могут служить условия

$$v_R\left(\frac{1}{2}\right)=1, \quad w_I\left(\frac{1}{2}\right)=1 \tag{6.3.37a}$$

или

$$v_R'(0)=1, \quad w_I'(0)=1. \tag{6.3.37b}$$

Читатель сам может предложить другие комбинации.

Таким образом, мы получили систему обыкновенных дифференциальных уравнений (6.1.1), (6.1.2), (6.3.34) (суммарно 12-го порядка) с 14-ю граничными условиями (4.3.9), (6.3.35)—(6.3.37) и с двумя параметрами s, L, которые нам предстоит определить в точке комплексной бифуркации. Число уравнений «согласовано» с числом неизвестных, и описанную задачу можно пытаться решать либо с помощью разностных методов, либо методом стрельбы. Рассмотрим здесь оба этих подхода.

Разностный подход. Заменим вторые производные простейшими трехточечными центрально-разностными соотношениями. В результате вместо уравнений (6.1.1), (6.1.2) и (6.3.34) мы получим следующую систему (ср. с (6.3.31)):

$$\begin{gathered}
x_{i-1}-2x_i+x_{i+1}+\frac{L^2h^2}{D_x}f_i=0, \quad f_i=f(x_i, y_i),\\
y_{i-1}-2y_i+y_{i+1}+\frac{L^2h^2}{D_y}g_i=0, \quad g_i=g(x_i, y_i),\\
v_{R,\,i-1}-2v_{R,\,i}+v_{R,\,i+1}+\frac{L^2h^2}{D_x}(f_{x,\,i}v_{R,\,i}+f_{y,\,i}w_{R,\,i})=-sv_{I,\,i},\\
w_{I,\,i-1}-2w_{I,\,i}+w_{I,\,i+1}+\frac{L^2h^2}{D_y}(g_{x,\,i}v_{I,\,i}+g_{y,\,i}w_{I,\,i})=sw_{R,\,i},
\end{gathered} \tag{6.3.38}$$

где $i=1, \ldots, n-1$.

Дополним эту систему очевидными граничными условиями:

$$x_0=x_n=\bar{x}, \quad y_0=y_n=\bar{y}, \quad v_{R,\,0}=v_{I,\,0}=w_{R,\,0}=w_{I,\,0}=0;$$
$$v_{R,\,n}=v_{I,\,n}=w_{R,\,n}=w_{I,\,n}=0.$$

Тем самым мы получим систему $6(n+1)$ нелинейных (алгебраических) уравнений относительно $6(n+1)+2$ неизвестных

$$x_i, \; y_i, \; v_{R,\,i}, \; v_{I,\,i}, \; w_{R,\,i}\; w_{I,\,i}, \quad (i=0, \ldots, n), \; s, \; L.$$

В качестве двух недостающих условий можно, например, взять соотношения (6.3.37a). Полученную в результате систему $6(n+1)+2$ нелинейных алгебраических уравнений можно решать с помощью метода Ньютона.

В п. 6.3.3.1 мы рассмотрели аппроксимацию исходных дифференциальных уравнений в частных производных системой

обыкновенных дифференциальных уравнений с помощью метода прямых. Точку комплексной бифуркации для этой аппроксимирующей системы (6.3.31) можно найти с помощью одного из методов, описанных в параграфе 5.5. При этом, если воспользоваться для решения указанной системы прямым итерационным методом в его несокращенной версии, которая была описана в п. 5.5.3, то нетрудно показать, что получающаяся нелинейная (алгебраическая) система имеет тот же самый вид, что и система (6.3.38), если подходящим образом выбрать для нее граничные условия[1]. Это утверждение читатель может легко проверить самостоятельно.

Метод стрельбы. Этот подход мы продемонстрируем на примере *задачи* 14, т. е. уравнений (P14-7), (P14-8) с граничными условиями (P14-9), (P14-10). Правые части этих уравнений отличаются от правых частей уравнений (4.3.7) членами с первой производной; кроме того, имеются различия и в граничных условиях (представляющих собой комбинацию граничных условий 1-го и 2-го рода). В качестве бифуркационного параметра выберем параметр Da и положим Le = 1.

Обозначим $E=(1-y)\exp(\Theta/(1+\Theta/\gamma))$ и запишем уравнения, которым должны удовлетворять стационарные решения

$$\begin{gathered}\frac{1}{\mathrm{Pe_M}}y''-y'+\mathrm{Da}\,E=0,\\ \frac{1}{\mathrm{Pe_H}}\Theta''-\Theta'+B\,\mathrm{Da}\,E-\beta(\Theta-\Theta_c)=0.\end{gathered}\tag{6.3.39}$$

Граничные условия при этом имеют вид

$$y'(0)-\mathrm{Pe_M}y(0)=0,\quad \Theta'(0)-\mathrm{Pe_H}\Theta(0)=0,\tag{6.3.40a}$$

$$y'(1)=0,\quad \Theta'(1)=0.\tag{6.3.40b}$$

Уравнения (6.3.33) для этого случая (в компонентах v, w) записываются так:

$$\frac{1}{\mathrm{Pe_M}}v_\mathrm{R}''-v_\mathrm{R}'+\mathrm{Da}\left[\frac{\partial E}{\partial y}v_\mathrm{R}+\frac{\partial E}{\partial\Theta}w_\mathrm{R}\right]=-sv_\mathrm{I},\tag{6.3.41}$$

$$\frac{1}{\mathrm{Pe_M}}v_\mathrm{I}''-v_\mathrm{I}'+\mathrm{Da}\left[\frac{\partial E}{\partial y}v_\mathrm{I}+\frac{\partial E}{\partial\Theta}w_\mathrm{I}\right]=sv_\mathrm{R},$$

$$\frac{1}{\mathrm{Pe_H}}w_\mathrm{R}''-w_\mathrm{R}'+B\,\mathrm{Da}\left[\frac{\partial E}{\partial y}v_\mathrm{R}+\frac{\partial E}{\partial\Theta}w_\mathrm{R}\right]-\beta w_\mathrm{R}=-sw_\mathrm{I},$$

$$\frac{1}{\mathrm{Pe_H}}w_\mathrm{I}''-w_\mathrm{I}'+B\,\mathrm{Da}\left[\frac{\partial E}{\partial y}v_\mathrm{I}+\frac{\partial E}{\partial\Theta}w_\mathrm{I}\right]-\beta w_\mathrm{I}=sw_\mathrm{R}.$$

---

[1] Имеются в виду дополнительные уравнения типа (6.3.37). — *Прим. ред.*

Граничные условия для функций v и w получаются из условий (6.3.40) в виде

$$v'_R(0) - \mathrm{Pe}_M v_R(0) = 0, \quad v'_I(0) - \mathrm{Pe}_M v_I(0) = 0,$$
$$w'_R(0) - \mathrm{Pe}_H w_R(0) = 0, \quad w'_I(0) - \mathrm{Pe}_H w_I(0) = 0, \tag{6.3.42a}$$

$$v'_R(1) = 0, \quad v'_I(1) = 0,$$
$$w'_R(1) = 0, \quad w'_I(1) = 0. \tag{6.3.42b}$$

Для решения системы шести дифференциальных уравнений второго порядка (6.3.39), (6.3.41) воспользуемся методом стрельбы. Недостающие начальные условия выберем в точке $z = 1$ (это связано с тем, что соответствующие задачи Коши неустойчивы, если двигаться от точки $z = 0$ к точке $z = 1$, см. п. 6.1.2):

$$y(1) = \eta_1, \quad \Theta(1) = \eta_2, \quad v_R(1) = \eta_3, \quad v_I(1) = \eta_4,$$
$$w_R(1) = \eta_5, \quad w_I(1) = \eta_6. \tag{6.3.43}$$

Вместе с условиями (6.3.40b) и (6.3.42b) мы получаем 12 начальных условий, необходимых для интегрирования уравнений (6.3.39) и (6.3.41). Поскольку собственная функция

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}_R + i\mathbf{u}_I = (v_R, w_R) + i(v_I, w_I)$$

определена с точностью до ненулевого комплексного множителя, для функций $\mathbf{u}_R$ и $\mathbf{u}_I$ можно зафиксировать два каких-либо конкретных значения; например, можно задать $v_R(1) = v_I(1) = 1$ (т. е. положить в (6.3.43) $\eta_3 = \eta_4 = 1$). В точке $z = 0$ мы получаем шесть нелинейных уравнений (6.3.40a) и (6.3.42a) относительно шести неизвестных η_1, η_2, η_5, η_6, s и Da. Эту систему можно решать методом Ньютона, причем матрица Якоби вычисляется с помощью уравнений в вариациях, либо исходя из соответствующих разностных формул. Пример сходимости метода Ньютона к точке комплексной бифуркации представлен в табл. 6.11. При этом соответствующие итерации сходятся к точке, которая лежит на ветви решений с высокой выходной степенью конверсии $y(1)$ (ср. качественно близкую диаграмму решений на рис. 6.8 для аналогичных значений параметров). В указанной точке стационарное решение (при убывании Da) теряет устойчивость, и от него отходит ветвь устойчивых периодических решений (см. п. 6.5.1). Описанный здесь прямой итерационный метод был рассмотрен на примере двух уравнений (4.3.7) (или, соответственно, (P14-7), (P14-8)). Метод легко обобщается на задачи с бóльшим числом уравнений, но размерность возникающих при этом (конечномерных) задач, очевидно, возрастает.

Таблица 6.11. Пример сходимости метода Ньютона к точке комплексной бифуркации для *задачи* 14 ($\gamma \to \infty$, $B = 12$, $\beta = 2$, $\Theta_c = 0$, $\mathrm{Pe_H} = 2$, $\mathrm{Pe_M} = 2$, $\mathrm{Le} = 1$).

Итерация	η_1	η_2	η_3	η_4	η_5	η_6	Da	s	Сумма квадратов невязок уравнений (6.3.40а). (6.3.42а)
0	0,9900	2,6000	1	1	−9,0000	1,0000	0,2600	7,0000	3,3E7
1	0,9923	3,1587	1	1	−3,9680	−12,0688	0,0994	4,7500	4,3E6
2	0,9957	3,1113	1	1	0,9959	15,0972	0,1365	3,9104	2,8E5
3	0,9944	3,1163	1	1	0,2184	7,8562	0,1367	5,4697	1,7E5
4	0,9923	3,1415	1	1	0,3002	10,8979	0,1293	5,3730	2,3E4
5	0,9906	3,1587	1	1	0,3355	10,8468	0,1267	5,2133	1,8E3
6	0,9897	3,1677	1	1	0,3453	10,7580	0,1256	5,1172	4,2E1
7	0,9895	3,1697	1	1	0,3452	10,7350	0,1254	5,0866	9,5E−2
8	0,9895	3,1698	1	1	0,3450	10,7331	0,1254	5,0843	2,1E−5
9	0,9895	3,1698	1	1	0,3450	10,7330	0,1254	5,0843	3,7E−9

6.4. МЕТОДЫ ДИНАМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ПАРАБОЛИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ [1)]

Для решения нелинейных дифференциальных уравнений с частными производными параболического типа существует целый ряд численных методов. В большинстве случаев они представляют собой различные варианты конечно-разностных методов, метода прямых и метода конечных элементов. Наряду со специальными работами имеется много учебников и монографий, посвященных численным методам решения дифференциальных уравнений с частными производными [6.23—6.28]. Ниже мы лишь кратко опишем основные конечно-разностные подходы и обсудим проблему их эффективной алгоритмизации. Все рассмотрение будет проведено на примере системы типа «реакция—диффузия» (4.3.7), т. е. для случая одной пространственной переменной.

В полуполосе $0 \leqslant z \leqslant 1$, $0 \leqslant t < \infty$ выберем равномерную сетку узловых точек (z_i, t_j);

$$z_i = ih, \quad i = 0, 1, \ldots, n, \quad h = 1/n,$$
$$t_j = j\tau, \quad j = 0, 1, 2, \ldots, \quad \tau > 0. \tag{6.4.1}$$

[1)] Имеется в виду численное моделирование динамики, т. е. численное решение задачи Коши (точнее, задачи с начальными и краевыми условиями). — *Прим. ред.*

Значения приближенного решения в этих узловых точках будем обозначать как

$$x_i^j \sim x(z_i, t_j), \quad y_i^j \sim y(z_i, t_j). \tag{6.4.2}$$

Наиболее часто используется шеститочечная разностная схема типа Кранка — Николсона. Для системы (4.3.7) она дает:

$$\frac{1}{\tau}(x_i^{j+1} - x_i^j) = \frac{D_x w}{L^2 h^2}(x_{i-1}^{j+1} - 2x_i^{j+1} + x_{i+1}^{j+1}) + \\ + \frac{D_x(1-w)}{L^2 h^2}(x_{i-1}^j - 2x_i^j + x_{i+1}^j) + f_i^{j+w}, \tag{6.4.3a}$$

$$\frac{1}{\tau}(y_i^{j+1} - y_i^j) = \frac{D_y w}{L^2 h^2}(y_{i-1}^{j+1} - 2y_i^{j+1} + y_{i+1}^{j+1}) + \\ + \frac{D_y(1-w)}{L^2 h^2}(y_{i-1}^j - 2y_i^j + y_{i+1}^j) + g_i^{j+w}. \tag{6.4.3b}$$

Формулы (6.4.3) включают в себя явную схему ($w = 0$), чисто неявную схему ($w = 1$) (обе с погрешностью аппроксимации порядка $O(\tau + h^2)$), а также классическую схему Кранка — Николсона с погрешностью аппроксимации порядка $O(\tau^2 + h^2)$ ($w = 1/2$)[1]. В случае граничных условий 1 рода естественно положить при всех j

$$x_0^{j+1} = \bar{x}, \quad x_n^{j+1} = \bar{x}; \quad y_0^{j+1} = \bar{y}, \quad y_n^{j+1} = \bar{y}. \tag{6.4.4}$$

При этом формулы (6.4.3) записываются для $i = 1, 2, \ldots, n-1$. В случае граничных условий второго рода (ГУ2) уравнения (6.4.3) рассматриваются для $i = 0, 1, \ldots, n$, а граничные условия (4.3.12) заменяются соотношениями

$$x_{-1}^{j+1} = x_1^{j+1}, \quad x_{n+1}^{j+1} = x_{n-1}^{j+1}; \quad y_{-1}^{j+1} = y_1^{j+1}, \quad y_{n+1}^{j+1} = y_{n-1}^{j+1}. \tag{6.4.5}$$

Схема (6.4.3) является одношаговой по переменной t, а это значит, что новый слой $j+1$ можно вычислить исходя из старого слоя j. Это значит, что значения f^{j+w} и g^{j+w} зависят только от x^j, x^{j+1}, y^j и y^{j+1}. Явная схема ($w = 0$) представляет собой наиболее простой случай, поскольку значения неизвестных функций на новом слое (с верхним индексом $j+1$) непосредственно выражаются через значения на старом слое (с верхним индексом j). При этом нелинейные члены f_i^j и g_i^j легко аппроксимируются подстановкой значений x_i^j и y_i^j в функции f и g. Вместе с тем, в случае явной схемы должно выполняться условие численной устойчивости, накладывающее определенные

[1] Справедливость этих утверждений зависит от того, как определены f^{j+w} и g^{j+w}. — *Прим. ред.*

ограничения на величину шага τ, а именно

$$\tau \leqslant \min\left(\frac{L^2h^2}{2D_x}, \frac{L^2h^2}{2D_y}\right). \tag{6.4.6}$$

Эффективность указанной явной схемы может оказаться довольно низкой, если из условия (6.4.6) приходится выбирать очень малый шаг τ.

При $w \neq 0$ соотношение (6.4.3) представляет собой уже систему уравнений относительно неизвестных с верхним индексом $j+1$. Такой метод называется неявным. При $w \geqslant 1/2$ метод оказывается численно устойчивым, причем длина шага τ ничем не ограничивается. Записав нелинейные члены f_i^{j+w}, g_i^{j+w} в уравнениях (6.4.3) в виде

$$f_i^{j+w} \sim f\left(wx_i^{j+1} + (1-w)\,x_i^j,\quad wy_i^{j+1} + (1-w)\,y_i^j\right) \tag{6.4.7}$$

(член g_i^{j+w} записывается аналогично), мы получаем систему $2n+2$ нелинейных уравнений, которую можно решать итерациями (например, методом Ньютона). Поскольку у нас имеется хорошее начальное приближение (а именно значения на старом слое j), обыкновенно оказывается достаточным одной-двух итераций. Метод Ньютона предпочтительнее использовать при анализе быстрых химических реакций (т. е. тогда, когда производные f и g велики. — *Ред.*). При этом число итераций может оказаться более высоким. Для вычисления нового слоя используются также неитерационные подходы, в которых нелинейные члены аппроксимируются иначе — исходя из уже найденных значений неизвестных. По существу в таких подходах мы имеем дело с одной итерацией, проводимой каким-либо методом, аналогичным методу Ньютона.

Остановимся на этом вопросе несколько подробнее.

6.4.1. Замена нелинейных членов

Простейшая разностная замена нелинейных членов в схеме (6.4.3) заключается в использовании линеаризации по x^{j+1} и y^{j+1}, т. е. для члена f_i^{j+w} мы полагаем

$$f_i^{j+w} \sim a_i^j + b_i^j x_i^{j+1} + c_i^j y_i^{j+1}, \tag{6.4.8}$$

где коэффициенты a_i^j, b_i^j, c_i^j зависят от известных значений решения на старом (j-м) слое. Так, например, при $w=1$ член

$(x_i^{j+1})^2$ можно заменить[1] произведением $(x_i^{j+1} \cdot x_i^j)$; точно так же $(x_i^{j+1})^3 \sim (x_i^j)^2 x_i^{j+1}$. При $w = 1/2$ член $(x_i^{j+1/2})^2$ можно заменить выражением $[(x_i^j + x_i^{j+1})/2]^2 \sim \frac{1}{4}[(x_i^j)^2 + 2x_i^j x_i^{j+1} + x_i^j x_i^{j+1}]$. Довольно часто используется еще более простая замена

$$f_i^{j+w} \sim f_i^j. \tag{6.4.9}$$

Если функции f и g легко продифференцировать аналитически, то можно воспользоваться формулой Тейлора, т. е. (например, для f_i^{j+w}) положить[2] (ср. с (6.4.7))

$$f_i^{j+w} \sim f_i^j + \frac{\partial f}{\partial x}\Big|_i^j (x_i^{j+w} - x_i^j) + \frac{\partial f}{\partial y}\Big|_i^j (y_i^{j+w} - y_i^j).\ ^{3)} \tag{6.4.10}$$

Здесь $x_i^{j+w} \sim w x_i^{j+1} + (1 - w) x_i^j$ (аналогично определяется y_i^{j+w}).

Если аналитическое дифференцирование f и g оказывается сложным, используются процедуры экстраполяции, при которых значение x_i^{j+w} для вычисления f_i^{j+w} получают экстраполяцией, исходя из значений на нескольких предыдущих слоях (с верхними индексами $j, j-1, \ldots$). Например, полагают

$$x_i^{j+w} \sim (1 + w) x_i^j - w x_i^{j-1}, \tag{6.4.11}$$

$$x_i^{j+w} \sim [1 + 1{,}5w + 0{,}5w^2] x_i^j - (w^2 + 2w) x_i^{j-1} + 0{,}5 (w^2 + w) x_i^{j-2}. \tag{6.4.12}$$

Недостатком такого подхода является необходимость сохранять несколько старых слоев, а также необходимость какой-либо другой аппроксимации в начале расчета, поскольку алгоритм по-существу является многошаговым.

Еще одним часто используемым методом аппроксимации нелинейных членов является комбинация явной схемы с шагом $w\tau$ в качестве предиктора с последующим использованием неявной схемы при $w \neq 0$ в качестве корректора. При этом для вычисления нелинейностей используются значения неизвестных, найденные с помощью предиктора.

---

[1] Здесь имеется в виду, что $f(x, y)$ (или $g(x, y)$) содержит слагаемое x^2, и обсуждается, какое слагаемое можно ввести в определение величины f^{j+w}. — *Прим. ред.*

[2] Разумно *сначала* определить f^{j+w} по (6.4.7) и *потом* оставить только первые члены тейлоровского разложения. По существу об этом уже шла речь (см. абзац после формулы (6.4.7)). — *Прим. ред.*

[3] Здесь имеется в виду, что (по определению) $f_i^{j+w} = f(x_i^{j+w}, y_i^{j+w})$ *Прим. ред.*

6.4.2. Автоматическое изменение шага по времени

Нахождение значений на одном слое при больших n может потребовать много вычислений, в связи с чем часто оказывается выгодным регулировать длину шага по времени τ в зависимости от требуемой точности решения. Характер самого решения и его вариаций во времени может изменяться, а вместе с ними будет существенно изменяться и шаг τ, который обеспечивает заданную точность. В связи с этим включение в алгоритм изменения шага по времени может значительно повысить эффективность используемой схемы. Основная проблема при этом — оценка погрешности решения, вызванной дискретизацией по переменной t. Отметим, что используемые подходы носят эвристический характер. Опишем здесь три подхода.

a) Сравнение значений решения на новом слое, полученных с шагом τ $(x^{j+1(\tau)})$, со значениями, полученными с помощью двух шагов длиной $\tau/2$ $(x^{j+1(\tau/2)})$. В этом случае оценкой погрешности с целью регулирования шага может служить величина [1]

$$E_x = \| x^{j+1(\tau)} - x^{j+1(\tau/2)} \| \tag{6.4.13}$$

(аналогичная формула записывается для E_y). Для более тонкой оценки E можно также использовать экстраполяцию по Ричардсону [6.10]. Если действовать так, то для одного удачного и контролируемого шага τ нам потребуется сделать три «пробных» шага. По этой причине указанный подход используется сравнительно редко и в большинстве случаев после нескольких постоянных (т. е. не регулируемых) шагов по времени.

b) Оценка различия между экстраполированным значением x^{j+w}, найденным с помощью формул (6.4.11) или (6.4.12), и вычисленным значением x^{j+w}:

$$E_x = \max_i \left| x_i^{j+w} - w x_i^{j+1} - (1-w) x_i^j \right|. \tag{6.4.14}$$

Аналогично определяется E_y. Такую же оценку можно получить и для метода «предиктор—корректор».

c) В случае использования какой-то схемы линеаризации (6.4.8) мы можем положить

$$E_x = \max_i \left| f\left(w x_i^{j+1} + (1-w) x_i^j,\ w y_i^{j+1} + (1-w) y_i^j\right) - \right.$$
$$\left. - a_i^j - b_i^j x_i^{j+1} - c_i^j y_i^{j+1} \right|. \tag{6.4.15}$$

Аналогичным образом записывается и оценка E_y. Отметим, что в данном случае мы находим отклонение в значениях функций f и g, но не в переменных состояния x и y.

---

[1] Обычно норму $\| \ \|$ определяют так: $\|u\| = \max |u_i|$. — *Прим. ред.*

Каждую из величин $E = \max(E_x, E_y)$, приведенных выше, можно использовать для регулировки шага по времени τ. С этой целью обычно выбирается некоторое характерное значение ε, причем шаг τ уменьшается, если $E > \varepsilon$. Если же E существенно меньше, чем ε, то шаг τ увеличивается.

Мы ограничились здесь лишь идейной стороной алгоритма изменения шага τ. Очень вероятно, что действительная величина погрешности решения будет заметно отличаться от ε. Поэтому если мы хотим удостовериться в том, что заданная точность обеспечивается, следует провести вычисления при двух различных значениях ε (отличающихся, например, на порядок) и сравнить полученные результаты. Таким образом, однако, можно оценить лишь влияние погрешностей аппроксимации «в направлении оси t». Влияние погрешности аппроксимации «в направлении координаты z» и адаптационные алгоритмы для выбора шага h будут обсуждаться в следующем пункте.

6.4.3. Автоматическое изменение шага h

В этом пункте мы исследуем проблему автоматического изменения шага h на равномерной сетке. Для решения вопроса о том, достаточно ли велико n (т. е. достаточно ли мал шаг h), при заданной «характерной величине погрешности» ε, будем искать оценку погрешности аппроксимации в направлении оси z. В принципе мы могли бы провести вычисления для момента t_j дважды — с шагом h и $2h$ — и результаты сравнить. Такой численный подход не был бы, однако, достаточно простым и эффективным.

Другой, более подходящий путь заключается в том, чтобы использовать выражения для остаточного члена в соответствующих разностных формулах. При замене второй производной в (6.4.3) имеем

$$\frac{\partial^2 x}{\partial z^2}(z_i, t_j) = \frac{1}{h^2}\left[x_{i-1}^j - 2x_i^j + x_{i+1}^j\right] - \frac{1}{12}h^2\frac{\partial^4 x}{\partial z^4}(\xi, t_j), \quad (6.4.16)$$

где $\xi \in (z_{i-1}, z_{i+1})$. Для аппроксимации четвертой производной можно воспользоваться разностной формулой вида

$$\frac{\partial^4 x}{\partial z^4}(\xi, t_j) \sim \frac{1}{h^4}\left[x_{i-2}^j - 4x_{i-1}^j + 6x_i^j - 4x_{i+1}^j + x_{i+2}^j\right] \quad (6.4.17)$$

при $i = 2, 3, \ldots, n-2$. Тогда оценку погрешности «в направлении оси z» можно записать в виде

$$E_x = \max_{i=2,\ldots,n-2} \frac{1}{12h^2}\left|x_{i-2}^j - 4x_{i-1}^j + 6x_i^j - 4x_{i+1}^j + x_{i+2}^j\right|. \quad (6.4.18)$$

Аналогичное выражение получается и для E_y (при $i=1$ и $i=n-1$ для четвертой производной можно использовать асимметричные формулы). Обозначим $E=\max(E_x, E_y)$.

Тогда для изменения (регулировки) n можно использовать следующую стратегию:

1. $E>\varepsilon$; шаг h слишком велик, и его следует уменьшить вдвое. Значения решения в узловых точках, которые появятся между исходными узловыми точками, после уменьшения шага, можно определить с помощью интерполяции, например, положить

$$x^j_{i+1/2}=\frac{1}{16}\left[-x^j_{i-1}+9x^j_i+9x^j_{i+1}-x^j_{i+2}\right], i=1, 2, \ldots, n-2,$$
$$x^j_{1/2}=\frac{1}{8}\left[3x^j_0+6x^j_1-x^j_2\right], \qquad (6.4.19)$$
$$x^j_{n-1/2}=\frac{1}{8}\left[3x^j_n+6x^j_{n-1}-x^j_{n-2}\right].$$

После проведения интерполяции перенумеруем заново узловые точки, удвоим число n и вдвое уменьшим шаг h; затем продолжим вычисления.

2. $E<\varepsilon/\omega$, где значение ω, как правило, выбирается между 4 и 8. Шаг h излишне мал и может быть удвоен. При этом узловые точки с нечетными индексами 1, 3, 5, ..., $n-1$ выбрасываются, оставшиеся точки перенумеровываются, шаг h удваивается, а n уменьшается вдвое.

3. В остальных случаях шаг h остается неизменным и проводятся дальнейшие вычисления.

При формулировке алгоритма удобно задавать максимальный и минимальный допустимый шаг h.

6.4.4. Адаптивная неравномерная сетка

Пусть у нас имеется некоторая, вообще говоря, неравномерная сетка узловых точек $z_0=0, z_1, \ldots, z_n=1$. Тогда вторую производную в направлении z в точке (z_i, t_j) можно заменить трехточечной разностной формулой

$$\frac{\partial^2 x}{\partial z^2}(z_i, t_j)\sim\frac{2}{(z_i-z_{i-1})(z_{i+1}-z_{i-1})}x^j_{i-1}-$$
$$-\frac{2}{(z_i-z_{i-1})(z_{i+1}-z_i)}x^j_i+\frac{2}{(z_{i+1}-z_{i-1})(z_{i+1}-z_i)}x^j_{i+1}. \qquad (6.4.20)$$

При этом разностные уравнения (6.4.3) изменяются только за счет подстановки формулы (6.4.20) вместо простейшей фор-

мулы[1]) для $\frac{\partial^2 x}{\partial z^2}$. Все остальное остается неизменным, включая вычисления нового слоя $j+1$. Погрешность аппроксимации в направлении оси z оценивается на каждом подынтервале (z_{i-1}, z_i) отдельно. Айгенбергер и Батт [6.29] предложили следующий подход. Приближенное значение решения при $t=t_j$ и $z=(z_{i-1}+z_i)/2$ отыскивается двумя способами (ниже индекс j опущен). В первом случае мы получаем его интерполированием по узловым точкам z_{i-2}, z_{i-1}, z_i,

$$x_{i-1/2}^{(1)}=\frac{-(z_i-z_{i-1})^2}{4(z_i-z_{i-2})(z_{i-1}-z_{i-2})}x_{i-2}+\frac{z_i+z_{i-1}-2z_{i-2}}{4(z_{i-1}-z_{i-2})}x_{i-1}+$$
$$+\frac{z_i+z_{i-1}-2z_{i-2}}{4(z_i-z_{i-2})}x_i, \qquad (6.4.21)$$

во втором случае — интерполированием по узловым точкам z_{i-1}, z_i, z_{i+1},

$$x_{i-1/2}^{(2)}=\frac{2z_{i+1}-z_i-z_{i-1}}{4(z_{i+1}-z_{i-1})}x_{i-1}+\frac{2z_{i+1}-z_i-z_{i-1}}{4(z_{i+1}-z_i)}x_i-$$
$$-\frac{(z_i-z_{i-1})^2}{4(z_{i+1}-z_{i-1})(z_{i+1}-z_i)}x_{i+1}. \qquad (6.4.22)$$

Для оценки погрешности аппроксимации на интервале (z_{i-1}, z_i) используется величина

$$E_x^i=\left|x_{i-1/2}^{(1)}-x_{i-1/2}^{(2)}\right|; \qquad (6.4.23)$$

E_y^i определяется аналогично. Тогда $E^i=\max(E_x^i, E_y^i)$. Далее сетка узловых точек видоизменяется с помощью следующего алгоритма (здесь снова ε — заданная характерная величина погрешности).

1. $E^i>\varepsilon$. Тогда между z_i и z_{i-1} мы добавляем еще одну узловую точку $(z_{i-1}+z_i)/2$. Приближенное значение решения в этой точке находим посредством интерполяции по четырем соседним узловым точкам z_{i-2}, z_{i-1}, z_i, z_{i+1}. Проделаем эту операцию для $i=1, 2, \ldots, n$. Далее перенумеруем узловые точки (добавим новые точки с сохранением порядка), после чего продолжим вычисления на построенной более густой сетке.

2. $E^i<\varepsilon/\omega$ для $i=k$ и одновременно для $i=k+1$. В этом случае мы отбрасываем узловую точку z_k и вновь проводим

[1]) $\frac{\partial^2 x}{\partial z^2}\sim\frac{1}{h^2}(x_{i-1}-2x_i+x_{i+1})$. Формула (6.4.20), очевидно, переходит в простейшую при $z_i-z_{i-1}=z_{i+1}-z_i=h$. — *Прим. ред.*

соответствующие вычисления E^i для соседних узловых точек. Затем перенумеровываем узловые точки и продолжаем вычисления. При этом значение ω выбирается обычно в диапазоне 10—20.

3. В остальных случаях сетка не изменяется. При этом бывает удобным задавать максимальное и минимальное расстояние между двумя соседними точками.

Для оценки погрешности аппроксимации на неравномерной сетке можно было бы использовать также соображения, изложенные в предыдущем пункте для случая равномерной сетки. В последнее время появился ряд работ по этой теме, см., например, сборник [6.35].

6.4.5. Метод прямых

С методом прямых мы уже встречались в п. 6.3.3 (см. уравнения (6.3.31)). Его применение оказывается эффективным в тех случаях, когда число узловых точек сравнительно невелико. Последнего можно добиться увеличением порядка аппроксимации. В данном пункте на примере системы типа «реакция—диффузия» (4.3.7) будет продемонстрировано использование этого метода для случая, когда пространственные производные заменяются разностными отношениями с пятью узловыми точками. При этом порядок аппроксимации по сравнению с трехточечной схемой (6.3.31) возрастает с $O(h^2)$ до $O(h^4)$. Обозначим $x_i(t) \approx \approx x(z_i, t)$, $y_i(t) \approx y(z_i, t)$ и рассмотрим равномерную сетку $z_i = = ih$, $i = 0, 1, \ldots, n$; $h = 1/n$. Уравнение (4.3.7a) заменяется системой уравнений

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{D_x}{12L^2h^2}(-x_{i-2} + 16x_{i-1} - 30x_i + 16x_{i+1} - x_{i+2}) + f(x_i, y_i),$$
$$i = 2, 3, \ldots, n-2, \tag{6.4.24a}$$

$$\frac{dx_1}{dt} = \frac{D_x}{12L^2h^2}(11x_0 - 20x_1 + 6x_2 + 4x_3 - x_4) + f(x_1, y_1), \tag{6.4.24b}$$

$$\frac{dx_{n-1}}{dt} = \frac{D_x}{12L^2h^2}(11x_n - 20x_{n-1} + 6x_{n-2} + 4x_{n-3} - x_{n-4}) + f(x_{n-1}, y_{n-1}). \tag{6.4.24c}$$

В случае граничных условий 1-го рода вида (4.3.9), мы имеем $x_0(t) \equiv \bar{x}$, $x_n(t) \equiv \bar{x}$. Для уравнения (4.3.7b) соответствующая замена строится совершенно аналогично. Таким образом, мы получаем систему обыкновенных дифференциальных уравнений, которую можно решить каким-либо из методов, описанных в § 5.7, например методом Рунге—Кутты.

Необходимо, конечно, представлять, что на величину шага, используемого в явной схеме интегрирования, накладывается

ограничение, которое определяется требованием численной устойчивости. Если же мы применяем схему интегрирования с автоматическим изменением шага (например, схему Мерсона), то будет выбран относительно короткий шаг интегрирования ($\sim h^2$), что, как правило, приводит к большим затратам машинного времени.

Использование метода прямых на очень редкой сетке узловых точек (часто неравномерной) приводит к небольшим системам обыкновенных дифференциальных уравнений, поведение которых можно достаточно эффективно анализировать методами, описанными в гл. 5. При этом часто оказывается возможным перенести полученные качественные выводы на исходные параболические уравнения; в частности, динамическое моделирование (численное решение нестационарных уравнений) можно проводить только в тех областях изменения параметров, где в результате анализа с помощью метода прямых следует ожидать появления каких-либо интересных эффектов.

Продемонстрируем указанный подход, построив аппроксимацию решения *задачи* 16 с помощью метода прямых [6.10]. Зададим граничные условия (P16-13) при $\mathrm{Nu} \to \infty$, $\mathrm{Sh} \to \infty$ и выберем n узловых точек $r_1, r_2, \ldots, r_n = 1$. Предположим теперь, что пространственный дифференциальный оператор в уравнении (P16-11) заменяется в узловой точке r_j некоторой линейной комбинацией значений решения в узловых точках, а именно

$$\frac{\partial^2 y}{\partial r^2} + \frac{a}{r}\frac{\partial y}{\partial r}\bigg|_{r=r_j} \sim \sum_{i=1}^{n} A_{ij} y(r_i, t). \tag{6.4.25}$$

Коэффициенты A_{ij} находятся из требования, чтобы левая часть соотношения (6.4.25) точно равнялась правой для функций $y = 1$, $y = r^2$, $y = r^4$, ..., $y = r^{2n-2}$. Последовательно подставляя эти функции в формулу (6.4.25), получим

$$\begin{gathered} 0 = \sum_{i=1}^{n} A_{ij}, \\ 2 + \frac{a}{r_j} 2r_j = \sum_{i=1}^{n} A_{ij} r_i^2, \\ (2n-2)(2n-3) r_j^{2n-4} + \frac{a}{r_j}(2n-2) r_j^{2n-3} = \sum_{i=1}^{n} A_{ij} r_i^{2n-2}. \end{gathered} \tag{6.4.26}$$

При каждом фиксированном j соотношения (6.4.26) представляют собой систему n линейных алгебраических уравнений

относительно неизвестных коэффициентов A_{ij}. Найдем решения этих систем при $j = 1, 2, \ldots, n-1$ (в случае $j = n$ это оказывается излишним, поскольку в точке $r = 1$ у нас задано $y = 1$).

Используя аппроксимацию (6.4.25) для y и Θ, мы получаем из исходных уравнений (Р16-11), (Р16-12) систему обыкновенных дифференциальных уравнений для функций $y_j(t) = y(r_j, t)$, $\Theta_j = \Theta(r_j, t)$, $j = 1,2 \ldots, n-1$:

$$\mathrm{Lw}\frac{dy_j}{dt} = \sum_{i=1}^{n} A_{ij}y_i - \Phi^2 y_j \exp\frac{\Theta_j}{1+\Theta_j/\gamma}, \tag{6.4.27}$$

$$\frac{d\Theta_j}{dt} = \sum_{i=1}^{n} A_{ij}\Theta_i + \gamma\beta\Phi^2 y_j \exp\frac{\Theta_j}{1+\Theta_j/\gamma} \tag{6.4.28}$$

(напомним, что $y_n(t) \equiv 1$ и $\Theta_n(t) \equiv 0$).

Положим теперь $n = 2$, т. е. выберем лишь одну внутреннюю точку r_1, а также точку $r_2 = 1$. Система уравнений (6.4.26) для $j = 1$ приобретает вид

$$A_{21} + A_{11} = 0, \quad A_{21} + r_1^2 A_{11} = 2(1+a),$$

откуда

$$A_{11} = \frac{2(1+a)}{r_1^2 - 1} = \rho, \quad A_{21} = -\frac{2(1+a)}{r_1^2 - 1} = -\rho. \tag{6.4.29}$$

Дифференциальные уравнения (6.4.27), (6.4.28) принимают в этом случае вид

$$\mathrm{Lw}\frac{dy_1}{dt} = \rho(y_1 - 1) - \Phi^2 y_1 \exp\frac{\Theta_1}{1+\Theta_1/\gamma}, \tag{6.4.30}$$

$$\frac{d\Theta_1}{dt} = \rho\Theta_1 + \gamma\beta\Phi^2 y_1 \exp\frac{\Theta_1}{1+\Theta_1/\gamma}$$

(здесь уже использованы условия $y_2(t) \equiv 1$, $\Theta_2(t) \equiv 0$).

Весьма существенным является в данном случае выбор координаты r_1. Вилладсен и Стюарт [6.30] рекомендуют выбирать в качестве r_1 нуль подходящего ортогонального полинома. Рекомендуемые ими значения r_1 (нули неких полиномов Якоби) даются следующей таблицей:

a	r_1	ρ
0	0,4472	−2,5
1	0,5773	−6
2	0,6547	−10,5

Для стационарного решения системы (6.4.30) имеет место соотношение

$$\Theta_1 = \gamma\beta(1 - y_1), \tag{6.4.31}$$

аналогичное формуле (P16-15). Подставляя его во второе из уравнений (6.4.30) (при $\Theta_1 = 0$), получаем

$$\rho(y_1 - 1) - \Phi^2 y_1 \exp\frac{\gamma\beta(1 - y_1)}{1 + \beta(1 - y_1)} = 0. \tag{6.4.32}$$

В табл. 6.12 приведена зависимость y_1 от Φ, подсчитанная с помощью метода отображения параметра Φ для последовательности значений y_1. Сравнивая ее с табл. 6.9, можно заметить качественное совпадение зависимостей решений от параметра (y_1 соответствует значению $r = 0{,}4472$!). При $\beta = 0{,}05$ зависимость однозначна, при $\beta \approx 0{,}25$ у нас возникают кратные решения, а при $\beta = 0{,}4$ в некотором диапазоне изменения параметра Φ существуют три стационарных решения данной задачи.

Таблица 6.12. Зависимость решений уравнения (6.4.32) от параметра Φ для *задачи* 16, $\gamma = 20$, $a = 0$, $\rho = -2{,}5$.

y_1	Φ			
	$\beta=0{,}05$	$\beta=0{,}2$	$\beta=0{,}25$	$\beta=0{,}4$
0,95	0,354	0,329	0,321	0,298
0,9	0,501	0,433	0,413	0,359
0,85	0,617	0,496	0,463	0,377
0,8	0,716	0,538	0,491	0,377
0,75	0,807	0,567	0,507	0,368
0,65	0,977	0,603	0,519	0,340
0,55	1,148	0,626	0,520	0,311
0,45	1,338	0,649	0,522	0,288
0,35	1,573	0,682	0,532	0,274
0,3	1,722	0,707	0,545	0,271
0,25	1,908	0,743	0,565	0,272
0,2	2,153	0,796	0,597	0,280
0,1	3,084	1,032	0,756	0,336
0,05	4,379	1,396	1,011	0,439

Динамическое поведение системы (6.4.30) может подсказать нам, как будет вести себя исходная система двух дифференциальных уравнений с частными производными, динамическое моделирование которой требует больших затрат машинного времени. Выбор $n = 3$ может дать нам более точные результаты. Более подробно результаты исследования *задачи* 16 приведены в работе [6.19], а для других задач — в работе [6.4].

6.5. ПЕРИОДИЧЕСКИЕ РЕШЕНИЯ В РАСПРЕДЕЛЕННЫХ СИСТЕМАХ

В этом параграфе мы рассмотрим методы нахождения периодических решений в распределенных системах. Эти методы требуют обычно больших затрат машинного времени и большого объема памяти ЭВМ, и поэтому здесь трудно проводить достаточно полное параметрическое исследование системы. Большей частью речь здесь идет о численном (машинном) эксперименте. Сами методы будут описываться лишь в краткой форме. Во второй части параграфа мы коротко рассмотрим решения волнового характера, которые также могут появляться в системах, описываемых нелинейными параболическими уравнениями.

6.5.1. Вычисление периодических решений и процесс продолжения

Периодическое (во времени) решение системы типа «реакция—диффузия» (4.3.7) с заданными граничными условиями по определению удовлетворяет тождествам

$$x(z, t+T) \equiv x(z, t), \quad y(z, t+T) \equiv y(z, t) \tag{6.5.1}$$

при $z \in [0, 1]$. Здесь T — период данного решения.

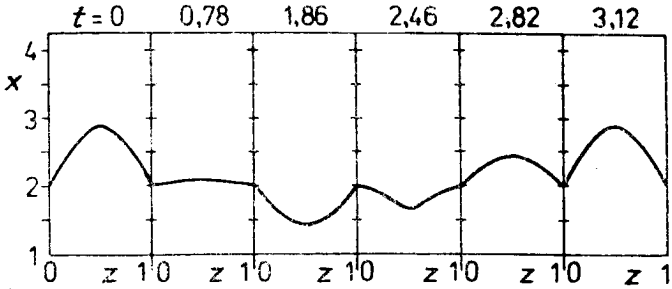


Рис. 6.13. Периодическое решение *задачи* 11 при ГУ1; $A = 2$, $B = 5{,}45$, $D_x = 0{,}008$, $D_y = 0{,}004$, $L = 0{,}75$; период $T = 3{,}12$.

Простейшим подходом для нахождения устойчивого периодического решения является использование какого-либо из методов динамического моделирования (см. § 6.4) в течение достаточно большого промежутка времени t, за который решение системы стабилизируется, становясь (приближенно) периодическим. Эта стабилизация может зависеть, конечно, от начальных условий. В качестве примера того, как может выглядеть периодическое решение в распределенной системе, на рис. 6.13 при-

ведено периодическое решение *задачи* 11 для случая ГУ1. На рисунке показано несколько типичных профилей переменной x для нескольких моментов времени в течение одного периода.

В п. 6.3.3.2 мы определили точку комплексной бифуркации для *задачи* 14 (см. табл. 6.11). Динамическое моделирование уравнений (P14-7), (P14-8) для значений параметра Da из окрестности $\mathrm{Da}^+ \approx 0{,}1254 (\mathrm{Da} < \mathrm{Da}^+)$ показало, что в данном случае существует ветвь периодических решений для значений $\mathrm{Da} \in (0{,}122;\ 0{,}1254)$. Значения конверсии и температур на входе в реактор и на выходе из него, т. е. величины $y(0, t)$, $\Theta(0, t)$ и $y(1, t)$, $\Theta(1, t)$, представлены на фазовой диаграмме $y - \Theta$ (рис. 6.14).

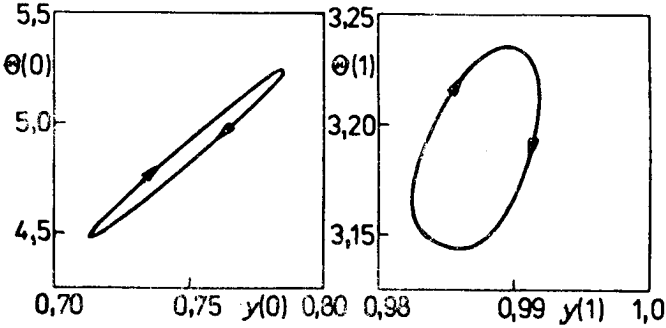


Рис. 6.14. Устойчивое периодическое решение *задачи* 14 (две проекции); $\gamma \to \infty$, $B = 12$, $\beta = 2$, $\Theta_c = 0$, $\mathrm{Da} = 0{,}123$, $\mathrm{Le} = 1$.

Продолжение периодических решений по параметру для указанного случая можно проводить, применяя вышеописанный подход (т. е. численно моделируя процесс стабилизации) для некоторой последовательности значений данного параметра. Другая возможность состоит в использовании квазистационарного описания (см. § 6.6).

Процесс стабилизации (установления) обладает тем очевидным недостатком, что с его помощью можно получать только устойчивые периодические решения. Рассмотрим теперь два других подхода, которые позволяют находить и неустойчивые периодические решения.

6.5.1.1. Метод стрельбы в рамках метода прямых

Если для аппроксимации параболических уравнений (4.3.7) воспользоваться методом прямых (п. 6.4.5), то условия (6.5.1) принимают вид ($t = 0$)

$$x_i(T) = x_i(0), \quad y_i(T) = y_i(0), \quad i = 1, 2, \ldots, n-1. \qquad (6.5.2)$$

Тем самым мы получаем нелинейную краевую задачу (см., например, (6.4.24)) для $2(n-1)$ дифференциальных уравнений первого порядка со смешанными граничными условиями (6.5.2).[1] Ситуация здесь полностью аналогична той, которая имела место для задач, прямо приводящих к обыкновенным дифференциальным уравнениям (ср. (5.8.1), (5.8.2)), однако размерность изучаемой системы оказывается большой. Таким образом, мы можем использовать методику § 5.8, которая основывалась на методе стрельбы, а также на идее алгоритма продолжения DERPER (см. п. 5.8.4).

Продемонстрируем использование метода прямых на примере *задачи* 11 с граничными условиями первого рода. Используя трехточечную замену по переменной z, получим

$$\frac{dx_i}{dt}=\frac{D_x}{L^2h^2}(x_{i-1}-2x_i+x_{i+1})+f(x_i,\ y_i), \tag{6.5.3a}$$

$$\frac{dy_i}{dt}=\frac{D_y}{L^2h^2}(y_{i-1}-2y_i+y_{i+1})+g(x_i,\ y_i) \tag{6.5.3b}$$

при $i=1, 2, \ldots, n-1$; $h=1/n$, $x_0=x_n=\bar{x}$, $y_0=y_n=\bar{y}$.

Для численного решения были выбраны следующие параметры задачи: $A=2$, $B=5{,}45$, $D_x=0{,}008$, $D_y=0{,}004$. В случае ГУ1 мы имеем тривиальное стационарное решение $x(t)\equiv\bar{x}=A$, $y(t)\equiv\bar{y}=B/A$, устойчивое при $L\to 0$. С помощью методики, описанной в 6.3.1, находим критическую длину, отвечающую комплексной бифуркации $L_1^+=0{,}5130$ (вещественные бифуркации при изменении параметра L не наблюдаются). Следовательно, тривиальное решение является устойчивым при $L\in(0,\ L_1^+)$ и неустойчивым при $L>L_1^+$. При значении $L=L_1^+$ от ветви тривиальных решений отходит ветвь устойчивых периодических решений. Диаграмма периодических решений, построенная для вышеприведенной системы с помощью алгоритма продолжения DERPER, показана на рис. 6.15.

Добавим еще несколько замечаний по поводу этого рисунка. Как уже сказано, при значении параметра $L=L_1^+$ от ветви стационарных решений отходит ветвь периодических решений (существующая при $L>L_1^+$). Этой ветви принадлежит, в частности, устойчивое периодическое решение при $L=0{,}75$, показанное на рис. 6.13. Периодические решения с указанной ветви, как это следует из рис. 6.13, являются пространственно симметричными: для всякого t и $z\in[0, 1]$ имеют место соотношения

[1] «Смешанное» условие включает значения решения на обоих концах отрезка $0\leqslant t\leqslant T$. — *Прим. ред.*

$x(z, t) = x(1 - z, t)$; $y(z, t) = y(1 - z, t)$. В точке, обозначенной на рис. 6.15 буквами ТПС, периодические решения утрачивают устойчивость (происходит бифуркация типа «+1») и от исходной ветви симметричных решений отделяется ветвь устойчивых пространственно несимметричных решений. Заметим, что в данном случае имеются две такие ветви; они содержат периодические решения, которые (при заданном L) обладают одинаковым

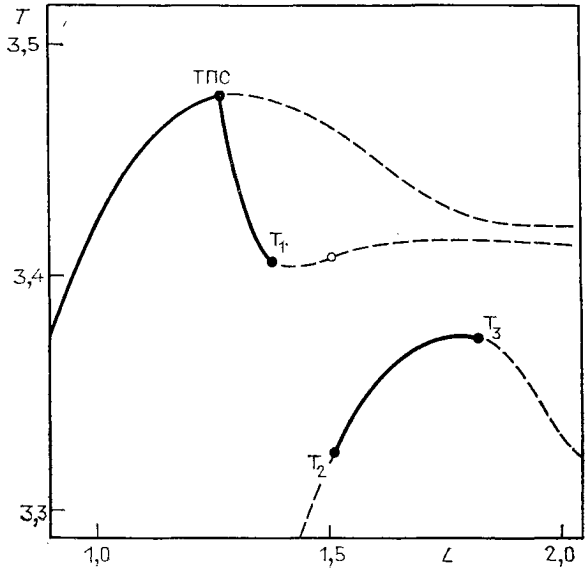


Рис. 6.15. Диаграмма периодических решений для *задачи* 11 при ГУ1; зависимость периода T ($A = 2$, $B = 5{,}45$, $D_x = 0{,}008$, $D_y = 0{,}004$). Метод прямых (6.5.3), $n = 20$. Сплошные линии — устойчивые периодические решения, штриховые — неустойчивые периодические решения, T_1, T_2, T_3 — точки бифуркации типа тора, ТПС — точка бифуркации с потерей симметрии.

периодом T. При этом для любого t их пространственные профили являются взаимно симметричными, т. е. при произвольном $z \in [0, 1]$ выполняется $x^{(1)}(z, t) = x^{(2)}(1 - z, t)$, $y^{(1)}(z, t) = y^{(2)}(1 - z, t)$, где верхний индекс определяет ветвь решений.

В табл. 6.13 приведены 14 наибольших по абсолютной величине мультипликаторов, а также величины периода T для неустойчивого периодического решения в случае $L = 1{,}5$ (обозначенного на рис. 6.15 кружком) при двух различных значениях $n = 20$ и $n = 40$. Напомним, что при $n = 20$ матрица монодромии имеет 38 собственных чисел, а при $n = 40$ у нее 78 собственных чисел. Остальные собственные числа, которые не приведены в таблице, оказываются близкими к нулю. Из таблицы

Таблица 6.13. Собственные числа матрицы монодромии и период T в зависимости от разбиения отрезка $0 \leqslant z \leqslant 1$. Периодическое решение при $L=1{,}5$ (на рис. 6.15 оно обозначено кружком).

	$n=20$	$n=40$
λ_1	1,0000	1,0000
$\lvert\lambda_{2,3}\rvert$	1,2888	1,2836
λ_4	0,7868	0,7770
$\lvert\lambda_{5,6}\rvert$	0,5036	0,4901
$\lvert\lambda_{7,8}\rvert$	0,2028	0,1876
λ_9	0,1818	0,1951
$\lvert\lambda_{10,11}\rvert$	0,0664	0,0558
λ_{12}	0,0547	0,0568
$\lvert\lambda_{13,14}\rvert$	0,0234	0,0170
T	3,40963	3,40957

видно, что главные мультипликаторы (по абсолютной величине большие 1/2) для обоих разбиений оказываются практически одними и теми же. Поскольку $|\lambda_{2,3}| > 1$, данное периодическое решение оказывается неустойчивым. Величина $|\lambda_{2,3}|$ невелика, и можно говорить о слабой неустойчивости: при динамическом моделировании с начальным условием вблизи этого решения соответствующая траектория будет очень медленно «разматываться», уходя от этого периодического решения.

На каждой из ветвей пространственно несимметричных решений была найдена точка бифуркации, при которой рождается инвариантный тор (обозначенная как T_1 на рис. 6.15; обе ветви на изображенной здесь диаграмме решений сливаются).

Таблица 6.14. Сравнение бифуркационных значений L^* точки T_1 (рис. 6.15) при различных n.

n	L^*
5	не найдена
10	1,35944
20	1,36760
40	1,36989
Экстраполяция по Ричардсону	1,37065

В табл. 6.14 приведены бифуркационные значения L^* для точки T_1, найденные при различных n. Значение L^*, подсчитанное с помощью экстраполяции по Ричардсону для $n = 20$ и

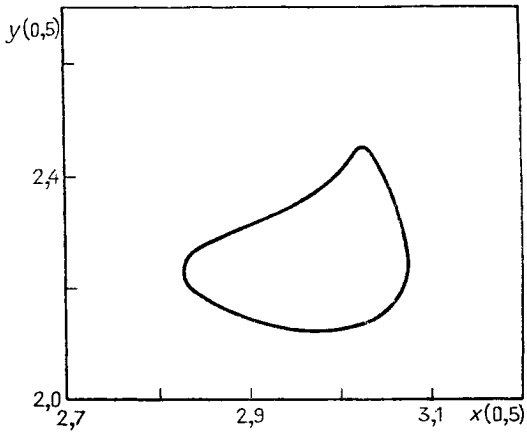


Рис. 6.16a. Проекция орбиты отображения Пуанкаре при $L = 1{,}4050$.

$n = 40$, иллюстрирует точность определения этой величины в зависимости от n.

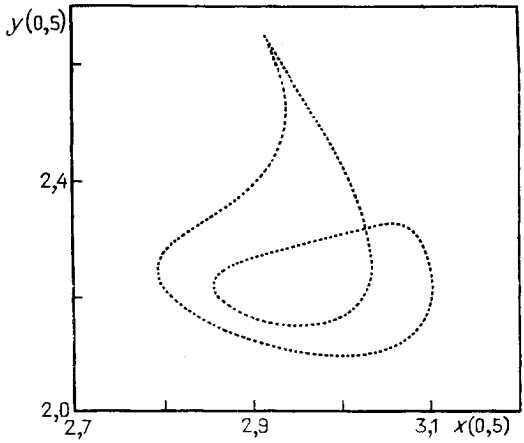


Рис. 6.16b. Проекция орбиты отображения Пуанкаре при $L = 1{,}4070$.

На рис. 6.15 показаны, кроме того, еще две другие точки бифуркации рождения инвариантного тора (T_2, T_3), лежащие на другой ветви периодических решений.

В окрестности точки бифуркации T_1 при $L > L^*$ мы с помощью динамического моделирования нашли устойчивый инвариантный тор. На рис. 6.16a изображена проекция орбиты отображения Пуанкаре для траектории на этом инвариантном торе. При возрастании величины L указанный тор теряет устойчивость и рождается «удвоенный» устойчивый тор (рис. 6.16b). При этом отображение Пуанкаре в обоих случаях определяется уравнением $x(0,3;\tilde{t}) = 2$. При возрастании значений параметра L можно наблюдать последовательность нескольких дальнейших «удвоений» тора. Учитывая слабую неустойчивость существующих одновременно периодических решений, можно было наблюдать медленное приближение траектории к устойчивому инвариантному тору. Если начальная точка выбиралась в окрестности периодического решения, то для того чтобы решение стабилизировалось на устойчивом инвариантном торе, нам приходилось интегрировать в течение времени порядка нескольких тысяч периодов.

6.5.1.2. Метод конечных разностей

Заменим дифференциальные уравнения (4.3.7) конечно-разностными по схеме Кранка—Николсона (6.4.3) при $w = 0{,}5$ и $\tau = T/m$. Мы получим систему

$$\frac{m}{T}\left(x_i^{j+1} - x_i^j\right) - \frac{D_x}{L^2h^2}\left[x_{i-1}^{j+1/2} - 2x_i^{j+1/2} + x_{i+1}^{j+1/2}\right] - \\ - f\left(x_i^{j+1/2}, y_i^{j+1/2}\right) = 0, \qquad (6.5.4a)$$

$$x_i^{j+1/2} = \frac{1}{2}\left(x_i^{j+1} + x_i^j\right); \qquad y_i^{j+1/2} = \frac{1}{2}\left(y_i^{j+1} + y_i^j\right)$$

$$\frac{m}{T}\left(y_i^{j+1} - y_i^j\right) - \frac{D_y}{L^2h^2}\left[y_{i-1}^{j+1/2} - 2y_i^{j+1/2} + y_{i+1}^{j+1/2}\right] - \\ - g\left(x_i^{j+1/2}, y_i^{j+1/2}\right) = 0 \qquad (6.5.4b)$$

при $i = 1, 2, \ldots, n-1$ и $j = 0, 1, \ldots, m-1$. Граничные условия 1-го рода, дают уравнения (6.4.4) для $j = -1, 0, 1, \ldots$ $\ldots, m-1$, а из условия периодичности (6.5.1) находим

$$x_i^0 - x_i^m = 0, \quad y_i^0 - y_i^m = 0, \quad i = 1, 2, \ldots, n-1. \qquad (6.5.4c)$$

Тем самым в целом у нас имеется $N = 2(n+1)(m+1)$ уравнений (6.5.4a), (6.5.4b), (6.5.4c), (6.4.4) относительно $N+1$ неизвестных x_i^j, y_i^j, T. Точно так же, как и в п. 5.8.2, зафиксируем какую-либо одну компоненту решения, например x_1^0, оста-

вив период T в качестве неизвестной. Полученную систему нелинейных уравнений можно решать, например, с помощью метода Ньютона, причем системы линейных алгебраических уравнений, возникающие на каждой итерации, решаются с помощью подходящего алгоритма для почти ленточных матриц. Получающиеся при этом системы имеют большие размеры, и поэтому этот метод удобно реализовывать лишь на достаточно мощных ЭВМ и при не слишком больших размерах m и n. Периодическое решение *задачи* 11, найденное таким методом для относительно редкой сетки узловых точек, представлено в табл. 6.15.

Таблица 6.15. Периодическое решение *задачи* 11 с граничными условиями типа ГУ1, найденное из конечно-разностных уравнений (6.5.4); $A = 2$, $B = 5{,}45$, $D_x = 0{,}008$, $D_y = 0{,}004$, $L = 0{,}75$, $m = 19$, $n = 5$. Окончательное значение $T = 3{,}3073$; в качестве фиксированного значения одной из неизвестных выбиралось $y_4^0 = 3{,}4$. Найденное решение является симметричным по переменной z относительно точки $z = 0{,}5$; поэтому $x_3^j = x_2^j$, $x_4^j = x_1^j$, $y_3^j = y_2^j$ $y_4^j = y_1^j$.

j	x_1^j	x_2^j	y_1^j	y_2^j
0	1,539	1,238	3,400	3,769
1	1,592	1,241	3,422	3,906
2	1,692	1,294	3,379	3,986
3	1,851	1,424	3,251	2,973
4	2,073	1,693	3,023	3,783
6	2,570	2,868	2,392	2,504
8	2,667	3,232	2,069	1,683
10	2,368	2,632	2,187	1,926
12	2,023	2,102	2,474	2,324
14	1,755	1,708	2,799	2,758
16	1,586	1,433	3,101	3,196
18	1,524	1,272	3,331	3,598
19	1,539	1,238	3,400	3,769

На рис. 6.17 показан еще один способ изображения периодического решения в распределенных системах (ср. с рис. 6.13). Этот способ удобен в тех случаях, когда профили решения качественно сохраняют свою форму и изменяются не слишком сильно (так, чтобы на рисунке не перекрывать друг друга).

Для продолжения периодического решения при изменении параметра, например параметра L, можно разработать алгоритм, основанный на конечно-разностной схеме (6.5.4). Вблизи точек поворота величину L необходимо рассматривать как неизвестную и последовательно изменять значения какой-либо другой переменной, например T.

6.5.2. Решения волнового характера

Рассмотрим сначала уравнения с частными производными (4.3.7) без граничных условий на бесконечном интервале изменения независимой переменной z. Подстановка

$$x(z, t) = \varphi(z - ct), \quad y(z, t) = \psi(z - ct) \tag{6.5.5}$$

в уравнения (4.3.7) приводит к системе двух обыкновенных диф-

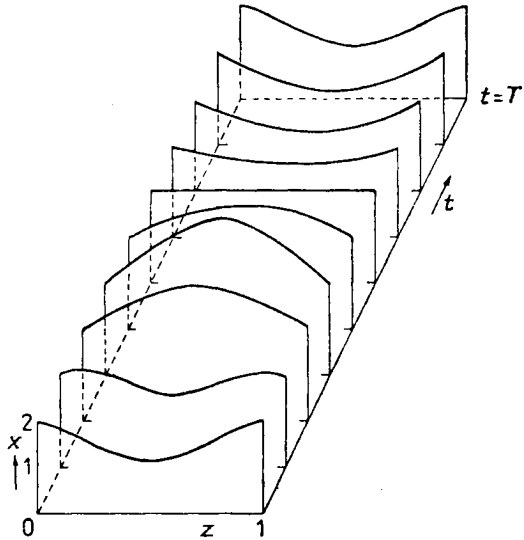


Рис. 6.17. Периодическое решение *задачи* 11 при ГУ1, найденное с помощью разностных уравнений (6.5.4): $m = 18$, $n = 5$, $A = 2$, $B = 5{,}45$, $D_x = 0{,}008$, $D_y = 0{,}004$, $T = 3{,}3073$.

ференциальных уравнений 2-го порядка для функций $\varphi(\xi)$ и $\psi(\xi)$:

$$\begin{aligned} -c\varphi' &= \frac{D_x}{L^2}\varphi'' + f(\varphi, \psi), \left(' = \frac{d}{d\xi}\right), \\ -c\psi' &= \frac{D_y}{L^2}\psi'' + g(\varphi, \psi). \end{aligned} \tag{6.5.6}$$

Периодические решения, а также гомоклинические и гетероклинические траектории системы (6.5.6) соответствуют решениям волнового типа исходной системы.

Обратимся теперь к случаю конечного промежутка изменения переменной z и рассмотрим вновь систему (4.3.7) с соответствующими граничными условиями.

Заметим, что нелинейные дифференциальные уравнения с частными производными параболического типа могут обнаруживать характерные свойства гиперболических систем: они могут иметь решения, которые можно назвать решениями волнового характера на конечном интервале изменения пространственной переменной. Изложение мы будем вести на примере *задачи* 12.

В первой части этого пункта мы рассмотрим решения типа импульса, а во второй части исследуем волну типа фронта (см. § 2.6).

6.5.2.1. Волна типа импульса

Волновые решения уравнений (4.3.7) зависят от свойств системы, получающейся при $D_x \to 0$, $D_y \to 0$. Рассмотрим *задачу* 12, т. е. зададим f и g формулами (P12-1) и (P12-2). Выберем следующие значения параметров: $\gamma = 3$, $\nu_0 = 0{,}01$, $\beta =$

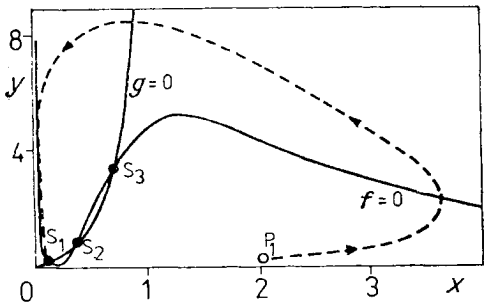


Рис. 6.18. Фазовый портрет системы (P4-1), (P4-2): $\gamma = 3$, $\nu_0 = 0{,}01$, $\beta = 1{,}5$, $\delta = 1$, $\alpha = 12$; S_1, S_2, S_3 — стационарные решения.

$= 1{,}5$, $\delta = 1$, $\alpha = 12$. Соответствующая система при $D_x = D_y = 0$ (см. (P4-1), (P4-2)) будет иметь три стационарных решения:

S_1: $x_1 = 0{,}11566$, $y_1 = 0{,}19618$ (устойчивый фокус);

S_2: $x_2 = 0{,}37278$, $y_2 = 0{,}89151$ (седло);

S_3: $x_3 = 0{,}70063$, $y_3 = 3{,}51059$ (неустойчивый узел).

На рис. 6.18 кроме стационарных состояний показаны нулевые изоклины функций f и g. Пунктиром изображена одна из траекторий. Из рисунка видно, что относительно малое возмущение стационарного состояния S_1 может вызвать изменение переменных состояния по «циклу возбуждения»; система уходит при этом далеко от устойчивого стационарного состояния.

(Если выбрать начальное условие справа от S_1 за нулевой изоклиной функции f, то фазовая траектория закручивается вокруг состояния S_3, и лишь потом устремляется к S_1.)

Выберем теперь для уравнений (4.3.7) в *задаче* 12 следующие граничные условия:

$$z=0:\ x(0,\ t)=x_p,\quad y(0,\ t)=y_1, \tag{6.5.7a}$$

$$z=1:\ \frac{\partial x(1,\ t)}{\partial z}=0,\quad \frac{\partial y(1,\ t)}{\partial z}=0. \tag{6.5.7b}$$

Если $x_p=x_1$ (x_1 и y_1 представляют собой значения x и y в стационарном состоянии S_1, см. выше), то задача имеет тривиальное решение $x(z,t)\equiv x_1$, $y(z,t)\equiv y_1$, которое является устойчивым. Таким образом, величина x_p характеризует собой

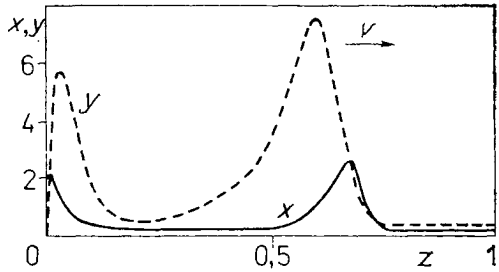


Рис. 6.19. Бегущая волна в *задаче* 12 при ГУ2: $\gamma=3$, $\nu_0=0{,}01$, $\beta=1{,}5$, $\delta=1$, $\alpha=12$, $D_x=0{,}008$, $D_y=0{,}004$, $L=2{,}5$, $x_p=2$; $v=0{,}108$, $T=8{,}0$.

возмущение переменной x на левом конце промежутка. На правом конце заданы граничные условия второго рода, которые описывают непроницаемую для исследуемых веществ стенку. Уравнения (4.3.7) решались посредством конечно-разностной схемы типа Кранка — Николсона с заменой нелинейности с помощью отрезка ряда Тейлора (см. § 6.4) при $n=160$, $\tau=0{,}1$. Если выбирать x_p не слишком близко к x_1, то в системе начинают возникать волны концентрации, бегущие от $z=0$ до $z=1$. Одна из таких волн изображена на рис. 6.19 (для некоторого момента времени t). Эта волна возникла вблизи левого конца промежутка, в точке $z=0{,}2$ ее форма оказалась уже достаточно развитой, далее она сохраняет свой вид до значения[1] $z=0{,}8$, после чего на правом конце промежутка она исчезает в силу действия граничных условий (6.5.7b). Определим скорость движения волны как $v=dz_v/dt$, где z_v есть, например, координата вершины волны. Далее, определим период

[1] Имеются в виду координаты вершины волны. — *Прим. ред.*

серии импульсов как время между двумя последовательными прохождениями импульса через заданную точку z, например $z = 0{,}5$. Значения v и T для волны, изображенной на рис. 6.19, указаны в подписи к рисунку (они были найдены вычислениями из результатов динамического моделирования). При более высоких значениях x_p волны уже не возникают и система стабилизируется на устойчивом неоднородном стационарном решении. Более подробные результаты можно найти, например, в работе [6.31].

6.5.2.2. Волна типа фронта

Фронт представляет собой переход решения системы типа «реакция — диффузия» от одного устойчивого стационарного решения к другому, причем в переходном режиме одна часть системы характеризуется значениями одного решения, а другая — значениями другого решения. Между этими двумя частями располагается узкая область (фронт), где наблюдается резкая зависимость физических переменных задачи от пространственной координаты. Указанный фронт перемещается, в результате чего размеры обеих областей изменяются до тех пор, пока система не достигнет конечного стационарного состояния, и фронт исчезнет.

Волну типа фронта мы снова продемонстрируем на примере *задачи* 12 при значениях параметров $\gamma_3 = 3$, $\nu_0 = 0{,}01$, $\beta = 1{,}5$, $\delta = 1{,}7$, $\alpha = 12$. Стационарные решения системы (Р4-1), (Р4-2) в данном случае имеют вид:

$\mathbf{S}_1$: $x_1 = 0{,}12985$, $y_1 = 0{,}12404$ (устойчивый узел);
$\mathbf{S}_2$: $x_2 = 0{,}26666$, $y_2 = 0{,}27906$ (седло);
$\mathbf{S}_3$: $x_3 = 1{,}32824$, $y_3 = 5{,}33927$ (устойчивый фокус).

Если для распределенной системы (4.3.7) выбрать граничные условия второго рода, т. е. условия (4.3.12), то тривиальные стационарные решения

$$x(z) \equiv x_1, \quad y(z) \equiv y_1, \tag{6.5.8}$$

$$x(z) \equiv x_3, \quad y(z) \equiv y_3 \tag{6.5.9}$$

оказываются устойчивыми при $D_x = 0{,}008$, $D_y = 0{,}004$, $L = 2{,}5$, причем от начальных условий зависит, на каком из этих решений система стабилизируется.

Переход системы из состояния (6.5.8) в состояние (6.5.9) моделировался путем изменения начального условия для переменных x и y в точке $z = 0$ в течение промежутка времени t_1:

$$t \in [0, t_1] : x(0, t) = x_3, \quad y(0, t) = y_3. \tag{6.5.10}$$

Для моментов времени $t > t_1$ вновь действуют граничные условия второго рода. Состояние системы (в некоторый момент времени) для $t_1 = 0{,}1$ показано на рис. 6.20. Скорость движения фронта при этом составляла $v \sim 0{,}115$; весь переход от (6.5.8) к (6.5.9) продолжался приблизительно 22 временны́х единицы. При очень малых значениях t_1 система возвращается к стационарному решению (6.5.8). Более подробно эти результаты обсуждаются в работе [6.31]. Отметим также, что

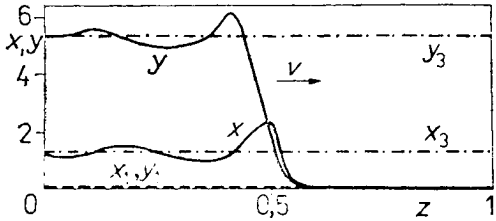


Рис. 6.20. Волна типа фронта для *задачи* 12 при ГУ2: $\gamma = 3$, $\nu_0 = 0{,}01$, $\beta = 1{,}5$, $\delta = 1{,}7$, $\alpha = 12$, $D_x = 0{,}008$, $D_y = 0{,}004$, $L = 2{,}5$; штриховая линия — решение (6.5.8), штрихпунктирная — решение (6.5.9).

переходы из одного стационарного состояния в другое могут происходить либо легко (под влиянием малого возмущения, действующего в течение короткого времени), либо с трудом, если на границе системы вообще не реализуемы физически допустимые возмущения.

6.6. КВАЗИСТАЦИОНАРНОЕ ПОВЕДЕНИЕ РАСПРЕДЕЛЕННЫХ СИСТЕМ

Понятие квазистационарного поведения было введено в § 5.10[1]. В этом параграфе мы рассмотрим лишь два типичных примера такого поведения для *задач* 11 и 13.

Прежде всего мы исследуем эволюцию стационарных структур в *задаче* 13 при предписанном изменении (увеличении со временем) длины системы L. Эволюционная диаграмма для случая ГУ2 изображена на рис. 6.21. Из сравнения рис. 6.21 с рис. 6.7 можно видеть, что речь идет о движении вблизи ста-

[1] Напомним, что слово «стационарное» (в составе термина «квазистационарное») не означает «независящее от времени», а означает «установившееся» (возможно, достаточно сложное) поведение. «Квазистационарное» поведение близко к установившемуся в некотором смысле (не определенном в книге). — *Прим. ред.*

ционарных решений[1] по устойчивым ветвям; скачки наблюдаются после перехода параметра L через критические значения, отвечающие точкам поворота на рис. 6.7. Если выбрать коэффициент a, определяющий рост L, слишком большим (например, положив $L(t) = 6 + 0{,}002t$), то связь между полученной эволюционной диаграммой и диаграммой стационарных решений на рис. 6.7 при малых L уже не будет такой очевидной. Поэтому на выбор этого коэффициента требуется обратить особое внимание. Если мы, наоборот, выберем его слишком малым, то необходимое время вычислений окажется слишком большим.

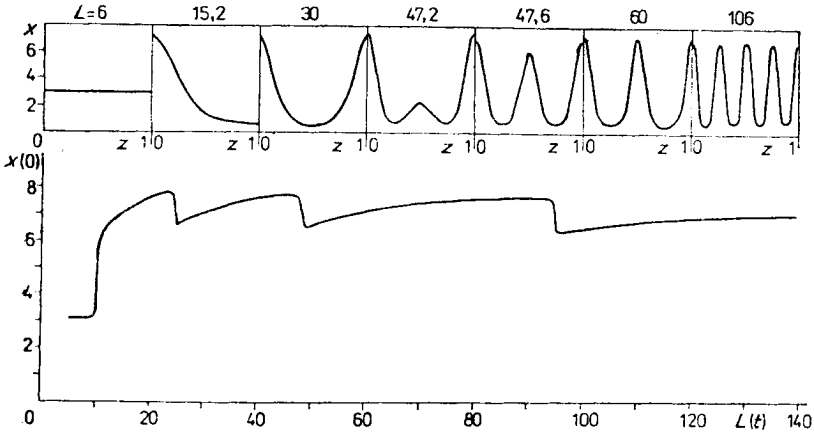


Рис. 6.21. Эволюционная диаграмма для *задачи* 13 при ГУ2, $\mu = 0{,}0035$, $\nu = 0{,}0045$, $\rho_0 = 6 \cdot 10^{-4}$, $c = 0{,}05$, $c' = 0{,}025$, $D_x = 0{,}01$, $D_y = 0{,}45$, $\rho = \rho' = 3{,}2$. Величина L изменялась по закону $L(t) = 6 + 0{,}0002t$; схема (6.4.3), $w = 1/2$, $n = 48$, $\tau = 125$. В верхней части рисунка приведены характерные профили концентрации x.

На рис. 6.22 представлена эволюционная диаграмма по параметру L для *задачи* 13 в случае ГУ1 (остальные параметры выбираются такими же, как на рис. 6.21); соответствующая диаграмма стационарных решений не строилась. На этом рисунке, так же как и на предыдущем, приведены характерные профили переменной x для избранных значений длины L. Как и в случае ГУ2, здесь также при увеличении L структура решения становится все более сложной (число максимумов и минимумов на пространственных профилях растет). Более подробно эти результаты обсуждаются в работе [6.32].

[1] Имеются в виду стационарные (периодические и т. д.) решения уравнений при постоянных, не зависящих от времени, значениях параметров. — *Прим. ред.*

На рис. 6.23 изображена эволюционная диаграмма для *задачи* 11 с ГУ2 при таких значениях параметров, когда существуют устойчивые периодические решения ($A = 2$, $B = 5{,}45$,

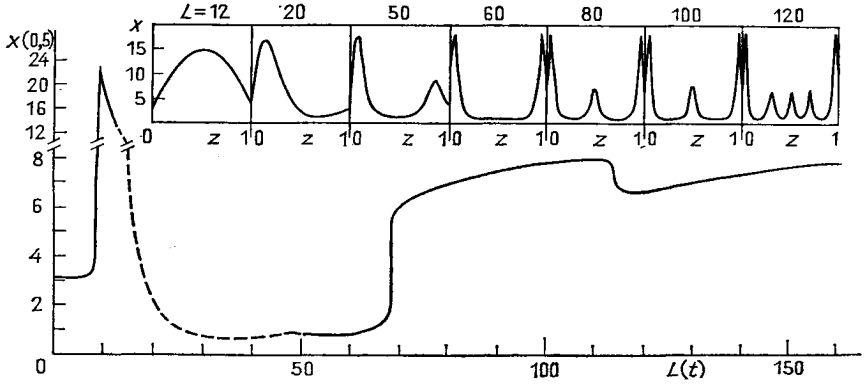


Рис. 6.22. Эволюционная диаграмма для *задачи* 13 при ГУ1. Параметры выбирались такими же, как на рис. 6.21; схема (6.4.3), $w = 1/2$, $n = 80$, $\tau = 125$; сплошные линии — симметричные профили, штриховые — асимметричные профили.

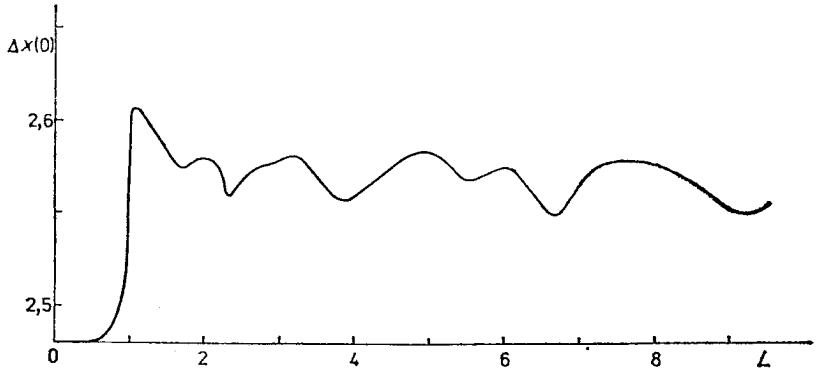


Рис. 6.23. Эволюционная диаграмма для *задачи* 11 при ГУ2, $A = 2$, $B = 5{,}45$, $D_x = 0{,}008$, $D_y = 0{,}004$, $L(t) = 0{,}45 + 0{,}0055t$; $\Delta x(0) = \max[x(0, t)] - \min[x(0, t)]$, где максимальное и минимальное значения оцениваются для t, меняющегося в пределах одного периода.

$D_x = 0{,}008$, $D_y = 0{,}004$). При малых значениях L здесь существует устойчивое пространственно однородное периодическое решение, которое теряет устойчивость вблизи значения $L = 2$. При бóльших значениях L сосуществует большое число устойчивых периодических решений; так, например, при $L = 4{,}5$ их

уже минимум пятнадцать (для периодических решений и ГУ2 также действует принцип «суммирования» решений, см. п. 4.3.1). Все эти решения имеют примерно тот же период, что и однородное решение, т. е. $T \approx 3{,}8$. Эволюционная диаграмма, приведенная на рис. 6.23, была построена следующим способом. При $L = 0{,}45$ однородное периодическое решение является устойчивым. При изменении $L(t)$ в интервале (0,45; 2,2) в вычисления вводились случайные флуктуации (возмущения) значений решения с амплитудой 0,01, в результате решение перешло из окрестности ветви однородных периодических решений на ветвь неоднородных решений. При этом последовательно (с ростом $L(t)$) возникают периодические решения[1] со все более и более сложной структурой (имеющие больше максимумов и минимумов). На оси ординат эволюционной диаграммы на рис. 6.23 откладывается величина $\Delta x(0)$, которую можно рассматривать как амплитуду колебаний на границе системы. Каждый минимум представленной на рисунке кривой отвечал возникновению более сложной структуры. Более подробный анализ периодических решений *задачи* 11 представлен в работе [6.33].

Подчеркнем, что построение эволюционных диаграмм для распределенных систем требует большого объема вычислений, особенно в случаях, когда в задаче возникают периодические решения. Особую роль при этом играет подходящий выбор коэффициента a в формуле $L = L_0 + at$. К тому же сами эксперименты с указанной величиной (с тем, чтобы определить, какое наибольшее значение a мы можем выбрать) требуют довольно больших затрат машинного времени.

6.7. ЗАДАЧИ

6.7.1. Методом стрельбы решить краевую задачу, возникающую при анализе *задачи* 16, а именно, редуцированную задачу, описываемую соотношениями (6.1.21), (6.1.16a, c). Выбрать начальное условие в виде

$$y(0) = \eta_1$$

и воспользоваться методом Ньютона (элементы матрицы Якоби следует вычислять с помощью уравнений в вариациях). Решить эту задачу при следующих значениях параметров: $\gamma = 20$, $a = 0$, $\beta = 0{,}1$, $\Phi = 1$, $\mathrm{Sh} \to \infty$. Значения начальных приближений для η_1 выбирать в интервале (0,1; 1). Окончательные значения $\eta_1 = 0{,}37453$ и $y'(1) = 1{,}23081$. Попробуйте

[1] Точнее, решения, близкие к периодическим. — *Прим. ред.*

решить данную задачу как задачу Коши на отрезке от $r=1$ до $r=0$, полагая $y'(1)=\tilde{\eta}_1$, и покажите, что задача чрезвычайно чувствительна к точности выбора $\tilde{\eta}_1$.

6.7.2. Составить программу метода отображения параметра для *задачи* 13 с ГУ1 при следующих значениях параметров: $\mu=0{,}0035$; $\nu=0{,}0045$; $\rho_0=0{,}0006$; $c=0{,}05$; $c'=0{,}025$; $\rho=\rho'=3{,}2$, $D_x\to 0$, $D_y=1$. Построить зависимость $y'(0)=\eta$ от L. (Для контроля: при $\eta=400$ величина L должна приблизительно равняться 30.) Использовать тот же самый метод для случая ГУ2 и $D_x\to 0$. (Для контроля: при $y'(0)=200$ величина L должна приблизительно равняться 38,1.)

6.7.3. С помощью метода отображения параметра построить зависимость решения уравнения Треша

$$\frac{d^2y}{dx^2}=n\,\mathrm{sh}\,(ny) \tag{6.7.1}$$

с граничными условиями

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

от параметра n. Указание: использовать подстановку

$$Y=ny,\quad \xi=nx \tag{6.7.2}$$

и выбрать начальное условие в виде $dY(0)/d\xi=\eta$ [6.8].

6.7.4. Построить бифуркационную диаграмму первичных бифуркаций для *задачи* 11 в плоскости параметров «$\rho-L$»; $\rho=D_x/D_y$ при $A=2$, $D_x=0{,}0016$, $B=4{,}6$.

6.7.5. Построить бифуркационную диаграмму первичных бифуркаций для задачи 13 в плоскости параметров «$\rho-L$; $\rho'=\rho$, $\mu=0{,}0035$, $\nu=0{,}0045$, $\rho_0=6.10^{-4}$, $c=0{,}05$, $c'=0{,}025$, $D_x=0{,}01$, $D_y=0{,}45$. Показать, что существуют только «вещественные» бифуркационные длины.

6.7.6. С помощью методики, описанной в п. 6.3.2.2, рассчитать точку поворота на диаграмме стационарных решений *задачи* 11, изображенной на рис. 6.3 или 6.4. При вычислении производных в третьей строке матрицы Якоби для метода Ньютона можно воспользоваться соответствующими разностными формулами. Выбор начального приближения произвести на основе указанных рисунков.

6.7.7. Составить программу для динамического моделирования (т. е. для численного решения задачи Коши. — *Ред.*) уравнений (6.4.30) — аппроксимации для *задачи* 16. Рассчитать и построить соответствующие фазовые портреты для значений $\mathrm{Lw}=1$; 2,5; 3; 4; 5 при следующих значениях остальных параметров: $\gamma=20$, $\beta=0{,}2$, $\Phi=1{,}5$, $\mathrm{Nu}\to\infty$, $\mathrm{Sh}\to\infty$, $a=2$. Показать, что существует такое значение Lw^*, что при $\mathrm{Lw}>$

$>$ Lw* единственное стационарное решение теряет устойчивость и возникает устойчивое периодическое решение.

При значениях параметров $\gamma = 20$, $\beta = 0{,}4$, $a = 2$ данная задача имеет три стационарных решения для интервала значений Φ ($\sim 0{,}65$). Построить фазовые портреты для указанного случая при Lw = 1; 1,5; 2; 2,5; 3; 3,5; 5. Покажите, что существует значение Lw*, при котором одно из стационарных решений теряет устойчивость. Затем постройте фазовый портрет для значения Lw, которое на 0,1 превышает Lw*. При этом вокруг указанного стационарного решения возникает периодическое решение. Для динамического моделирования используйте какой-либо из методов, описанных в § 5.7, лучше всего с автоматическим изменением шага интегрирования.

ЛИТЕРАТУРА

[6.1] Villadsen J., Michelsen M. L.: Solution of Differential Equation Models by Polynomial Approximation, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, N. Y., 1978.
[6.2] Finlayson B. A.: The Method of Weighted Residuals and Variational Principles. Academic Press, New York, 1972.
[6.3] Gottlieb D., Orszag S. A.: Numerical Analysis of Spectral Methods: Theory and Applications. NSF-CBMS Monograph *26*, SIAM, Philadelphia, 1978.
[6.4] Hlavacek V., Kubicek M., Caha J.: Chem. Engng. Sci. *26* (1971), 1737, 1743.
[6.5] Fox L.: The Numerical Solution of Two — Point Boundary Problems in ODE. Oxford University Press, London, 1957.
[6.6] Keller H. B.: Numerical Methods for Two — Point Boundary Value Problems. Blaisdell, Waltham, MA, 1968.
[6.7] Roberts S. M., Shipman J. S.: Two-Point Boundary Value Problems: Shooting Methods. American Elsevier, New York, 1972.
[6.8] Kubiček M., Hlaváček V.: Numerical Solution of Non-linear Boundary Value Problems with Applications. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, N. Y., 1983.
[6.9] Na T. Y.: Computational methods in engineering boundary value problems. Academic Press, New York, 1979. [Имеется перевод: На Ц. Вычислительные методы решения прикладных граничных задач. — М.: Мир, 1982. — 294 с.]
[6.10] Kubíček M.: Numerické algoritmy řešeni chemicko — inženýrských úloh. SNTL, Praha, 1983.
[6.11] Holodniok M., Kubiček M., Hlaváček V.: J. Fluid Mech. *108* (1981), 227.
[6.12] Kubíček M., Holodniok M., Hlaváček V.: Computers and Fluids *4* (1976), 59.
[6.13] Kubíček M., Hlaváček V.: Chem. Engng. Sci *27* (1972), 743, 2095.
[6.14] Kubíček M., Hlaváček V.: J. Inst. Math. Appl. *12* (1973), 287.
[6.15] Kubíček M., Ryzler V., Marek M.: Bioph. Chem *8* (1978), 235.
[6.16] Holodniok M., Kubíček M.: Sbornik VSCHT K *17* (1982), 109.
[6.17] Kubíček M., Marek M., Husták P., Rýzler V.: Bifurcation, Multiplicity and Stability in Reaction — Diffusion Systems. Proceedings of the 5th Symposium Computers in Chemical Engineering, Vysoké Tatry, October 5—9, 1977, 903.

[6.18] Kubíček M., Hofmann H., Hlaváček V.: Chem. Engng. Sci. *34* (1979) 593.
[6.19] Hlaváček V., Kubíček M., Marek M.: J. Catalysis *15* (1969), 17, 31.
[6.20] Jensen K. F., Ray W. H.: Chem. Engng. Sci. *37* (1982), 199.
[6.21] Kubíček M., Holodniok M.: Chem. Engng. Sci. *39* (1984), 593.
[6.22] Roose D., Hlaváček V.: SIAM J. Appl. Math., 45 (1985), 879.
[6.23] Forsythe G. E., Wasow W. R.: Finite-Difference Methods for Partial Differential Equations, Wiley, New York, London, 1960. [Имеется перевод: Вазов В., Форсайт Дж. Разностные методы решения дифференциальных уравнений в частных производных. — М.: ИЛ, 1963. — 487 с.]
[6.24] Mitchell A. R.: Computational Methods in Partial Differential Equations. Wiley, London, 1969.
[6.25] Fox L., ed.: Numerical Solution of Ordinary and Partial Differential Equations. Pergamon Press, New York, 1962.
[6.26] Richtmyer R. D.: Difference Methods for Initial — Value Problems. Interscience, New York, 1957. [Имеется перевод: Рихтмайер Р. Д. Разностные методы решения краевых задач. — М.: ИЛ, 1960. — 262 с.]
[6.27] Mitchell A. R., Wait R.: The finite element method in partial differential equations. Wiley, New York, 1978. [Имеется перевод: Митчелл Э., Уэйт Р. Метод конечных элементов для уравнений с частными производными. — М.: Мир, 1981. — 216 с.]
[6.28] Бабушка И., Витасек Э., Прагер М. (Babuška I., Vitásek E., Práger M.). Численные процессы решения дифференциальных уравнений. — М., «Мир», 1969.
[6.29] Eigenberger G., Butt J. V.: Chem. Engng. Sci. 31 (1976), 681.
[6.30] Villadsen J. V., Stewart W. E.: Chem. Engng. Sci. 22 (1967), 1483.
[6.31] Ševčiková H., Kubíček M., Marek M.: Mathematical Modelling in Science and Technology, Ed. X. J. R. Avula, R. E. Kalman, A. I. Liapis, E. Y. Rodin. Pergamon Press, New York, 1984, p. 477.
[6.32] Marek M., Kubíček M.: Bull. of Math. Biology *43* (1981), 259.
[6.33] Raschman P., Kubíček M., Marek M.: Sbornik VŠCHT K *17* (1982), 151.
[6.34] Stoer J., Bulirsch R.: Introduction to Numerical Analysis. Springer, New York, 1980.
[6.35] Flaherty J. E., Paslow P. S., Shephard M. S., Vasilakis J. D., Eds.: Adaptive Methods for Partial Differential Equations. SIAM, Philadelphia, 1989.

ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ ЛИТЕРАТУРА

Kernevez J. P.: Enzyme Mathematics. North-Holland Publ. Comp., Amsterdam, 1980.
Othmer H. G., Scriven L. E.: I & E. C. Fundam. *8* (1969), 303.
Murray J. D.: Lectures on Nonlinear Differential Equation Models in Biology. Clarendon Press, Oxford, 1977. [Имеется перевод: Марри Дж. Нелинейные дифференциальные уравнения в биологии. — М.: Мир, 1983. — 397 с.]
Fife P. C.: Mathematical Aspects of Reacting and Diffusing System. Springer, Berlin, 1979.

ПРИМЕЧАНИЯ РЕДАКТОРА ПЕРЕВОДА

[1] Практически фазовый портрет обычно считают известным, если:

а) найдены все особые траектории (положения равновесия, циклы, сепаратрисы седел и т. п.),

б) вычислено (изображено) несколько «типичных» неособых траекторий, так что ясно видно их асимптотическое поведение.

[2] Несколько замечаний о бифуркациях в уравнениях с симметриями.

1) Предположим, что система $\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(\mathbf{x}, \alpha)$ допускает симметрию $\mathbf{g}$ и некое положение равновесия $\mathbf{x}^*(\alpha)$ симметрично (инвариантно относительно отображения $\mathbf{g}$). Тогда вовсе не обязательно, чтобы при изменении параметра α происходила бифуркация с потерей симметрии, т. е. чтобы возникали «несимметричные» равновесия наряду с симметричным (или вместо него). Пусть, например, $\mathbf{g}$ — отражение в плоскости $x_1 = 0$. Тогда возможны:

а) бифуркации, при которых симметрия внешне никак не сказывается — все события разворачиваются в (инвариантной) плоскости $x_1 = 0$;

б) бифуркации с потерей симметрии (типа «вилка»). Оба варианта «одинаково вероятны» — отвечают обращению в нуль одной функции [1].

2) Если симметрия, которой обладают уравнения, достаточно богата, то возможна «постепенная» потеря симметрии при бифуркациях. Простейший пример. Пусть система $\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(\mathbf{x}, \alpha)$ инвариантна относительно отражений в каждой из координатных плоскостей $x_j = 0$: каждая функция $f_k(x)$ нечетна по переменной x_k и четна по остальным x_j. «Симметричное» положение равновесия $\mathbf{x} = 0$ (не зависящее от α) может при изменении α «породить» пару положений равновесия, у которых, скажем, $x_1 = \pm c_1(\alpha)$ $(\neq 0)$, остальные x_j равны нулю. При дальнейшем изменении параметра от этих точек могут ответвиться новые положения равновесия, имеющие больше не равных нулю координат (инвариантных относительно меньшей группы симметрии).

---

[1] Матрица линеаризации $\mathbf{A}$ в точке $\mathbf{x}^*(\alpha)$ (при подходящем базисе) имеет здесь вид

$$\begin{pmatrix} b & 0 \\ 0 & \mathbf{C} \end{pmatrix}$$

где $\mathbf{C}$ есть $(n-1)$-мерная матрица. Случай а) отвечает условию $\det \mathbf{C} = 0$, случай б) — условию $B = 0$.

3) Если система инвариантна относительно непрерывной группы преобразований $\mathbf{g}$, то при бифуркации с потерей симметрии может возникнуть континуум положений равновесия (переводимых друг в друга преобразованиями группы). Простейший пример доставляет система 3 уравнений, инвариантных относительно всех поворотов вокруг некоторой оси l. Здесь возможны как бифуркации с сохранением симметрии (положения равновесия остаются на оси l), так и возникновение целого семейства (окружности) положений равновесия.

4) Бифуркация типа «вилка» возможна, конечно, и в системах, не обладающих какой-либо симметрией. Однако при малом возмущении такой системы «вилка» исчезает и в этом смысле является нетипичной (см. [2.9], § 31).

[3] Авторы не рассматривают здесь случаев, когда при изменении параметра α период $T(\alpha)$ обращается в бесконечность. Два сценария возможны уже в двумерных системах (и часто наблюдаются). Это: (а) превращение цикла в петлю сепаратрисы; (б) рождение на цикле пары положений равновесия (оба эти случая упомянуты в конце § 2.4). В случае (а) $T(\alpha) \sim \sim \ln|\alpha - \alpha^*|^{-1}$; в случае (б) $T(\alpha) \sim |\alpha - \alpha^*|^{-1/2}$. Здесь α^* — критическое значение параметра.

[4] О бифуркациях периодических решений в системах с симметриями. Сделанные выше замечания о бифуркациях положений равновесия остаются в силе (с небольшими изменениями).

Напомним, что «симметричное» периодическое решение $\mathbf{x} = \mathbf{p}(t)$ $\mathbf{g}$-инвариантного уравнения — это такое решение, траектория которого γ инвариантна относительно отображения $\mathbf{g}$ $(\mathbf{g}(\gamma) = \gamma)$.

Если $\mathbf{g}(\gamma) = \gamma$, то есть две возможности.

(а) $\mathbf{g}\mathbf{p}(t) = \mathbf{p}(t)$ при всех t.

(б) $\mathbf{g}\mathbf{p}(t) = \mathbf{p}(t + \delta)$; типичный случай $\sigma = T/2$, где T (наименьший) период $\mathbf{p}(t)$. Для случая (а) справедливо все то, что сказано выше про бифуркации симметричных положений равновесия. Случай (б) требует отдельного рассмотрения.

[5] Обычно критерием устойчивости называют набор условий, близких к необходимым и достаточным. Чтобы получить критерий, здесь нужно добавить:

«Если хотя бы один мультипликатор лежит вне единичного круга $(|\rho_k| > 1)$, то решение $\mathbf{p}(t)$ не является орбитально устойчивым».

[6] Приведенная здесь «наглядная» интерпретация одномерных показателей Ляпунова полезна, но не точна: показатели Ляпунова определяют поведение решений линеаризованной (а не исходной) системы. В частности, если $\lambda(\mathbf{x}_0, \mathbf{e}) < 0$, то траектория $\gamma(\mathbf{x}_0 + \varepsilon\mathbf{e})$ (для некоторого малого, но фиксированного ε!) не обязана при $t \to +\infty$ приближаться к $\gamma(\mathbf{x}_0)$.

[7] Короткая гл. 3 и значительная часть § 5.4 посвящены явлению, обычно *не* происходящему в однопараметрических системах дифференциальных уравнений, а именно пересечению ветвей на диаграмме стационарных решений. Некоторым основанием для отдельного рассмотрения этого вопроса является то, что задачи о распределенных системах часто имеют семейства «тривиальных» решений, существующих при всех значениях параметра. Бифуркация типа «вилка» в таких системах вполне обычна.

Тем не менее равноправное изучение точек поворота и точек ветвления не кажется вполне правильным: бифуркация слияния (= бифуркация «седло — узел») встречается практически в любой задаче, а для пересечения однопараметрических семейств стационарных решений нужны специальные причины.

[8] В силу данного определения точке поворота диаграммы стационарных решений отвечает бифуркация типа «седло — узел» (см. § 2.2).

[9] Векторы $\mathbf{h}^{(0)}, \ldots, \mathbf{h}^{(n-1)}$, «как правило», линейно независимы, если у матрицы $\mathbf{A}$ все собственные числа λ_k различны. Если $\mathbf{A}$ имеет кратные λ_j (без жордановых клеток), то $h^{(k)}$ всегда линейно зависимы. Имеется два варианта придания точного смысла утверждению о «маловероятности».

1) Предположить, что $\mathbf{A}$ не имеет кратных собственных значений. Тогда «наугад выбранный» вектор $\mathbf{h}^{(0)}$ дает невырожденную систему (5.3.7): нужно, чтобы все коэффициенты разложения $\mathbf{h}^{(0)}$ по собственным векторам $\mathbf{A}$ были отличны от нуля.

2) Считать, что матрица $\mathbf{A}$ тоже выбрана «наугад». Тогда «с вероятностью 1» все $\lambda_j(\mathbf{A})$ будут различны. Точный смысл последнего утверждения таков. В N-мерном пространстве матриц ($N = n^2$) матрицы с кратными собственными числами лежат на многообразиях размерности меньше N (при отсутствии в матрицах жордановых клеток эта размерность не более $N - 3$).

[10] Авторы не касаются здесь вычислительных аспектов процесса интерполирования и ограничиваются предложением наблюдать за уклонением a_0 от 1. Отсылая заинтересованных читателей к учебникам [14*], [16*] [1)], отметим лишь, что при больших n ($n > 10$) выбор равноотстоящих узлов $s_0, \ldots, s_n$ очень плох.

[11] Повторяя сказанное ниже авторами, подчеркнем еще раз: название этого параграфа шире его содержания. Речь идет здесь только о нахождении бифуркационного значения параметра (и соответствующих координат положения равновесия), а не о численном изучении самой бифуркации. См. также замечания авторов в конце п. 5.8.4 и примечание 13 ниже.

[12] Целесообразно сохранить на этих линиях отдельные точки, отвечающие более сложным бифуркациям. Таким образом, имеет смысл изображать: а) «линии кратности» — совокупность всех точек (α, β), для которых какое-нибудь из положений равновесия имеет нулевое собственное число; б) «линии нейтральности» — совокупность всех точек (α, β), для которых какое-нибудь положение равновесия имеет чисто мнимые собственные числа.

[13] Последние несколько абзацев — единственное место в книге, где коротко затрагиваются основные алгоритмические вопросы, связанные с бифуркацией Андронова — Хопфа. А именно:

1) Как определить, при $\alpha < \alpha^*$ или при $\alpha > \alpha^*$ происходит рождение цикла из положения равновесия (здесь α^* — критическое значение параметра)?

2) Как найти родившееся периодическое решение при $|\alpha - \alpha^*| = \delta \ll 1$?

Существующие для этой цели программы используют асимптотику цикла при $\delta \to 0$: определяют, в какой двумерной плоскости (приближенно) лежит родившийся цикл и к какому эллипсу он близок. Эти программы достаточно сложны.

Предлагаемый авторами «эвристический» подход много проще. Априорно судить об успешности этого подхода трудно, и здесь разумно положиться на вычислительный опыт авторов. Заметим лишь, что вполне независимо выбирать ε и δ нельзя. Родившийся цикл имеет размеры $\sim \sqrt{\delta}$, и при $\varepsilon \gg \sqrt{\delta}$ он не будет пересекать плоскость $x_k = x_k^+ + \varepsilon$.

---

1) См. дополнительный список литературы.

ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ ЛИТЕРАТУРА

А. Книги, близкие по теме к этой книге.

За рубежом издано несколько таких книг; укажем здесь три из них, вышедшие в свет в последние годы.

[1*] Reinboldt, W. C. Numerical Analysis of Parametrized Nonlinear Equations. — John Wiley, New York, 1986.

[2*] Seydel, R. From Equilibrium to Chaos. Practical Bifurcation and Stability Analysis. — Elsevier, New York/Amsterdam/London, 1988.

[3*] Roose, D., De Dier, B., Spence, A. (eds). Continuation and Bifurcations: Numerical Techniques and Applications. — Kluwer Academic Publishers, Dodrecht/Boston/London, 1990.

Б. Теория бифуркаций.

[4*] Базыкин А. Д., Кузнецов Ю. А., Хибник А. И. Портреты бифуркаций. — М.: Знание, 1989 (брошюра из научно-популярной серии «Математика. Кибернетика»).

[5*] Арнольд В. И. Теория катастроф, 3 изд. — М.: Наука, 1990 (п. п. 1, 5, 6 и дополнение).

Обзор, рассчитанный более на математиков:

[6*] Арнольд В. И., Афраймович В. С., Ильяшенко Ю. С., Шильников Л. П. Теория бифуркаций. В кн.: «Современные проблемы математики. Фундаментальные направления», т. 5. — М.: Изд-во ВИНИТИ, 1986.

В. Хаотические режимы в системах малой размерности.

Сложное («хаотическое») поведение простых систем в последние годы интенсивно изучалось математиками и физиками. По этой теме написано уже много. Ниже указаны несколько публикаций (разных жанров). В некоторых из них имеется обширная библиография.

[7*] а) Гапонов-Грехов А. В., Рабинович М. И. Хаотическая динамика простых систем. «Природа», 1981, № 2, с. 54. б) Синай Я. Г. Случайность неслучайного. «Природа», 1981, № 3, с. 72.

[8*] Шустер Г. Детерминированный хаос. Введение. — М.: Мир, 1988.

[9*] Анищенко В. С. Сложные колебания в простых системах. — М.: Наука, 1990.

[10*] Неймарк Ю. И., Ланда П. С. Стохастические и хаотические колебания. — М.: Наука, 1987.

[11*] Holden, A. (ed.) Chaos. — Princeton University Press, Princeton, New Jersey, 1986.
[12*] Афраймович В. С., Рейман А. М. Размерность и энтропия в многомерных системах. В кн.: «Нелинейные волны. Динамика и эволюция» — М.: Наука, 1989, с. 238.

Г. Книги по вычислительной математике.

Дополнительно к учебникам и монографиям, названным в списках литературы к отдельным главам, укажем несколько книг на русском языке. Они рассчитаны на читателей, имеющих разную подготовку и разные интересы: от введения в предмет, предназначенного студентам разных специальностей, до монографии, рассчитанной на математиков.

[13*] Самарский А. А. Введение в численные методы. — М.: Наука, 1987.
[14*] Самарский А. А., Гулин А. В. Численные методы. — М.: Наука, 1989.
[15*] Марчук Г. И. Методы вычислительной математики. — М.: Наука, 1980.
[16*] Бахвалов Н. С., Жидков Н. П., Кобельков Г. М. Численные методы.— М.: Наука, 1987.
[17*] Бабенко К. И. Основы численного анализа. — М.: Наука, 1986.

Специально численным методам решения обыкновенных дифференциальных уравнений посвящены книги, вышедшие недавно в русском переводе:

[18*] Ортега Дж., Пул У. Введение в численные методы решения дифференциальных уравнений. — М.: Наука, 1986.
[19*] Хайрер З., Нёрсетт С., Ваннер Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Нежесткие задачи. — М.: Мир, 1990.

Вычислительные методы изучения «хаотического» поведения систем, описываемых обыкновенными дифференциальными уравнениями, рассматриваются в монографии:

[20*] Parker, T. S., Chua, L. O. Practical Numerical Algorithms for Chaotic Systems. — Springer-Verlag, New York, 1989. (Издательством «Наука» готовится русский перевод.)

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие редактора перевода 5

Предисловие 9

Глава 1. Введение 11

Литература 19

Глава 2. Бифуркации в нелинейных динамических системах 20

2.1. Введение 20
2.2. Бифуркации положений равновесия 30
2.3. Бифуркации периодических решений 39
2.4. Предельные множества траекторий 52
2.5. Показатели Ляпунова 55
2.6. Дифференциальные уравнения с частными производными . . . 62
Литература 71

Глава 3. Ветвление состояний равновесия на диаграмме решений . . . 73

3.1. Диаграмма стационарных решений 73
3.2. Ветвление в точках бифуркации. Одномерный случай 76
3.3. Ветвление в точках бифуркации. Многомерный случай . . . 78
3.4. Заключительные замечания 81
Литература 83

Глава 4. Математические модели 84

4.1. Построение математических моделей 84
4.2. Задачи с сосредоточенными параметрами 93
4.3. Задачи с распределенными параметрами 110
Литература 125

Глава 5. Численные методы и алгоритмы, используемые для анализа нелинейных систем с сосредоточенными параметрами 128

5.1. Стационарные решения 129
5.2. Зависимость стационарных решений от параметра — диаграмма решений 134

5.3. Исследование устойчивости стационарных решений 149
5.4. Точки ветвления стационарных решений. Вещественная бифуркация 156
5.5. Комплексная бифуркация (бифуркация Хопфа) 177
5.6. Бифуркационная диаграмма 187
5.7. Методы моделирования динамических систем 195
5.8. Вычисление периодических решений в автономном случае . . 205
5.9. Хаотические аттракторы 238
5.10. Квазистационарное поведение динамических моделей . . . 247
5.11. Расчет и анализ периодических решений в неавтономных случаях 256
5.12. Задачи 264
Литература 270

Глава 6. Численные методы и алгоритмы, используемые для анализа систем с распределенными параметрами 272

6.1. Стационарные решения (методы решения нелинейных краевых задач) 273
6.2. Зависимость стационарных решений от параметра 291
6.3. Нахождение точек ветвления 312
6.4. Методы динамического моделирования параболических уравнений 328
6.5. Периодические решения в распределенных системах 340
6.6. Квазистационарное поведение распределенных систем 352
6.7. Задачи 355
Литература 357

Примечания редактора перевода 359

Дополнительная литература 362