

УДК 541.124+517.9

Бинарные соответствия в задачах химической кинетики¹

Гутман А.Е., Кононенко Л.И.
Институт математики им. С.Л.Соболева СО РАН,
Новосибирский государственный университет
gutman@math.nsc.ru, larak@math.nsc.ru

Аннотация

Показано, как бинарные соответствия могут быть использованы для простой формализации понятия задачи, определения основных компонентов задач, их свойств и конструкций (условие задачи, ее данные и искомые, разрешимость и однозначная разрешимость задачи, обратная задача, композиция и ограничение задач). Рассмотрены топологические задачи и связанные с ними понятия устойчивости и корректности. Особое внимание уделено задачам с параметрами. (Детали см. в [1].)

В качестве иллюстрации рассмотрена система дифференциальных уравнений, описывающая процесс химической кинетики, а также обратная к ней задача.

1 Формализация понятия задачи

Определение 1. *Задача* — это соответствие между элементами двух множеств, т. е. тройка $P = (A, B, C)$, где A и B — множества и $C \subseteq A \times B$. Множества A , B и C обозначаются $\text{Dom } P$, $\text{Im } P$ и $\text{Gr } P$ и называются *областью данных*, *областью искомых* и *условием задачи* P .

Включение $(a, b) \in \text{Gr } P$ записывается в виде $P(a, b)$ и трактуется как условие, выражающее соответствие искомого b данному a . Таким образом, для задачи P подразумевается следующее неформальное прочтение:

Для данных $a \in \text{Dom } P$ найти $b \in \text{Im } P$,
удовлетворяющие условию $P(a, b)$.

Определение 2. *Решением* задачи P для данного $a \in \text{Dom } P$ называется любое искомое $b \in \text{Im } P$, удовлетворяющее условию $P(a, b)$.

Множество всех решений задачи P для данного a обозначается символом $P[a]$. Таким образом,

$$P[a] = \{b \in \text{Im } P : P(a, b)\}, \quad a \in \text{Dom } P.$$

Задача P называется *разрешимой* для данного a , если $P[a] \neq \emptyset$, т. е. для данного a задача P имеет хотя бы одно решение.

Множество

$$\{a \in \text{Dom } P : P[a] \neq \emptyset\}$$

называется *областью разрешимости* задачи P и обозначается символом $\text{dom } P$. В случае $\text{dom } P = \text{Dom } P$ задачу P называют *разрешимой* или, точнее, *всюду разрешимой*.

¹Работа второго автора поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (проект № 15-01-00745).

Определение 3. Задача P однозначно разрешима для $a \in \text{Dom } P$, если для данного a задача P имеет единственное решение, т. е. $P[a] = \{b\}$ для некоторого $b \in \text{Im } P$. Соответствующее решение b обозначается через $P^s(a)$. Множество

$$\text{dom } P^s = \{a \in \text{Dom } P : P \text{ однозначно разрешима для } a\}$$

называется *областью однозначной разрешимости* задачи P , а функция

$$P^s : \text{dom } P^s \rightarrow \text{Im } P, \quad P^s : a \mapsto P^s(a)$$

называется *функцией решения* задачи P .

Говорят, что задача P однозначно разрешима на множестве $D \subseteq \text{Dom } P$, если $D \subseteq \text{dom } P^s$. Задачу P называют *однозначно разрешимой* или, точнее, *всюду однозначно разрешимой*, если она однозначно разрешима на $\text{Dom } P$, т. е. $\text{dom } P^s = \text{Dom } P$.

Определение 4. *Обратной задачей* по отношению к задаче

$$P = (\text{Dom } P, \text{Im } P, \text{Gr } P)$$

называется *обратное соответствие*

$$P^{-1} := (\text{Im } P, \text{Dom } P, (\text{Gr } P)^{-1}),$$

где

$$(\text{Gr } P)^{-1} = \{(b, a) : (a, b) \in \text{Gr } P\}.$$

Определение 5. *Композицией задач* P и Q называется их композиция как соответствий, представляющая собой задачу

$$Q \circ P := (\text{Dom } P, \text{Im } Q, \text{Gr } Q \circ \text{Gr } P)$$

с условием

$$\begin{aligned} \text{Gr } Q \circ \text{Gr } P &= \{(a, c) \in \text{Dom } P \times \text{Im } Q : \\ &(\exists b \in \text{Im } P \cap \text{Dom } Q) P(a, b) \& Q(b, c)\}. \end{aligned}$$

Композиция $Q \circ P$ обычно рассматривается в случае $\text{Im } P = \text{Dom } Q$.

Определение 6. *Ограничением (сужением)* задачи P на $A \subseteq \text{Dom } P$ и $B \subseteq \text{Im } P$ называется задача $P|_A^B := (A, B, \text{Gr } P \cap (A \times B))$.

Частные случаи ограничений: $P|_A := P|_A^{\text{Im } P}$, $P|_B := P|_{\text{Dom } P}^B$.

Ограничение задачи можно определить посредством композиции. Для любых X и Y рассмотрим задачу $\text{Id}_X^Y := (X, Y, I_X^Y)$, где

$$I_X^Y = \{(z, z) : z \in X \cap Y\} = \{(x, y) \in X \times Y : x = y\}.$$

Тогда для любой задачи P и любых $A \subseteq \text{Dom } P$ и $B \subseteq \text{Im } P$ справедливы равенства

$$P|_A = P \circ \text{Id}_A^{\text{Dom } P}, \quad P|_B = \text{Id}_{\text{Im } P}^B \circ P, \quad P|_A^B = \text{Id}_{\text{Im } P}^B \circ P \circ \text{Id}_A^{\text{Dom } P}.$$

Определение 7. Под *изоморфизмом* между задачами P и Q понимается такая пара (f, g) биективных отображений $f : \text{Dom } P \rightarrow \text{Dom } Q$, $g : \text{Im } P \rightarrow \text{Im } Q$, что

$$\text{Gr } Q = \{(f(a), g(b)) : (a, b) \in \text{Gr } P\}.$$

Задачи называются *изоморфными*, если между ними существует изоморфизм.

Определение 8. Задачу P условимся называть *топологической*, если ее область данных $\text{Dom } P$ и область искомого $\text{Im } P$ снабжены какими-либо топологиями, т. е. являются топологическими пространствами.

Изоморфизм (f, g) между топологическими задачами называется *топологическим изоморфизмом*, если каждое из отображений f и g является топологическим изоморфизмом (т. е. гомеоморфизмом).

Определение 9. Топологическая задача P называется *устойчивой в точке* $a \in \text{dom } P$, если соответствие P полунепрерывно сверху в этой точке, т. е. для любой окрестности V множества $P[a]$ в $\text{Im } P$ прообраз $P^{-1}[V]$ является окрестностью точки a в $\text{dom } P$.

Говорят, что задача P *устойчива на множестве* $D \subseteq \text{dom } P$, если P устойчива в каждой точке $a \in D$. Задачу P называют *устойчивой* или, точнее, *всюду устойчивой*, если P устойчива на $\text{dom } P$.

Замечание 1. Если a является внутренней точкой $\text{dom } P^s$ относительно множества $\text{dom } P$ (т. е. $a \in G \cap \text{dom } P \subseteq \text{dom } P^s$ для открытого $G \subseteq \text{Dom } P$), *устойчивость* P в a равносильна *непрерывности* P^s в a .

Если D лежит во внутренности $\text{dom } P^s$ относительно $\text{dom } P$ (т. е. $D \subseteq G \cap \text{dom } P \subseteq \text{dom } P^s$ для открытого $G \subseteq \text{Dom } P$), то *устойчивость* P на D равносильна *непрерывности* P^s на D . В частности, *устойчивость* однозначно разрешимой задачи равносильна ее *непрерывности*.

Определение 10. Топологич. задача P (локально) *корректна в точке* $a \in \text{Dom } P$, если a — внутренняя точка $\text{dom } P^s$ и P устойчива в точке a . Иными словами, задача корректна в точке a , если при данных, достаточно близких к a , она имеет единственное решение, причем непрерывно зависящее от данных при стремлении к a .

Задача P (условно) *корректна на множестве* $D \subseteq \text{Dom } P$, если P корректна в каждой точке $a \in D$. Задача P *корректна*, если P корректна на $\text{Dom } P$. Таким образом, корректная задача — это однозначно разрешимая и устойчивая (или, что то же самое, непрерывная) задача.

Определение 11. Под *семейством* $(v_i)_{i \in I}$ традиционно понимается определенная на I функция, а запись v_i символизирует значение этой функции в точке $i \in I$.

Для произвольного семейства $(V_i)_{i \in I}$ символом $\prod_{i \in I} V_i$ обозначается соответствующее *декартово произведение* — совокупность всех таких семейств $(v_i)_{i \in I}$, что $v_i \in V_i$ для каждого индекса $i \in I$.

Для любых $\pi: X \rightarrow \prod_{i \in I} V_i$, $i \in I$ и $J \subseteq I$ вводятся в рассмотрение функции $\pi_i: X \rightarrow V_i$ и $\pi_J: X \rightarrow \prod_{j \in J} V_j$, действующие согласно формулам

$$\pi_i(x) := \pi(x)_i, \quad \pi_J(x) := \pi(x)|_J$$

для всех $x \in X$.

Определение 12. *Параметризацией* множества X называется любое инъективное отображение π , определенное на $\text{Dom } \pi := X$ и действующее в декартово произведение $\text{Im } \pi := \prod_{i \in I} V_i$ какого-либо семейства.

Множество I называется *множеством параметров* и обозначается $\text{Par } \pi$, элементы $i \in \text{Par } \pi$ именуются *параметрами*, $\text{Im } \pi_i := V_i$ называется *областью значений параметра* i , а $\pi_i(x) \in \text{Im } \pi_i$ — *значением параметра* i для объекта $x \in X$.

Множество $\prod_{j \in J} V_j$ называется *областью значений набора* $J \subseteq \text{Par } \pi$ и обозначается символом $\text{Im } \pi_J$.

Множество, снабженное какой-либо параметризацией, называется *параметризованным множеством*.

Параметризация множества X по умолчанию обозначается символом π или, если необходимо уточнение, символом π^X .

Определение 13. Задача P называется *параметризованной задачей* (или *задачей с параметрами*), если ее область данных $\text{Dom } P$ и область искомых $\text{Im } P$ являются параметризованными множествами.

Любую задачу можно считать параметризованной, если условиться снабжать не параметризованные области X тривиальными параметризациями с единственным параметром: $\pi_1(x) = x$ для всех $x \in X$.

Определение 14. Пусть π — параметризация A , $a \in A$, $J \subseteq \text{Par } \pi$, $J' := \text{Par } \pi \setminus J$. Символом $\text{Res}_J^a(A)$ обозначается задача $(\text{Im } \pi_J, A, R_J^a)$, где

$$R_J^a = \{(v, b) : v \in \text{Im } \pi_J, b \in A, \pi_J(b) = v, \pi_{J'}(b) = \pi_{J'}(a)\},$$

т. е. задача восстановления элемента A по данным значениям параметров J при фиксированных остальных параметрах.

В силу инъективности параметризации π задача $\text{Res}_J^a(A)$ однозначно разрешима на множестве

$$\text{dom } \text{Res}_J^a(A) = \{\pi_{J'}(b) : b \in A, \pi_{J'}(b) = \pi_{J'}(a)\},$$

и ее решение для $v \in \text{dom } \text{Res}_J^a(A)$ определяется формулой

$$\text{Res}_J^a(A)^s(v) = \pi^{-1}(v \otimes \pi_{J'}(a)), \quad \text{где } (v \otimes w)_i = \begin{cases} v_i, & \text{если } i \in J; \\ w_i, & \text{если } i \notin J. \end{cases}$$

Определение 15. Пусть π — параметризация топологического пространства A , $a \in A$, $J \subseteq \text{Par } \pi$. Говорят, что набор параметров J *локально свободен* в точке a , если область разрешимости $\text{dom } \text{Res}_J^a(A)$ задачи $\text{Res}_J^a(A)$ является окрестностью точки $\pi_J(a)$ в топологическом пространстве $\text{Im } \pi_J$.

Таким образом, для локально свободного набора параметров реализуемы любые достаточно малые изменения значений при фиксированных значениях остальных параметров.

Параметр i *локально свободен* в точке a , если таковым является набор $\{i\}$.

Определение 16. Пусть P — параметризованная топологическая задача, $a \in \text{dom } P$, $\pi := \pi^{\text{dom } P}$, $J \subseteq \text{Par } \pi$, $J' := \text{Par } \pi \setminus J$. Задача P называется *устойчивой в точке a относительно J* , если задача $P \circ \text{Res}_J^a(\text{dom } P)$ устойчива в точке $\pi_J(a)$. В случае $J = \{i\}$ говорят об *устойчивости относительно параметра i* .

Если a является внутренней точкой $\text{dom } P^s$ относительно $\text{dom } P$, устойчивость однозначно разрешимой задачи P в точке a относительно J равносильна непрерывности в точке a функции

$$v \in \pi_J[\text{dom } R] \mapsto P^s(R^s(v)), \quad \text{где } R := \text{Res}_J^a(\text{Dom } P).$$

Последнее, в свою очередь, означает *непрерывную зависимость* решения $P^s(b)$ от значений $\pi_J(b)$ параметров J при стремлении $\pi_J(b)$ к $\pi_J(a)$ с соблюдением равенства $\pi_{J'}(b) = \pi_{J'}(a)$.

Определение 17. Пусть P — параметризованная топологическая задача, $\varepsilon \in \text{Par } \pi$. О задаче P говорят как о «задаче с малым параметром ε », если $\text{Im } \pi_\varepsilon \subseteq \mathbb{R}$, число 0 является предельной точкой $\text{Im } \pi_\varepsilon$, и рассматривается вопрос о каком-либо асимптотическом аспекте задачи P при значениях параметра ε , близких к 0 — например, об устойчивости P относительно ε в точке a , удовлетворяющей условию $\pi_\varepsilon(a) = 0$.

2 Пример из химической кинетики

Пример 1. В качестве иллюстрации рассмотрим сингулярно возмущенную систему обыкновенных дифференциальных уравнений, моделирующую процессы химической кинетики и горения.

Пусть $n, m \in \mathbb{N}$, $X := \mathbb{R}^m$, Y — область в \mathbb{R}^n , $T := \mathbb{R}$, $E := \{\varepsilon \in \mathbb{R} : 0 \leq \varepsilon \leq \varepsilon_0\}$, $0 < \varepsilon_0 \in \mathbb{R}$, $F := C(X \times Y \times T \times E, \mathbb{R}^m)$, $G := C(X \times Y \times T \times E, \mathbb{R}^n)$.

Рассмотрим задачу P с областью данных $\text{Dom } P = F \times G \times E$, областью искомого $\text{Im } P = C^1(T, X) \times C^1(T, Y)$ и условием

$$P((f, g, \varepsilon), (x, y)) \Leftrightarrow \begin{cases} \dot{x}(t) = f(x(t), y(t), t, \varepsilon), \\ \varepsilon \dot{y}(t) = g(x(t), y(t), t, \varepsilon) \end{cases} \text{ для всех } t \in T,$$

где $f \in F$, $g \in G$, $\varepsilon \in E$, $x \in C^1(T, X)$, $y \in C^1(T, Y)$.

Задача P исследуется методом интегральных многообразий [2, 3, 4], который служит удобным аппаратом изучения многомерных сингулярно возмущенных систем дифференциальных уравнений, позволяющим понижать размерность систем.

Задача P имеет естественную параметризацию, где ε играет роль «малого параметра», что приводит к разделению системы на «медленную» и «быструю» подсистемы:

$$\dot{x}(t) = f(x(t), y(t), t, \varepsilon) \text{ и } \varepsilon \dot{y}(t) = g(x(t), y(t), t, \varepsilon).$$

Решение задачи P сводится к решению вырожденной системы, которая получается из исходной, если параметр ε формально положить равным нулю. Это следует из работ А. Н. Тихонова (см., например, [5]), в которых установлены факты о предельном переходе к решению вырожденной задачи при стремлении малого параметра к нулю.

Пример 2. Задача, обратная к P , состоит в нахождении неизвестных правых частей системы дифференциальных уравнений по некоторым данным о решении прямой задачи P . Тесная связь с вырожденной системой позволяет рассматривать случай $\varepsilon = 0$. Кроме того, предположим, что «медленная поверхность», определяемая уравнением

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

состоит из одного листа (относительно зависимости y от x), а правые части являются многочленами (что естественно для задач химической кинетики).

Итак, рассмотрим частный случай задачи P , в котором $m = n = 1$, $E = \{0\}$, функции $f \in F$ являются многочленами первой степени, а $g \in G$ удовлетворяет условиям теоремы о неявной функции, и поэтому уравнение

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

можно заменить уравнением вида

$$y(t) = h(x(t), t).$$

В результате возникнет следующая задача Q .

Пусть $h \in C^1(\mathbb{R}^2)$. Рассмотрим задачу Q с областью данных $\text{Dom } Q = \mathbb{R}^3$, областью искомого $\text{Im } Q = C^1(\mathbb{R})^2$ и условием

$$Q(f, (x, y)) \Leftrightarrow \begin{cases} \dot{x}(t) = f_1 + f_2 x(t) + f_3 y(t), \\ y(t) = h(x(t), t) \end{cases} \text{ для всех } t \in \mathbb{R},$$

где $f = (f_1, f_2, f_3) \in \mathbb{R}^3$, $x, y \in C^1(\mathbb{R})$.

Пример 3. Обратная к Q задача Q^{-1} , формально соответствующая определению и имеющая пары функций $(x, y) \in C^1(\mathbb{R})^2$ в качестве данных, очень проста и не практична. В роли данных более адекватны конечные наборы значений функций или их производных, а не всюду определенные функции.

Соответствующая корректировка обратной задачи реализуется посредством композиции задачи Q^{-1} и вспомогательной задачи R с областью данных $\text{Dom } R = (\mathbb{R}^3)^3$, областью искомого $\text{Im } R = C^1(\mathbb{R})^2$ и условием

$$R((t, \alpha, \beta), (x, y)) \Leftrightarrow \begin{cases} x(t_1) = \alpha_1, & x(t_2) = \alpha_2, & x(t_3) = \alpha_3, \\ \dot{x}(t_1) = \beta_1, & \dot{x}(t_2) = \beta_2, & \dot{x}(t_3) = \beta_3, \end{cases}$$

где $t, \alpha, \beta \in \mathbb{R}^3$, $x, y \in C^1(\mathbb{R})$.

Пример 4. По сравнению с формальной обратной задачей Q^{-1} композиция $Q^{-1} \circ R$ более практична и представляет собой следующую задачу:

По данным $t, \alpha, \beta \in \mathbb{R}^3$ найти коэффициенты $f \in \mathbb{R}^3$, для которых существуют функции $x, y \in C^1(\mathbb{R})$, удовлетворяющие условию

$$\begin{cases} x(t_1) = \alpha_1, & x(t_2) = \alpha_2, & x(t_3) = \alpha_3, \\ \dot{x}(t_1) = \beta_1, & \dot{x}(t_2) = \beta_2, & \dot{x}(t_3) = \beta_3, \\ \dot{x}(t) = f_1 + f_2 x(t) + f_3 y(t), \\ y(t) = h(x(t), t) \end{cases} \quad \text{для всех } t \in \mathbb{R}.$$

Следующий результат получен в [6].

Теорема 1. Если $t, \alpha \in \mathbb{R}^3$ удовлетворяют условию

$$\Delta := \begin{vmatrix} 1 & \alpha_1 & h(\alpha_1, t_1) \\ 1 & \alpha_2 & h(\alpha_2, t_2) \\ 1 & \alpha_3 & h(\alpha_3, t_3) \end{vmatrix} \neq 0$$

то при любых $\beta \in \mathbb{R}^3$ задача $Q^{-1} \circ R$ однозначно разрешима для данных (t, α, β) и ее решение $(f_1, f_2, f_3) = (Q^{-1} \circ R)^s(t, \alpha, \beta)$ вычисляется по классическим формулам Крамера

$$f_i = \Delta_i / \Delta,$$

где Δ_i — определитель матрицы, полученной из приведенной выше матрицы заменой i -го столбца столбцом $\beta = (\beta_1, \beta_2, \beta_3)$.

Следующий критерий позволяет выяснить, в каких случаях существует набор чисел t_i , удовлетворяющий условию теоремы 1.

Теорема 2. Пусть $n \in \mathbb{N}$ и пусть $\varphi_1, \dots, \varphi_n$ — вещественные функции, определенные на каком-либо множестве T .

Семейство функций $\varphi_1, \dots, \varphi_n: T \rightarrow \mathbb{R}$ линейно независимо тогда и только тогда, когда существуют $t_1, \dots, t_n \in T$ такие, что

$$\begin{vmatrix} \varphi_1(t_1) & \varphi_1(t_2) & \dots & \varphi_1(t_n) \\ \varphi_2(t_1) & \varphi_2(t_2) & \dots & \varphi_2(t_n) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \varphi_n(t_1) & \varphi_n(t_2) & \dots & \varphi_n(t_n) \end{vmatrix} \neq 0.$$

Из теорем 1 и 2 непосредственно вытекает следующее условие однозначной разрешимости «обратной задачи» $Q^{-1} \circ R$.

Теорема 3. В рамках задачи Q рассмотрим функции $x, y, e: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, где $y(t) = h(x(t), t)$ и $e(t) = 1$ для всех $t \in \mathbb{R}$.

Если функции x, y, e линейно независимы, то существуют такие числа t_1, t_2, t_3 , что при любых $\beta_1, \beta_2, \beta_3$ «обратная задача» $Q^{-1} \circ R$ однозначно разрешима для данных $t_1, t_2, t_3, x(t_1), x(t_2), x(t_3), \beta_1, \beta_2, \beta_3$.

Библиографический список

1. Gutman A. E., Kononenko L. I. Formalization of inverse problems and applications to systems of equations with parameters // Geometric analysis and control theory: abstracts. — Novosibirsk: Sobolev Institute of Mathematics, 2016. — P. 40–42.
2. Митропольский Ю. А., Лыкова О. Б. Интегральные многообразия в нелинейной механике. — М.: Наука, 1963.
3. Васильева А. В., Бутузов В. Ф. Сингулярно возмущенные уравнения в критических случаях. — М.: Изд-во МГУ, 1978.
4. Гольдштейн В. М., Соболев В. А. Качественный анализ сингулярно возмущенных систем. — Новосибирск: Изд. Ин-та математики СО АН СССР, 1988.
5. Тихонов А. Н. О зависимости решений дифференциальных уравнений от малого параметра // Мат. сборник. — 1948. — Т. 22 (64), № 2. — С. 193–204.
6. Кононенко Л. И. Задача идентификации для сингулярных систем с малым параметром в химической кинетике // Сиб. электрон. матем. изв. — 2016. — Т. 13. — С. 175–180.