

ПОВЕДЕНИЕ ГЛОБАЛЬНОЙ ПОГРЕШНОСТИ НА РЕШЕНИЯХ ОДНОЙ КИНЕТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ОКИСЛЕНИЯ ВОДОРОДА*

Е. А. ИВАНОВА

Новосибирский государственный университет, Россия

e-mail: iea78@mail.ru

Kinetic model of the catalytic hydrogen oxidation is considered. Global error behavior is analyzed simultaneously with long-time numerical determination of the solution. The method of the principal error equation integrating is applied for the global error analysis.

1. Постановка задачи

Для систем нелинейных одномерных дифференциальных уравнений (ОДУ), описывающих различные физические и химические процессы, как правило, невозможно найти точное решение. Поэтому, применяя тот или иной численный метод, находят некоторое приближенное решение, отличающееся от точного. Определение величины возникающих погрешностей позволяет говорить о точности получаемых результатов, что особенно важно, когда интегрирование ведется на больших интервалах времени. Одной из основных проблем в этом случае является оценка глобальной погрешности (ошибки) дискретизации — разности $\varepsilon = y_k - x(t_k)$ между точным решением $x(t_k)$ и решением дискретной задачи y_k .

В литературе, например в [2, 3], описан ряд методов оценивания глобальной ошибки дискретизации. Мы рассмотрим метод построения численной оценки глобальной погрешности, основанный на решении системы для главного члена асимптотического разложения глобальной погрешности. Этот метод применен при исследовании периодических решений кинетической модели гетерогенной каталитической реакции окисления водорода [1]. Численные результаты сопоставлены с теоретическими, полученными на основе теории мультипликаторов периодического решения [2]. Кроме того, с помощью этого метода проанализировано поведение глобальной ошибки на решениях, являющихся сепаратрисами седла, в окрестности значения параметра, при котором периодическое решение вырождается в петлю сепаратрисы простого седла.

2. Метод оценки глобальной ошибки дискретизации

Для решения задачи Коши для автономной системы ОДУ:

$$\dot{x} = f(x), \quad x(0) = x_0,$$

*Работа выполнена при поддержке гранта INTAS-99-01882.

© Е. А. Иванова, 2003.

где $x \in R^n$; f — достаточно гладкая функция, применим численный метод и получим последовательность значений $\{y_k\}$, которая является приближением к решению исходной задачи. Проинтерполировав $\{y_k\}$ на весь интервал интегрирования, получим непрерывную кусочно-гладкую функцию $y(t)$ — решение задачи Коши для возмущенной системы:

$$\dot{y} = f(y) + \gamma\rho(t, y), \quad y(0) = x_0,$$

где $\gamma\rho(t, y)$ определяется локальной ошибкой дискретизации; γ — малый параметр, зависящий от средней длины шага сетки и порядка метода.

Рассмотрим асимптотическое разложение по γ глобальной ошибки дискретизации:

$$y(t) - x(t) = \gamma v(t) + \gamma u(t, \gamma), \quad u(t, \gamma) = o(\gamma).$$

Тогда функция $v(t)$, определяющая главный член асимптотического разложения, является решением следующей задачи Коши:

$$\begin{cases} \dot{v} = f_y(y)v + \rho(t, y), \\ v(0) = 0, \end{cases} \quad (1)$$

где $f_y(y)$ — матрица Якоби на приближенном решении $y(t)$.

Анализ поведения функции $v(t)$ как решения системы (1) дает информацию о поведении глобальной ошибки. Численный анализ функции $v(t)$ проводился при малых шагах сетки, т. е. $v(t)$ приближенно определялось как численное решение задачи (1). Шаг интегрирования уменьшался до тех пор, пока не достигались условия на асимптотике, а именно воспроизведение значений $v(t)$. Тогда глобальную ошибку можно оценить как $\gamma v(t)$.

3. Результаты

Рассмотрим кинетическую модель гетерогенной каталитической реакции окисления водорода, которая является семейством систем автономных ОДУ с параметром z [1]

$$\begin{aligned} \dot{x}_1 &= k_1(1 - x_1 - x_2)^2 - k_{-1}x_1^2 - 2k_{30}e^{-\mu_3 x_2}x_1^2x_2, \\ \dot{x}_2 &= k_2(1 - x_1 - x_2)^2 - k_{40}e^{-\mu_4 x_2 - \mu_5 z}x_2 - k_{30}e^{-\mu_3 x_2}x_1^2x_2 \end{aligned}$$

в области $\Omega \times [0, 1]$, где

$$\Omega = \{(x_1, x_2) : x_1 \geq 0, x_2 \geq 0, x_1 + x_2 \leq 1\}, \quad z \in [0, 1].$$

Данная модель описывает изменения поверхностных концентраций адсорбированных водорода (x_1) и кислорода (x_2). Параметр z определяет концентрацию кислорода, растворенного в приповерхностном слое катализатора.

Расчеты проводились при следующем наборе констант:

$$\begin{aligned} k_1 = 0.2, \quad k_{-1} = 0.0025, \quad (k_{-1} = 0.01), \quad k_2 = 15, \quad k_{30} = 100, \quad k_{40} = 2, \\ \mu_3 = 30, \quad \mu_4 = 12, \quad \mu_5 = -10. \end{aligned}$$

При $z = 0.4335207$ и $k_{-1} = 0.0025$ система имеет устойчивое T -периодическое решение (где период $T \approx 47.5569$), описывающее релаксационные колебания, происходящие в реальной системе. Решая задачу Коши с начальными условиями $x_{10} = 0.35000472$, $x_{20} = 0.57233309$ в

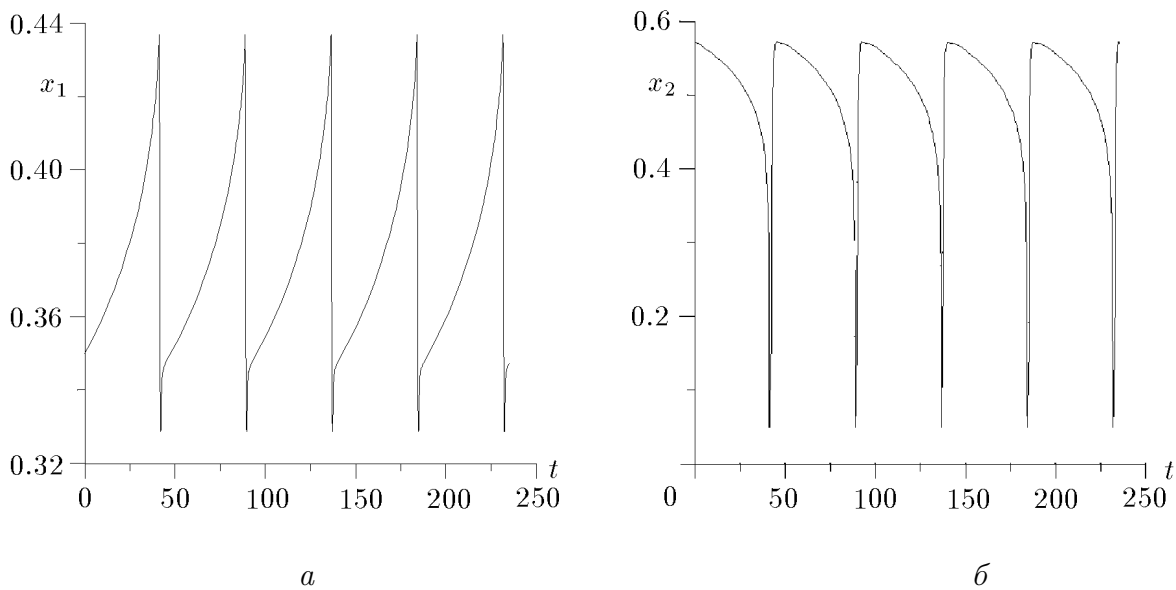


Рис. 1. Поведение x_1 (а) и x_2 (б) на интервале $[0, 5T]$, где $T \approx 47.5569$ при $z = 0.4335207$, $k_{-1} = 0.0025$.

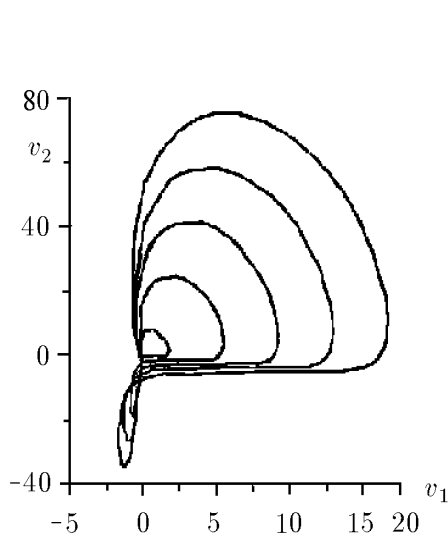


Рис. 2. Поведение функции $v(t)$ в фазовой плоскости на T -периодическом решении при $z = 0.4335207$, $k_{-1} = 0.0025$ (интервал $[0, 5T]$, где $T \approx 47.5569$, адаптивная сетка, средняя длина шага $h \approx 10^{-5} \dots 10^{-6}$).

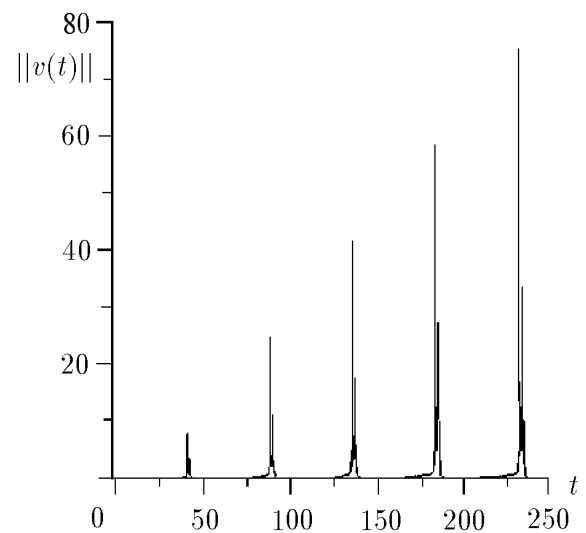


Рис. 3. Изменение $\|v(t)\|$ на T -периодическом решении при $z = 0.4335207$, $k_{-1} = 0.0025$ (интервал $[0, 5T]$, где $T \approx 47.5569$, адаптивная сетка, средняя длина шага $h \approx 10^{-5} \dots 10^{-6}$).

окрестности периодического решения методом Эйлера на равномерной и некоторой адаптивной сетке (рис. 1), мы провели анализ глобальной ошибки на интервале, равном пяти периодам. Получили, что поведение функции $v(t)$ на адаптивной сетке аналогично поведению на равномерной сетке, но значения $v(t)$ на адаптивной сетке примерно в три раза меньше. На рис. 2, 3 показано поведение $v(t)$ на адаптивной сетке со средней длиной ша-

га $10^{-5} \dots 10^{-6}$. Получили, что функции $v_{\min}(N)$ и $v_{\max}(N)$ имеют линейный рост как на адаптивной, так и на равномерной сетках, где

$$v_{\max}(N) = \max_{t \in [(N-1)T, NT]} \|v(t)\|, \quad v_{\min}(N) = \min_{t \in [(N-1)T, NT]} \|v(t)\|.$$

Этот результат согласуется с выводами работы [2] о зависимости поведения глобальной ошибки от значений мультипликаторов периодического решения.

При $k_{-1} = 0.01$ и z из интервала $[z_{\min}, z_{\max}]$ система имеет периодическое решение, вырождающееся при $z = z_{\max}$ в петлю сепаратрисы простого седла.

При итерационном уточнении z_{\max} , выбрав некоторое начальное приближение z_0 , определяли периодическое решение. Затем, задавая прямую l как нормаль к периодическому

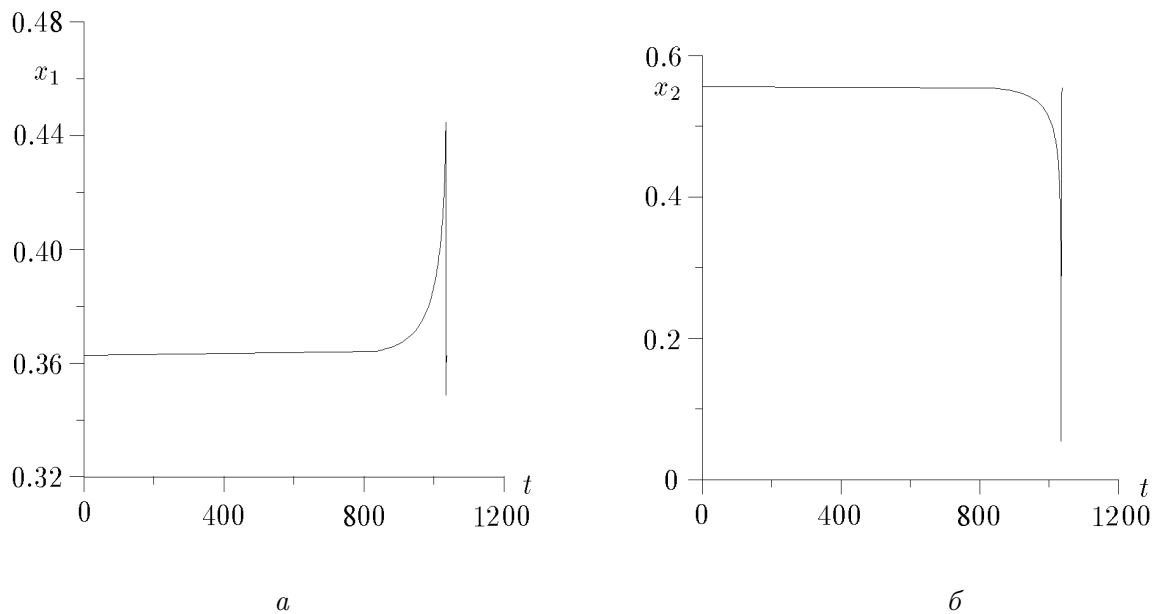


Рис. 4. Изменение $x_1(t)$ (а) и $x_2(t)$ (б) на выходящей сепаратрисе $k_{-1} = 0.01$, $z = 0.42528023647$.

решению в некоторой точке, оценивали расстояние между точками A и B пересечения входящей и выходящей сепаратрис и l и выбирали следующее приближение для z_{\max} . При этом прямую l далее не переопределяли. Решение исходной задачи на адаптивной сетке определяли методом Рунге — Кутта 3-го порядка, а решение системы для $v(t)$ — методом Эйлера с пересчетом. При этом локальную ошибку оценивали разностью решений, полученных методом Рунге — Кутта 3-го и 4-го порядков.

Выбирая прямую, которая пересекает сепаратрисы в области больших градиентов на решении, при $z = 0.42528023647$ получили расстояние между точками A и B порядка 10^{-11} и глобальную погрешность в точке A на выходящей сепаратрисе порядка 10^{-7} при $\gamma = 10^{-14}$ (рис. 4, 5). Таким образом, влияние глобальной погрешности на точность решения заметно настолько, что действительное расстояние существенно отличается от расстояния, вычисленного приближенно. Следовательно, для получения более точных результатов необходимо выбирать прямую так, чтобы она пересекала сепаратрисы в области небольших градиентов.

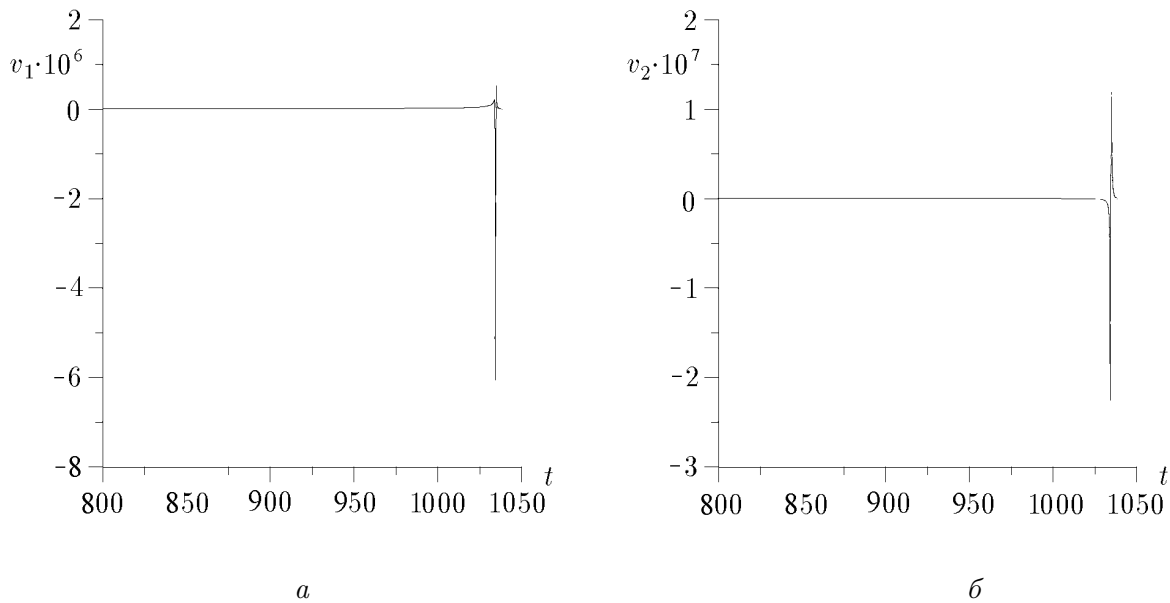


Рис. 5. Изменение $v_1(t)$ (а) и $v_2(t)$ (б) на выходящей сепаратрисе (адаптивная сетка, средняя длина шага $h \approx 10^{-3} \dots 10^{-4}$) $k_{-1} = 0.01$, $z = 0.42528023647$.

Заключение

Проведен анализ поведения глобальной ошибки дискретизации на решениях одной кинетической модели каталитической реакции окисления водорода. Применен метод построения численной оценки глобальной погрешности, основанный на решении системы для главного члена асимптотического разложения глобальной погрешности, показана его эффективность при исследовании периодических решений. Кроме того, установлена необходимость оценки глобальной ошибки дискретизации в итерационных процессах уточнения значения параметра при численном интегрировании на больших интервалах времени.

Список литературы

- [1] СHУМАКОВ G.A., СHУМАКОВА N.A. On a global error estimate in long-term numerical integration of ordinary differential equations // Selcuk J. of Appl. Math. 2001. Vol. 2. P. 27–46.
- [2] CANO B., SANZ-SERNA J.M. Error growth in the numerical integration of periodic orbits, with application to hamiltonian and reversible systems // SIAM J. Numer. Anal. 1997. Vol. 34. No. 4. P. 1391–1417.
- [3] SKEEL R.D. Thirteen ways to estimate global error // Numer. Math. 1986. Vol. 48. P. 1–20.

Поступила в редакцию 4 января 2002 г.