

НАЗАРОВ В. И., ЯЗОВЦЕВА О. С.
ЧИСЛЕННЫЙ МЕТОД УСТАНОВЛЕНИЯ СООТВЕТСТВИЯ
МЕЖДУ НАЧАЛЬНЫМИ ТОЧКАМИ
ЛОКАЛЬНО АСИМПТОТИЧЕСКИ ЭКВИВАЛЕНТНЫХ СИСТЕМ

Аннотация. В статье приводится методика расчета начальных точек системы обыкновенных дифференциальных уравнений через начальные точки локально асимптотически эквивалентной системы. Численное решение нелинейной системы было найдено с использованием (4,2)-метода. Численный расчет интегрального отображения, устанавливающего соответствие между начальными значениями, был проведен при помощи метода Симпсона. Рассчитанное отображение обеспечивает локальную асимптотическую эквивалентность систем, что дает возможность исследования решения линейного приближения вместо нелинейной системы.

Ключевые слова: нелинейные обыкновенные дифференциальные уравнения, локальная покомпонентная асимптотическая эквивалентность, пиролиз этана, химическая кинетика, (4,2)-метод, метод Симпсона.

NAZAROV V. I., YAZOVTSEVA O. S.
NUMERICAL METHOD OF MAPPING BETWEEN INITIAL POINTS
OF LOCALLY ASYMPTOTIC EQUIVALENT SYSTEMS

Abstract. The article presents the method of calculating the initial points of a system of ordinary differential equations by the initial points of a locally asymptotic equivalent system. The numerical solution of the nonlinear system was found using the (4,2)-method. The numerical calculation of the integral mapping between the initial values was carried out using the Simpson method. The calculated mapping provides locally asymptotic equivalence of the systems, which makes it possible to seek the solutions of the linear approximation instead of the nonlinear system.

Keywords: nonlinear ordinary differential equations, locally component-wise asymptotic equivalence, ethane pyrolysis, chemical kinetics, (4,2)-method, Simpson method.

При проведении численного моделирования химических процессов зачастую приходится сталкиваться с проблемой решения жестких по части компонент нелинейных систем обыкновенных дифференциальных уравнений. Решение задачи Коши для таких систем требует применения особых методов, но даже использование специализированных методик не дает приемлемого сокращения временных затрат при проведении численного эксперимента. В данном случае удобно использовать систему, локально асимптотически эквивалентную исследуемой. В качестве такой системы можно использовать линейное

приближение. Такой подход изложен в работах [1-4], где приведены достаточные условия асимптотической эквивалентности для систем обыкновенных дифференциальных уравнений.

Рассмотрим нелинейную систему обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\begin{cases} \dot{x}_1 = -k_1x_1 - 2k_2x_1^2 \\ \dot{x}_2 = k_1x_1 + k_2x_1^2 \\ \dot{x}_3 = k_1x_1 \\ \dot{x}_4 = 2k_2x_1^2 \end{cases} \quad (1)$$

Здесь $t \geq 0$; x_i – концентрации веществ C_2H_6 , C_2H_4 , H_2 , CH_4 соответственно, $x_i \geq 0, (i = \overline{1,4})$; $k_1 > 0, k_2 > 0$ – константы скоростей химических реакций. Система (1) соответствует кинетической модели брутто-реакции пиролиза этана [3, 5, 6]. Рассмотрим задачу Коши с начальными данными $x_1(0) = 1, x_2(0) = 0, x_3(0) = 0, x_4(0) = 0$ для системы (1).

В векторной форме данная система имеет вид:

$$\dot{x} = Ax + P(x),$$

где $x = colon(x_1, x_2, x_3, x_4)$.

$$A = \begin{pmatrix} -k_1 & 0 & 0 & 0 \\ k_1 & 0 & 0 & 0 \\ k_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad P(x) = \begin{pmatrix} -2k_2x_1^2 \\ k_2x_1^2 \\ 0 \\ 2k_2x_1^2 \end{pmatrix}.$$

Ее линейное приближение имеет вид:

$$\begin{cases} \dot{y}_1 = -k_1y_1 \\ \dot{y}_2 = k_1y_1 \\ \dot{y}_3 = k_1y_1 \\ \dot{y}_4 = 0 \end{cases} \quad (2)$$

Локальная покомпонентная асимптотическая эквивалентность для систем (1) и (2) показана в [3].

Ставится задача о нахождении начальных данных для системы (2) через известные начальные данные системы (1).

В работе [4] построено отображение, устанавливающее соотношение между начальными точками исследуемой системы и ее линейного приближения:

$$y^{(0)} = x^{(0)} + \int_0^{+\infty} Y(-s)P(x(s))ds, \quad (3)$$

где $x(t) = x(t; 0, x^{(0)})$, $y(t) = Y(t)y^{(0)}$, $Y(t)$ – фундаментальная матрица линейного приближения.

Для системы (2) она имеет вид:

$$Y(t) = \begin{pmatrix} e^{-k_1 t} & 0 & 0 & 0 \\ 1 - e^{-k_1 t} & 1 & 0 & 0 \\ 1 - e^{-k_1 t} & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Отображение (3) в координатной форме имеет следующий вид:

$$y_i^{(0)} = x_i^{(0)} + \sum_{j=1}^n \int_0^{+\infty} y_{ij}(-s) P_j(x(s)) ds, i = \overline{1,4}, \quad (4)$$

где $y_{ij}(t)$ – элементы фундаментальной матрицы $Y(t)$ системы (2).

Представим отображение (3) в виде

$$y_i^{(0)} = x_i^{(0)} + \sum_{j=1}^n \int_0^b y_{ij}(-s) P_j(x(s)) ds + \sum_{j=1}^n \int_b^{+\infty} y_{ij}(-s) P_j(x(s)) ds,$$

где b определяется из условия [4]:

$$b > \frac{1}{k_1} \ln \left(\frac{2k_2 c_0}{k_1} \right),$$

при этом c_0 из формулы (3.8) из работы [4].

Таким образом,

$$\tilde{y}_i^{(0)} = x_i^{(0)} + \sum_{j=1}^n \int_0^b y_{ij}(-s) P_j(x(s)) ds. \quad (5)$$

Для численного решения системы (1) применялся (4,2)-метод [7; 8], для вычисления интеграла из выражения (4) использовался метод Симпсона [9; 10].

Расчет начальных точек для системы линейного приближения проведен для различных значений констант скоростей химических реакций k_1 и k_2 , которые соответствуют протеканию реакции пиролиза этана при различных температурах и рассчитаны из уравнения Аррениуса [5]. Результаты, рассчитанные с точностью $\varepsilon = 0.001$, представлены в таблице.

Таблица

Расчет начальных точек для решений системы линейного приближения

T, K	800	900	1000	1200
k_1	0.503	32.832	928.979	139822
k_2	0.073	6.625	244.927	55056.8
\tilde{y}_1^0	0.777	0.875	0.790	0.989
\tilde{y}_2^0	0.169	0.091	0.150	0.005
\tilde{y}_3^0	0.115	0.058	0.090	0.000
\tilde{y}_4^0	0.121	0.069	0.118	0.010

На рисунке приведены графики решений систем (1) и (2), между начальными значениями которых установлено соотношение в соответствии с формулой (4), при значениях k_1 и k_2 , соответствующих температуре $T = 1000$ К.

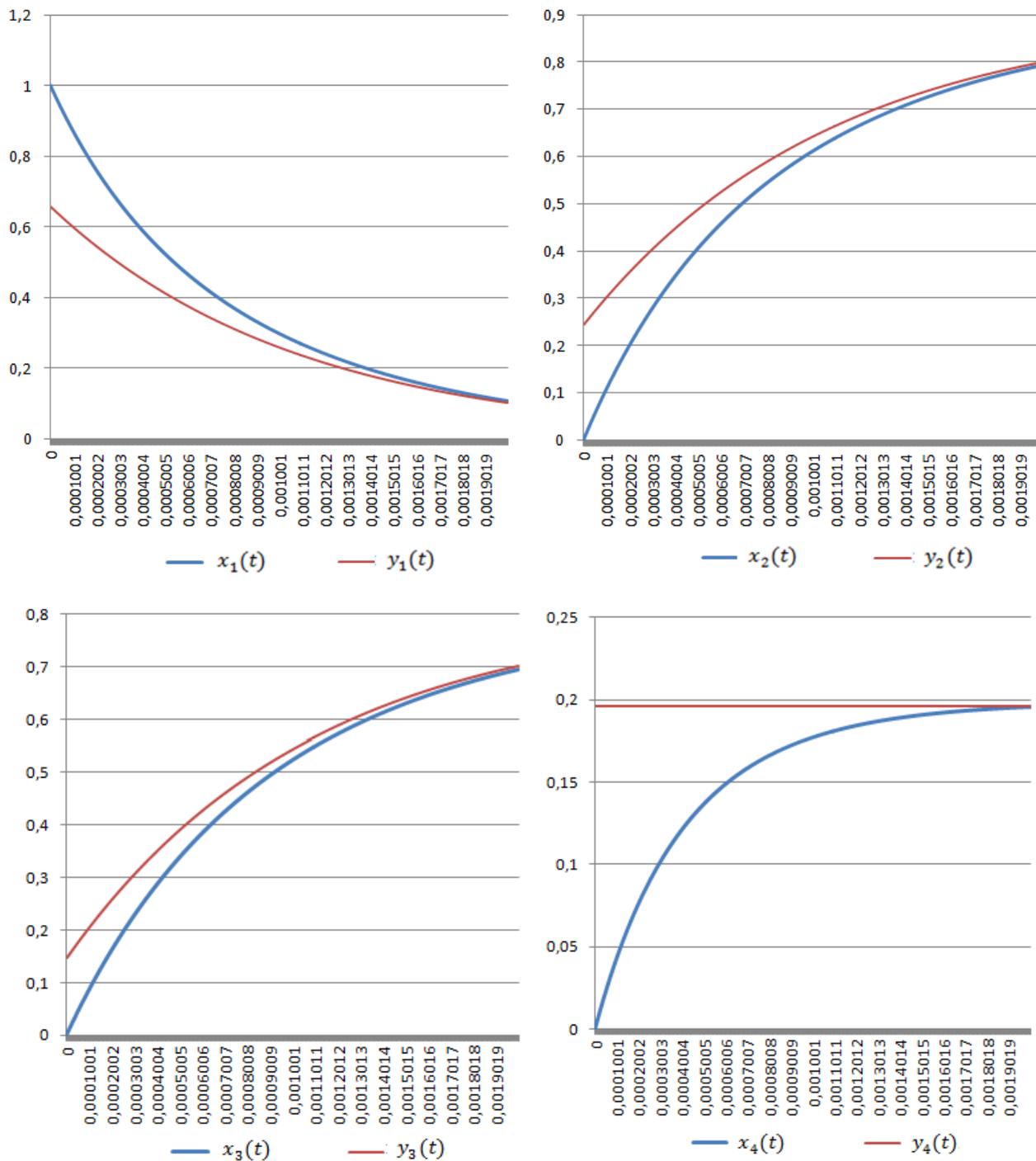


Рис. Графики решений $x_i(t)$ и $y_i(t)$, между начальными значениями которых установлено взаимно-однозначное соответствие.

Таким образом, по начальным точкам нелинейной системы обыкновенных дифференциальных уравнений были рассчитаны начальные точки ее линейного приближения, которые обеспечивают локальную покомпонентную асимптотическую эквивалентность систем согласно формуле (4).

Из численного эксперимента видно, что поведение решений системы (1), начиная с момента времени равного 0,002 с, мало отличается от поведения решений системы (2). Это обуславливается достаточно большими значениями констант скоростей химических реакций при температуре 1000 К, а, следовательно, и высокой скоростью протекания стадий химического превращения.

Данная методика позволяет при проведении расчетов использовать вместо численного решения жесткой системы аналитическое решение ее линейного приближения, что значительно сокращает требования к вычислительным мощностям и повышает точность расчетов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Воскресенский Е. В. Методы сравнения в нелинейном анализе. – Саратов: Изд-во Саратовского ун-та, 1990. – 224 с.
2. Воскресенский Е. В. Асимптотические методы: теория и приложения: монография. – Саранск, 2000. – 300 с.
3. Язовцева О. С. Локальная покомпонентная асимптотическая эквивалентность и ее применение к исследованию устойчивости по части переменных [Электронный ресурс] // Огарев-online. – 2017. – № 13. – Режим доступа: <http://journal.mrsu.ru/arts/lokalnaya-pokomponentnaya-asimptoticheskaya-ekvivalentnost-i-ee-primeneniye-k-issledovaniyu-ustojchivosti-po-chasti-peremennykh>.
4. Шаманаев П. А., Язовцева О. С. Достаточные условия локальной покомпонентной асимптотической эквивалентности нелинейных систем обыкновенных дифференциальных уравнений и ее приложение к устойчивости по части переменных // Журнал Средневолжского математического общества. – 2017. – Т. 19, № 1. – С. 102–115.
5. Губайдуллин И. М., Пескова Е. Е., Язовцева О. С. Математическая модель динамики многокомпонентного газа на примере брутто-реакции пиролиза этана [Электронный ресурс] // Огарев-online. – 2016. – № 20. – Режим доступа: <http://journal.mrsu.ru/arts/matematiceskaya-model-dinamiki-mnogokomponentnogo-gaza-na-primere-brutto-reakcii-piroliza-etana>.

6. Жалнин Р. В., Пескова Е. Е., Стадниченко О. А., Тишкин В. Ф. Математическое моделирование динамики многокомпонентного газа с использованием WENO схем на примере пиролиза этана // Журнал Средневолжского математического общества. – 2016. – Т. 18, № 3. – С. 98–106.
7. Галанин М. П., Ходжаева С. Р. Методы решения жестких обыкновенных дифференциальных уравнений. Результаты тестовых расчетов // Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша. – 2013. – № 98. – 29 с.
8. Назаров В. И., Пескова Е. Е., Язовцева О. С. Численное моделирование жестких систем с использованием (4,2)-метода [Электронный ресурс] // Огарев-online. – 2017. – № 13. – Режим доступа: <http://journal.mrsu.ru/arts/chislennoe-modelirovanie-zhestkix-sistem-s-ispolzovaniem-42-metoda>.
9. Самарский А. А., Гулин А. В. Численные методы: учеб. пособие для вузов. – М.: Наука, 1989. – 432 с.
10. Шаманаев П. А. Ляпуновские преобразования и устойчивость движения: автореф. дис. ... канд. физ.-мат. наук. – Саранск, 1997. – 16 с.