УДК 541.124:541.126:517.9

ПРЯМАЯ И ОБРАТНАЯ ЗАДАЧИ ДЛЯ СИНГУЛЯРНОЙ СИСТЕМЫ
С МЕДЛЕННЫМИ И БЫСТРЫМИ ПЕРЕМЕННЫМИ
В ХИМИЧЕСКОЙ КИНЕТИКЕ

Л. И. Конопенко

Приведены постановки прямой и обратной задач для сингулярных систем с малым параметром, описывающих квазилинейные реакции в задачах химической кинетики. Решение прямой задачи опирается на метод интегральных многообразий. Обратная задача сводится к нахождению коэффициентов полинома в правой части медленного уравнения по заданию решения системы на медленной поверхности этой системы. Получены условия существования и единственности коэффициентов в правой части медленной подсистемы выраженной системы.

Ключевые слова: математическое моделирование, сингулярно возмущённые системы, интегральные многообразия, медленные поверхности, обратные задачи.

Введение

Моделирование многих процессов в различных областях науки и практики деятельности (геофизика, химическая кинетика, медицина и т. д.) приводит к решению прямых и обратных задач и существует давно. Но как раздел современной прикладной математики — обратные задачи естествознания — появились сравнительно недавно.

При моделировании широкого круга задач химической кинетики используются сингулярно возмущённые системы обыкновенных дифференциальных уравнений с быстрыми и медленными переменными (с малым параметром).

Задача отыскания решений системы по некоторым исходным данным при известных функциях в правых частях представляет собой так называемую прямую задачу для дифференциальных уравнений. Основная цель исследований в данной работе — постановка и анализ задачи, обратной к этой (в химической кинетике обратные задачи называют собой задачами идентификации). Обратная задача сводится к нахождению неизвестных правых частей по некоторым данным о решении прямой задачи. Сформулирована и обоснована гипотеза о том, что по заданию решения на медленной поверхности можно восстановить неизвестные правые части, в частности, получены условия существования и единственности коэффициентов в правой части медленной подсистемы выраженной системы, заданной полиномом. Началом к краткому обзору по теории систем дифференциальных уравнений с медленными и быстрыми переменными. Мы будем иметь дело с прямыми и обратными задачами для обыкновенных дифференциальных уравнений [1–9] в отличие от изучения теории обратных задач для уравнений с частными производными, которые представлены, например, в [10–16], причем в системах, рассматриваемых нами, присутствует малый параметр.

© 2015 Конопенко Л. И.
1 Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований, проект № 15-01-00745, и Сибирским отделением РАН, междисциплинарный интеграционный проект № 80.
В [14], где собраны почти все основные направления теории обратных и некорректных задач, рассматривается также система линейных обыкновенных дифференциальных уравнений, решение задачи Коши которой описывает процесс химической кинетики

\[
\frac{du_i}{dt} = q_i u_1(t) + q_{i2} u_2(t) + \cdots + q_{in} u_n(t),
\]

\[
u_i(0) = \bar{q}_i, \quad i = 1, 2, \ldots, n,
\]

где \( u_i(t) \) — концентрация \( i \)-го вещества в момент времени \( t \).

Постоянные параметры \( q_{ij} \) характеризуют зависимость скорости изменения \( u_i(t) \) от концентраций веществ, участвующих в процессе.

Прямая задача формулируется следующим образом: определить \( u_i(t) \), зная параметры \( q_{ij} \) и \( \bar{q}_i \) в начальный момент времени.

Обратная задача сводится к нахождению параметров \( q_{ij} \) по решению системы \( u_i(t) \), которое соответствует начальному условию \( \bar{q}_i \). Заметим, что иногда \( \bar{q}_i \) тоже неизвестны и их нужно определить вместе с \( q_{ij} \).

Поскольку величины, участвующие в процессах химической кинетики, разомкнуты, мы будем рассматривать системы с малым параметром, описывающие эти процессы и представленные в таких работах, как [17–23].

Рассматривается сингулярно возмущенная система обыкновенных дифференциальных уравнений

\[
\dot{x} = f(x, y, t, \varepsilon),
\]

\[
\varepsilon \dot{y} = g(x, y, t, \varepsilon),
\]

где \( x \in \mathbb{R}^m \) — медленные, \( y \in \mathbb{R}^{n} \) — быстрые переменные; \( f, g \) — достаточно гладкие функции, \( t \in \mathbb{R} \) — переменная, имеющая смысл времени, \( \dot{x}, \dot{y} \) — производные по времени, \( \varepsilon \) — положительный малый параметр.

Система рассматривается в ограниченной выпуклой инвариантной притягивающей области \( W \subseteq \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^n \).

1. О прямой задаче для системы (1)

Прямая задача для системы дифференциальных уравнений с малым параметром (1) сводится к отысканию пары функций \( x(t), y(t) \), удовлетворяющих системе (1), но некоторым исходным данным при известных функциях \( f, g \).

В основе решения прямой задачи лежит метод интегральных многообразий, который является удобным аппаратом исследования многомерных сингулярно возмущенных систем дифференциальных уравнений, позволяющим понимать размерность систем [1, 2, 3]. Приведем необходимые сведения о методе интегральных многообразий для системы (1).

Гладкая поверхность \( S \) в \( \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R} \) называется интегральным многообразием системы (1), если любая траектория этой системы, имеющая хотя бы одну обную точку с \( S \), целиком принадлежит поверхности \( S \). Формально, если при \( t = t_0 \) точка \( (x(t_0), y(t_0), t_0) \in S \), то траектория \( (x(t), y(t), t) \) целиком принадлежит \( S \).

Уравнение \( \dot{x} = f(x, y, t, \varepsilon) \) в системе (1) называется медленной подсистемой, а уравнение \( \varepsilon \dot{y} = g(x, y, t, \varepsilon) \) — быстрой подсистемой системы (1). Если в (1) положить \( \varepsilon = 0 \), получим порождающую или вырожденную систему

\[
\dot{x} = f(x, y, t, 0),
\]

\[
0 = g(x, y, t, 0).
\]

Конченко Л. И.
Уравнение \( g(x, y, t, 0) = 0 \) задает медленную поверхность. Это уравнение медленной поверхности может иметь одно или несколько решений, каждое из которых задает лист медленной поверхности.

Опишем подробнее. Поверхность, задаваемая уравнением (3), называется медленной поверхностью. Возьмем какое-нибудь решение \( x(t_0), y(t_0), t_0 \) уравнения \( g(x, y, t, 0) = 0 \), т. е. выберем точку \( (x(t_0), y(t_0), t_0) \) на медленной поверхности \( \Gamma \). Если \( \det\left( \frac{\partial g}{\partial x}(x(t_0), y(t_0), t_0) \right) \neq 0 \), то в некоторой окрестности \( V_0 \) точки \( (x(t_0), t_0) \in D_1 \times \mathbb{R} \), \( D_1 \subset \mathbb{R}^m \), существует по теореме о независимых вектор-функциях \( y = h_0(x, t) \), \( y_0 = h_0(x_0, t_0) \), \( y \in D_2 \subset \mathbb{R}^n \), которая является решением уравнения (3), т. е. \( g(x, h_0(x, t), t, 0) = 0 \) при всех \((x, t) \in V_0\). Пересечение поверхности \( \Gamma \) с поверхностью \( \det\left( \frac{\partial g}{\partial x}(x(t), y(t), t, 0) \right) = 0 \) является поверхностью (кривой) \( \Gamma_1 \) на единицу меньшей размерности, чем \( \Gamma \). Она делит медленную поверхность на части, в каждой из которых \( \det\left( \frac{\partial g}{\partial x}(x(t), y(t), t, 0) \right) \) не меняет знака. Каждую из этих частей называют листом медленной поверхности.

Листы интегрального многообразия медленных движений (или медленного интегрального многообразия) являются уточнением при учете малого параметра \( \varepsilon \) листов медленной поверхности и получаются из них с помощью асимптотического разложения по степеням \( \varepsilon \):

\[
h(x, t, \varepsilon) = h_0(x, t) + \varepsilon h_1(x, t) + \cdots + \varepsilon^k h_k(x, t) + \cdots,
\]

где коэффициенты разложения \( h_k(x, t) \) подсчитываются по рекуррентной формуле, приведенной, например, в [9],

\[
h_k = -B^{-1}\left[ g^{(k)} - \frac{\partial h_{k-1}}{\partial t} - \sum_{p=0}^{k-1} \frac{\partial h_k}{\partial x} f^{(k-1-p)} \right],
\]

\[
B = \det\left( \frac{\partial g}{\partial x}(x, h_0(x, t), t, 0) \right) \neq 0.
\]

Среди интегральных многообразий системы (1) нас интересуют \( m \)-мерные интегральные многообразия (размерность медленных переменных), которые представлены в виде графика вектор-функции \( y = h(x, t, \varepsilon) \).

Выполняется соотношение

\[
\lim_{\varepsilon \to 0} h(x, t, \varepsilon) = h_0(x, t),
\]

где \( h_0(x, t) \) — функция, график которой является листом медленной поверхности.

При стремлении малого параметра \( \varepsilon \) к нулю траектории исходной системы стремятся к траекториям выраженной системы.

Основная идея метода интегральных многообразий состоит в следующем. Мы сводим качественный анализ полной системы к анализу медленных подсистем на листах интегрального многообразия.

Согласно методу интегральных многообразий мы должны сделать следующее:
1) исследовать строение медленной поверхности, т. е. найти количество и форму листов;
2) найти границы листов;
3) проверить характер устойчивости листов;
4) провести качественный анализ медленных подсистем на устойчивых листах (в частности, найти стационарные, их классификацию; особый интерес вызывают колебания различных типов и решения-утки).
5) провести анализ системы в целом.

Нахождение решения системы (1) сводится к отысканию решения вырожденной системы (2)–(3), получаемой из исходной, если параметр \( \varepsilon \) формально положить равным нулю. Этот факт следует из работ А. Н. Тихонова [4, 5], в которых доказаны теоремы о предельном переходе к решению вырожденной задачи при стремлении малого параметра к нулю. Правые части системы (1) являются достаточно гладкими функциями, поэтому удовлетворяют требуемым условиям, в частности, обеспечивают единственность решения.

При использовании метода интегральных многообразий для решения конкретных задач центральным становится вопрос о вычислении функции \( h(x, t, \varepsilon) \), описывающей многообразие. Как правило, точное вычисление не является возможным и используются различные виды приближенных вычислений. Мы будем использовать для приближенного вычисления асимптотическое разложение функции \( h(x, t, \varepsilon) \) по степеням малого параметра, приведенное в формулах (4), (5).

Существование интегрального многообразия было доказано в [3, 9]. Приведем соответствующую теорему и сформулируем постановку прямой задачи. (Заметим, что термин «прямая» задача обычно употребляется в контексте с «обратной» задачей, а в остальных случаях говорят просто «задача».)

Постановка прямой задачи. Пусть для системы (1) выполнены условия:

I. Уравнение \( g(x, y, t, 0) = 0 \) имеет изолированное решение \( y = h_0(x, t) \) при \( t \in \mathbb{R} \), \( x \in \mathbb{R}^m \).

II. В области \( \Omega_0 = \{ (x, y, t, \varepsilon) : x \in \mathbb{R}^m, \|y - h_0(x, t)\| < \rho, t \in \mathbb{R}, 0 \leq \varepsilon \leq \varepsilon_0 \} \) функции \( f, g \) и \( h_0 \) равномерно непрерывны и ограничены вместе с частными производными по переменной \( x \) до \((k + 2)\)-го порядка включительно \((k \geq 0)\).

III. Собственные значения \( \lambda_i(x, t) (i = 1, \ldots, n) \) матрицы \( \frac{\partial \Phi}{\partial y}(h_0(x, t), t, 0) \) подчиняются неравенству \( \text{Re} \lambda_i(x, t) \leq -2\gamma < 0 \).

Требуется найти для заданных функциями \( f(x, y, t, \varepsilon) \), \( g(x, y, t, \varepsilon) \) в правой части системы (1) найди \( x(t) \), \( y(t) \) в области \( \Omega_0 \).

Теорема. Пусть выполняются условия I–III. Тогда существует такое \( \varepsilon_1 \) \((0 < \varepsilon_1 \leq \varepsilon_0)\), что для каждого \( \varepsilon \in (0, \varepsilon_1] \) система (1) имеет интегральное многообразие медленных движений \( y = h(x, t, \varepsilon) \), движение по которому описывается уравнением

\[
\dot{x} = f(x, h(x, t, \varepsilon)), t, \varepsilon).
\]

Если \( x(t) \) — решение этого уравнения, то пара \( x(t), y(t) \), где \( y(t) = h(x(t, \varepsilon), t, \varepsilon) \), является решением исходной системы (1), т. е. пара \( x(t), y(t) \) есть решение прямой задачи.

В качестве примеров прямой задачи были рассмотрены две модели из химической кинетики.

I. Математическая модель реактора идеального смещения.

Рассматривается система обыкновенных дифференциальных уравнений, описывающая бимолекулярную реакцию на поверхности катализатора

\[
\begin{align*}
\dot{x}_1 &= a - x_1 - \alpha[\omega_1 + (\omega_3 - \omega_1 - \omega_2)x_1], \\
\dot{x}_2 &= b - x_2 - \alpha[\omega_2 + \omega_4 + (\omega_1 - \omega_1 - \omega_2)x_2], \\
\dot{y}_1 &= \beta(2\omega_1 - \omega_3 - \omega_4), \\
\dot{y}_2 &= \beta(\omega_2 - \omega_3),
\end{align*}
\]

где \( \omega_1 = \kappa_1 \frac{1}{x_1} - \frac{y_1}{y_1} \), \( \omega_2 = \kappa_2 \frac{1}{x_2} (1 - \frac{y_1}{y_1} - \frac{y_2}{y_2}) \), \( \omega_3 = y_1 y_2, \omega_4 = \kappa_4 x_1 y_1 \) — обезразмеренные скорости четырех стадий реакции.
Областью изменения переменных является множество

\[ W = \left\{ (x_1, x_2, y_1, y_2) : 0 \leq x_1 \leq a, \ 0 \leq x_2 \leq b, \ 0 \leq y_1, \ 0 \leq y_2, \ y_1 + y_2 \leq 1 \right\}. \]

Система (7) изучалась в [6, 7].

Скорость реакции на поверхности катализатора существенно выше, чем скорости адсорбции. Предполагается, что основным механизмом реакции является адсорбционный, а ударный механизм учитывается как дополнительный. Поэтому мы используем при анализе модели следующую иерархию параметров: \( \kappa_{-2}, \kappa_{-1}, \kappa_4 \ll \kappa_1, \kappa_2 \ll 1. \) Константы десорбции предполагаются малыми сравнительно с константами адсорбции. Кроме того, \( \alpha \ll \beta \) и \( \varepsilon = 1/\beta \ll \kappa_{-1}, \kappa_{-1}, \kappa_4. \)

II. Математическая модель каталитической реакции окисления.

Рассматривается детальный механизм реакции \( \text{CO} + \text{O}_2 \) на иридии. Кинетической схеме этой реакции соответствует система дифференциальных уравнений с безразмерными переменными

\[ \begin{align*}
\dot{x}_1 &= 2b_1x_1^2 - b_2x_6x_1 - b_8x_1x_2, \\
\dot{x}_2 &= b_4x_7 - b_5x_2 - b_8x_1x_2 - b_9x_2x_3 - b_{12}x_2x_4, \\
\dot{x}_3 &= b_2x_6x_1 - 2b_3x_3^2 - b_6x_3 + b_7x_5 - b_9x_2x_3 + 2b_{10}x_4x_5 + b_{12}x_2x_4, \\
\dot{x}_4 &= 2b_3x_3^2 - b_{10}x_4x_5 - b_{12}x_2x_4, \\
\dot{x}_5 &= b_6x_3 - b_7x_5 - b_{10}x_4x_5 - b_{11}x_5, 
\end{align*} \]

где \( x_6 = 1 - x_3 - x_4 - x_5, \ x_7 = 1 - x_1 - x_2 - x_3 - x_4 - x_5. \)

Система (8) исследовалась в [8, 17, 18]. Там же приведены выражения для коэффициентов \( b_i \) \( (i = 1, 2, \ldots, 12). \) Областью изменения переменных является множество

\[ W = \left\{ (x_1, \ldots, x_5) : 0 \leq x_1 \leq 1, \ \sum_{j=1}^{5} x_j \leq 1, \ i = 1, \ldots, 5 \right\}. \]

При анализе модели используем следующую иерархию параметров:

\[ b_{10} > b_8 \gg b_7 > b_1, b_2, b_3, b_4, b_6, b_{11}, b_{12} \gg b_5, b_9. \]


2. Обратная задача для системы

Целью дальнейших исследований являются постановка и анализ задачи, обратной к задаче, поставленной в предыдущем пункте для системы (1). Для упрощения исследования обратной задачи для системы (1) введены следующие ограничения:

1) рассматривается обратная задача для системы (1) при \( \varepsilon = 0, \) т. е. для выраженной системы (2);
2) функция \( f \) в правой части медленной подсистемы системы (1) задается в виде многочлена \( p \)-й степени \( f = \sum_{i+j \leq p} b_{ij}x^iy^j, \) так как в задачах химической кинетики правые части системы часто являются полиномами, более того будем рассматривать многочлен первой степени;
3) рассматриваются системы с одной медленной и одной быстрой переменными, т. е. $m = n = 1$;
4) функцию $g(x, y, t, \varepsilon)$ считаем заданной и удовлетворяющей всем условиям теоремы о непрерывной функции в каждой точке области, в частности, $\frac{\partial g(x, y, t, \varepsilon)}{\partial y} \neq 0$, следовательно, при $\varepsilon = 0$ медленная поверхность, уравнение которой $g(x, y, t, 0) = 0$, задана;
5) медленная поверхность состоит из одного листа.

В рамках сделанных ограничений выраженная система

$$
\dot{x} = \sum_{i+j=p} b_{ij} x^i y^j,
$$

(9)

имеет вид

$$
\dot{x} = p_0 + p_1 x + p_2 y,
$$

(10)

$$
0 = g(x, y, t, 0)
$$

Заметим, что рассматриваемая система обыкновенных дифференциальных уравнений описывает формальную кинетическую модель. Впоследствии формальные кинетические модели могут оказать существенную помощь в выявлении механизма реакции [25].

Учитывая перечисленные ограничения (1)–(5), получим следующую постановку обратной задачи для сингулярно возмущенной системы.

**Постановка обратной задачи.** Рассматривается система дифференциальных уравнений со следующими данными

$$
\dot{x} = p_0 + p_1 x + p_2 y,
$$

(11)

$$
0 = g(x, y, t, 0), \quad x \in \mathbb{R}, \quad y \in \mathbb{R}, \quad t \in \mathbb{R}, \quad (x, y) \in W,
$$

$$
x(t_i) = \alpha_i, \quad \dot{x}(t_i) = \beta_i, \quad i = 1, 2, 3,
$$

где функция $g$ удовлетворяет условиям 4), 5). Для данных $t_i$, $\alpha_i$, $\beta_i$ требуется найти коэффициенты $p_0$, $p_1$, $p_2$, удовлетворяющие системе (11).

Из второго уравнения системы (10) при условии $\frac{\partial g(x, y, t, 0)}{\partial y} \neq 0$ выразим быструю переменную $y$ через медленную переменную $x$. Это возможно, так как функция $g$ удовлетворяет всем условиям теоремы о непрерывной функции. Имеем $y = \varphi(x, t)$. Подставив это выражение в первое уравнение системы (11), имеем

$$
\dot{x}(t) = p_0 + p_1 \varphi(x(t), t) + p_2 \varphi(x(t), t).
$$

(12)

Используя данные $x(t_i) = \alpha_i$, $\dot{x}(t_i) = \beta_i$ и вводя обозначения $\gamma_i = y_i = \varphi(\alpha_i, t_i)$, $i = 1, 2, 3$, имеем систему трех уравнений с тремя неизвестными $p_0$, $p_1$, $p_2$:

$$
p_0 + p_1 \alpha_1 + p_2 \gamma_1 = \beta_1,
$$

$$
p_0 + p_1 \alpha_2 + p_2 \gamma_2 = \beta_2,
$$

$$
p_0 + p_1 \alpha_3 + p_2 \gamma_3 = \beta_3.
$$

(13)

Значит, на медленной поверхности ($\varepsilon = 0$) искомые коэффициенты $p_i$, $i = 0, 1, 2$, вычисляются по следующим формулам: $p_i = \frac{\Delta^0_i}{\Delta^0}$. Здесь $\Delta^0$ — определитель системы (13):

$$
\Delta^0 = \begin{vmatrix}
1 & \alpha_1 & \gamma_1 \\
1 & \alpha_2 & \gamma_2 \\
1 & \alpha_3 & \gamma_3
\end{vmatrix},
$$

(14)
а $\Delta^0_{p_0}, \Delta^0_{p_1}, \Delta^0_{p_2}$ — определители, получаемые из $\Delta^0$ заменой $j$-го столбца, $j = 1, 2, 3$, соответствующим столбцом коэффициентов при $p_0, p_1, p_2$:

$$
\Delta^0_{p_0} = \begin{vmatrix}
\beta_1 & \alpha_1 & \gamma_1 \\
\beta_2 & \alpha_2 & \gamma_2 \\
\beta_3 & \alpha_3 & \gamma_3
\end{vmatrix}, \quad \Delta^0_{p_1} = \begin{vmatrix}
1 & \beta_1 & \gamma_1 \\
1 & \beta_2 & \gamma_2 \\
1 & \beta_3 & \gamma_3
\end{vmatrix}, \quad \Delta^0_{p_2} = \begin{vmatrix}
1 & \alpha_1 & \beta_1 \\
1 & \alpha_2 & \beta_2 \\
1 & \alpha_3 & \beta_3
\end{vmatrix}. \quad (15)
$$

Нуль в верхнем индексе определителей означает, что коэффициенты $p_i, i = 0, 1, 2$, подсчитываются на медленной поверхности (при $\varepsilon = 0$).

Из теории линейных алгебраических систем [26, 27] вытекает следующее условие существования и единственности коэффициентов $p$: $\Delta_0 \neq 0$.

Предложение. Пусть данные $t_i, \alpha_i, \beta_i, i = 1, 2, 3$, таковые, что выполнены условия 1)–5) и определитель системы (13) при этих значениях $t_i, i = 1, 2, 3$, не равен нулю. Тогда обратная задача имеет единственное решение, которое определяется равенствами $a_i = \frac{\Delta^0_{p_i}}{\Delta^0_p}, \Delta^{\varepsilon} \text{ и } \Delta^{0} \text{, i = 1, 2, 3, вычисляются по формулам (14) и (15).}$

В дальнейших исследованиях мы предполагаем включить в рассмотрение случай $\varepsilon \neq 0$, а также снять ограничения на число переменных, степень многочлена и количество листов медленной поверхности.

Автор выражает благодарность В. Г. Розанову за данную совместную статью [28], которая инициировала данную, коллегам за помощь в работе и рецензенту за справедливую критику и ценные замечания.

Литература

5. Тихонов А. Н. О задачах решения дифференциальных уравнений от модального параметра // Мат. сб.—1948—Т. 22 (64), № 2.—С. 193–204.
7. Коновалов Л. И. О гладкости медленной поверхности сингулярно возмущенных систем // Сб. жури. индуст. математики.—2002.—Т. 5, № 2 (10).—С. 100–125.
8. Коновалов Л. И., Володкин Е. П. Параметризация и качественный анализ сингулярной системы в математической модели реакции катализитического окисления // Сб. жури. индуст. математики.—2012.—Т. 15, № 1 (49).—С. 43–52.
13. Алексеев А. С. Некорректные обратные задачи теории распространения водя 1, 2 // Изв. АН СССР. Сер. геофизики.—1962.—№ 11.—С. 1514–1531.
14. Кабанов С. И. Обратные и некорректные задачи.—Новосибирск: Сибирское научное изд-во, 2009.—С. 156.
DIRECT AND INVERSE PROBLEMS FOR A SINGULAR SYSTEM WITH SLOW AND FAST VARIABLES IN CHEMICAL KINETICS

Kononenko L. I.

Direct and inverse problems for singular systems with small parameter are stated, which describe catalytic reactions in chemical kinetics. The solution of the direct problem is based on the method of integral manifolds. The inverse problem reduces to finding the coefficients of the polynomial in the right-hand part of the slow equation according to the solution given on the slow surface of the system. The above arguments make it possible to obtain existence and uniqueness conditions for the coefficients in the right-hand part of the slow subsystem of the degenerate system.

Key words: mathematical modeling, singularly perturbed system, integral manifold, slow surface, inverse problem.