01;12

О возможности оценки коэффициента диффузии среды по рядам наблюдений в нескольких точках

© Г.Г. Малинецкий, А.Б. Потапов, И.В. Фельдштейн

Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН,
125047 Москва, Россия

(Поступило в Редакцию 23 октября 1996 г.)

Рассмотрен возможный подход к оценке коэффициента диффузии в среде по временны́м рядам наблюдений в нескольких точках. Подход основан на анализе зависимости наибольшего собственного значения матрицы ковариации от коэффициента диффузии. Показано, что такая зависимость для широкого круга систем имеет монотонный характер и может рассматриваться как характеристика среды. Рассмотрен вопрос о том, при каких условиях на границе монотонность имеет место.

Введение

Определение параметров исследуемых систем по временным рядам или диагностика их состояния — одна из практически важных задач [1–3]. Подобные проблемы возникают в физике, технике, медицине, биологии и т.п. Например, встает вопрос, какую информацию о заболевании можно получить, обрабатывая временно́й ряд интервалов между последовательными сердечными сокращениями. Современные методы нелинейной динамики позволяют оценивать по временно́му ряду не только спектры, но и фрактальные размерности, ляпуновские показатели, энтропию системы, но в каждом конкретном случае полезность таких измерений требует отдельных исследований.

Для систем, в которых возникает пространственно-временно́й хаос, также можно ставить задачу определения их параметров. Мы рассматривали возможность оценки коэффициента диффузии D или его аналога, определяющего "силу связи" отдельных элементов пространственно распределенной системы с непрерывным и дискретным временем.

Вообще говоря, от параметра D зависят многие характеристики исследуемой системы, например размерность аттрактора, однако, во-первых, зависимость эта может носить сложный немонотонный характер [2], а во-вторых, для систем большой размерности оценивать последнюю довольно трудно, а ляпуновские показатели — еще труднее. Поэтому в данной работе использовался более простой подход — оценивались "размеры" аттрактора в фазовом пространстве, что можно сделать путем анализа собственных значений матрицы ковариаций (подробнее об этом см. в [3,4]).

Достоинства подобной методики можно проиллюстрировать на следующем примере. В случае надкритической бифуркации Хопфа, когда из неподвижной точки рождается предельный цикл, размерность скачком изменяется с 1 до 2, в то время как размеры предельного цикла плавно увеличиваются с изменением бифуркационного параметра. Тем не менее данная методика, разумеется, далеко не всегда способна диагностировать перестройки внутренней структуры аттрактора.

Мы продемонстрируем эффективность метода для случая пространственно распределенной системы с закрепленными концами, т.е. с граничными условиями первого рода. Тогда при очень большом коэффициенте связи краевые условия будут удерживать всю систему в "нехаотическом" состоянии, при очень малом их влияние будет сказываться только в небольшой области вблизи границы. Однако в некотором интервале значений D должен наблюдаться переход от первой ситуации ко второй. Именно в этом диапазоне должны наблюдаться перестройки аттрактора, диагностируемые геометрическими методами. Примером физической системы, для которой имеет смысл постановка задачи о диффузии в среде с нелинейным источником и краевыми условиями 1-го рода, может служить химическая реакция в длинной трубке, концы которой помещены в большие резервуары с активным перемешиванием.

Следует сделать еще одно замечание. Мы рассматриваем задачу об определении параметров не по скалярному временно́му ряду, а по векторному, как это зачастую делается в гидродинамике, геофизике, климатологии (см. литературу в [3,5]). В этом случае не обязательно использовать процедуру реконструкции аттрактора методом запаздываний (или методом Такенса). Это тем более важно, что применение метода запаздываний для большого круга систем наталкивается на значительные сложности, связанные с выбором параметров реконструкции, большой размерностью и некоторыми другими факторами [6]. В качестве компонент реконструированного вектора, описывающего состояние динамической системы, можно использовать значения, измеренные в разных пространственных точках.

Метод и некоторые результаты

Рассмотрим среду, каждый элемент которой представляет собой нелинейный осциллятор с поведением, описываемым 1- или 2-мерным отображением или системой обыкновенных дифференциальных уравнений. Между элементами среды существует связь диффузионного типа

$$\mathbf{x}_i^{j+1} = \mathbf{f}(\mathbf{x}_i^j) + \mathbf{D}\left(\mathbf{x}_{i-1}^{j+1} - 2\mathbf{x}_i^{j+1} + \mathbf{x}_{i+1}^{j+1}\right), \quad (1a)$$

$$\dot{\mathbf{x}}_i = \mathbf{f}(\mathbf{x}_i) + \mathbf{D}\left(\mathbf{x}_{i-1} - 2\mathbf{x}_i + \mathbf{x}_{i+1}\right). \quad (1b)$$

Здесь нижний индекс i — номер элемента среды $i = 1 \dots n$, верхний j — момент времени для отображений. Предполагается, что отображения связаны только по 1-й компоненте вектора $\mathbf{x}$, т.е. в матрице $\mathbf{D}$, отличен от нуля только элемент D_{11}. В качестве граничных условий выбрано условие $\mathbf{x} = 0$ на границе, т.е. для 1-го и n-го элементов соотношения (1) имеют вид

$$\mathbf{x}_1^{j+1} = \mathbf{f}(\mathbf{x}_1^j) + \mathbf{D}\left(-2\mathbf{x}_1^{j+1} + \mathbf{x}_2^{j+1}\right),$$

$$\mathbf{x}_n^{j+1} = \mathbf{f}(\mathbf{x}_n^j) + \mathbf{D}\left(\mathbf{x}_{n-1}^{j+1} - 2\mathbf{x}_n^{j+1}\right), \quad (2a)$$

$$\dot{\mathbf{x}}_1 = \mathbf{f}(\mathbf{x}_1) + \mathbf{D}\left(-2\mathbf{x}_1 + \mathbf{x}_2\right),$$

$$\dot{\mathbf{x}}_n = \mathbf{f}(\mathbf{x}_n) + \mathbf{D}\left(\mathbf{x}_{n-1} - 2\mathbf{x}_n\right). \quad (2b)$$

Начальные условия полагаются несущественными, так как все переходные процессы считаются завершенными.

Задача оценки параметра связи (в случае диффузионной связи коэффициента диффузии) по временны́м рядам переменной в нескольких точках среды (полученных, например, в эксперименте) может считаться решенной, если будет найдена величина, которая в широком диапазоне изменения параметра связи монотонно зависит от него. Величина, обладающая такими свойствами, может рассматриваться как самостоятельная характеристика среды. Например, ее значение для разных сред с одинаковым поведением элементов может использоваться для сравнения сил связей в этих средах. Подобная постановка задачи имеет смысл для широкого круга задач диагностики состояния систем в физике, практической медицине, климатологии и т.д.

Представляется разумным (по крайней мере в качестве отправной точки) проанализировать зависимость корреляций между точками среды от параметра типа коэффициента диффузии. Для этого рассмотрим наибольшее собственное значение матрицы ковариации

$$C = \frac{1}{N} M^T M, \quad (3)$$

где M — матрица наблюдений

$$M = \begin{pmatrix} u_1^0 & u_2^0 & \dots & u_n^0 \\ u_1^1 & u_2^1 & \dots & u_n^1 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ u_1^{N-1} & u_2^{N-1} & \dots & u_n^{N-1} \end{pmatrix}, \quad (4)$$

N — число наблюдений, u_i^j — отклонение от среднего i -элемента среды для j-го наблюдения [2]

$$u_i^j = x_i^j - \frac{1}{N}\sum_{k=0}^{N-1} x_i^k. \quad (5)$$

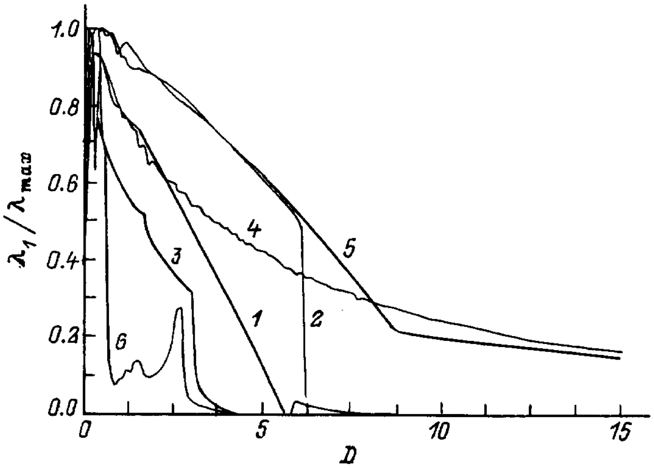

Рис. 1.

Выбор именно этой величины — максимального собственного значения матрицы C можно проиллюстрировать следующим геометрическим соображением. При отсутствии связей (случай $D = 0$) в фазовом пространстве системы не существует выделенного направления — проекции на все направления равнозначны. С ростом диффузии элементы среды начинают участвовать в общем движении. Это приводит к тому, что появляется направление, проекции фазовых векторов на которое максимальны. Решение же задачи об определении максимума суммы квадратов проекций множества векторов сводится к задаче о наибольшем собственном значении (λ_1) матрицы, построенной аналогично матрице C, причем величина этого максимума равна λ_1.

В работе подобный анализ проведен для следующих отображений:

$$x^{j+1} = c - x^{j^2}, \quad (6.1)$$

$$x^{j+1} = 1 - c|x^j|, \quad (6.2)$$

$$x^{j+1} = 1 - \frac{|x^j - c|^{1/2}}{1 + (x^j - c)^2}, \quad (6.3)$$

$$x^{j+1} = (2x^j + y^j) \bmod 2\pi, \quad y^{j+1} = (x^j + y^j) \bmod 2\pi, \quad (6.4)$$

$$x^{j+1} = 1 + y^j - cx^{j^2}, \quad y^{j+1} = bx^j. \quad (6.5)$$

и системы Лоренца (6.6). Число элементов среды (n) бралось равным 10, 20, 30. Результаты расчетов зависимости $\lambda_1^n(D)$ (наибольшее собственное значение для n элементов как функция D) приведены на рис. 1 ($n = 10$, номера кривых соответствуют (6)).

Для того чтобы введенная величина действительно являлась характеристикой среды, она должна быть независимой от расчетных параметров, а именно, от числа n. Зависимость λ_1^n не обладает таким свойством, однако $\Lambda = (1/n)\lambda_1^n$ является универсальной для данного отображения при фиксированных параметрах (рис. 2). Именно это говорит о том, что она характеризует свойства среды.

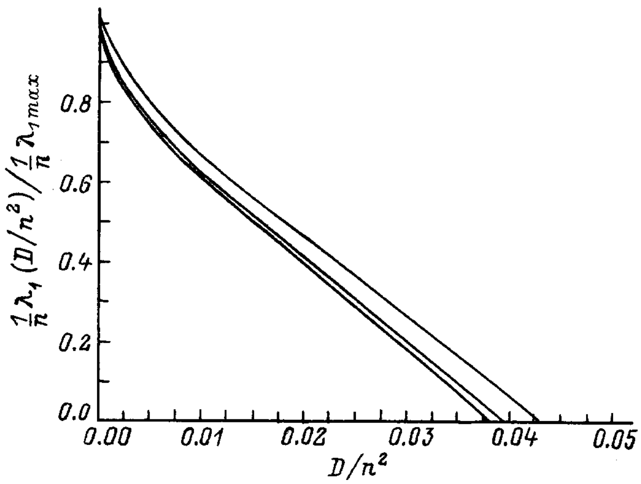

Рис. 2.

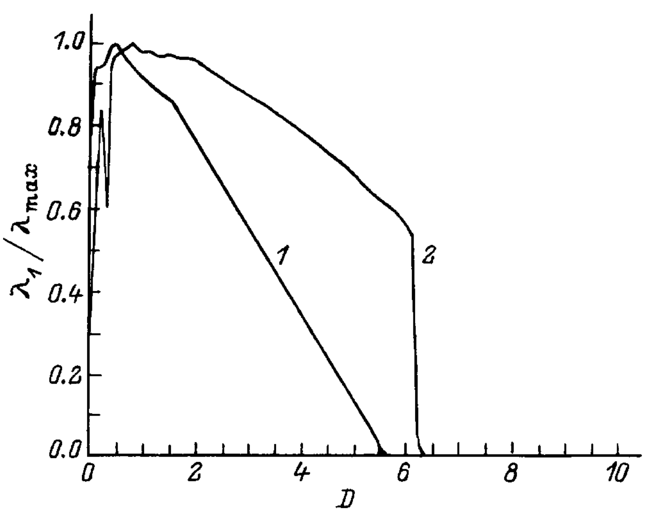

Рис. 3.

Процедура вычисления коэффициента диффузии в среде состоит из следующих этапов: 1) по рядам наблюдений в n точках среды вычисляется λ_1^n; 2) вычисляется $\Lambda = (1/n)\lambda_1^n$; 3) по кривой, аналогичной кривым рис. 1, определяется D; 4) сама величина D не является коэффициентом диффузии (так как D входит в разностную аппроксимацию оператора диффузии), но его величина $\mathcal{D}$ связана с D простым соотношением $\mathcal{D} = (1/n^2)D$.

Рис. 3 (кривые *1, 2*) демонстрируют зависимость $\lambda_1(D)$ для случая $n = 10$, но при матрице M, сформированной по наблюдениям в трех точках, причем не равноотстоящих друг от друга,

$$M = \begin{pmatrix} u_2^0 & u_5^0 & u_7^0 \\ \dots & \dots & \dots \\ u_2^{N-1} & u_5^{N-1} & u_7^{N-1} \end{pmatrix}.$$

Видно, что зависимость качественно та же, что и в том случае, когда в каждый момент времени берется полный вектор наблюдений.

Таким образом, тестовые расчеты показали, что введенная величина является устойчивой по отношению к выбору множества точек среды, используемых при формировании матрицы M. Предложенный алгоритм можно использовать в тех ситуациях, когда вид уравнений или отображений, описывающих изучаемый объект неизвестны. В этом случае величину $\mathcal{D}$ можно рассматривать как самостоятельную характеристику объекта, отражающую взаимосвязь его элементов. В простейших рассмотренных случаях она определяет "силу связи", или коэффициента диффузии.

Рассмотрим вопрос о граничных условиях. Расчеты показывают, что зависимости $\lambda_1(D)$, подобные рассмотренным ранее (имеющие монотонный участок в широкой области изменений D), встречаются только при фиксированных значениях переменной на краях. Так, рис. 4 представляет результаты расчетов для периодических граничных условий и условий нулевого потока на границе (в первом случае цепочка осцилляторов "замыкалась"

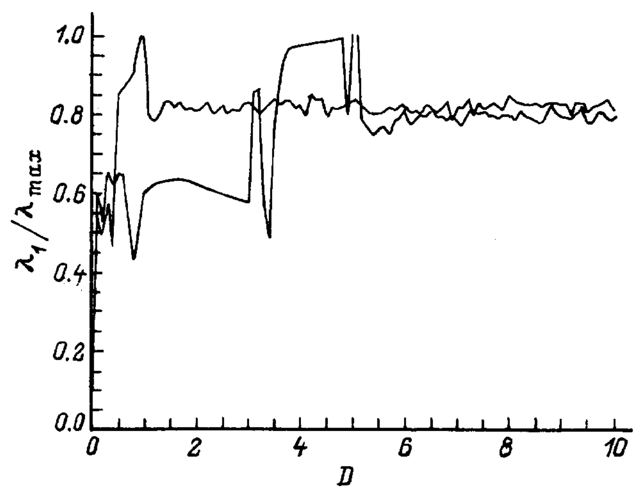

Рис. 4.

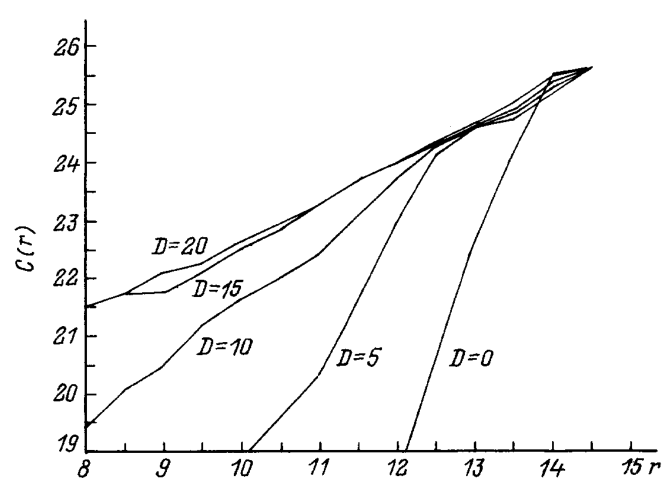

Рис. 5.

в кольцо связями (для 1-мерного отображения)

$$x_1^{j+1} = f(x_1^j) + D\left(x_n^{j+1} - 2x_1^{j+1} + x_2^{j+1}\right),$$

$$x_n^{j+1} = f(x_n^j) + D\left(x_1^{j+1} - 2x_n^{j+1} + x_{n-1}^{j+1}\right),$$

а во втором случае ставились следующие условия:

$$-3x_1 + 4x_2 - x_3 = 0, \quad -x_{n-2} + 4x_{n-1} - 3x_n = 0.$$

Для 2-мерных отображений и обыкновенных дифференциальных уравнений делалось то же самое. Видно, что зависимость $\lambda_1(D)$ является в обоих случаях нерегулярной и для задачи оценки параметра D интереса, по-видимому, не представляет. Необходимо отметить, что при не высоких коэффициентах диффузии и матрице M, сформированной по рядам наблюдений в точках вдали от границы, зависимость $\lambda_1(D)$ для случая краевых условий 1-го и 2-го рода практически совпадают, однако с ростом D они начинают расходиться.

Интересным представляется вопрос об изменении характера поведения системы при изменении коэффициента диффузии. Хотя подобный анализ далеко не завершен, некоторое представление об изменении в системе дает рис. 5. На нем показаны результаты расчетов корреляционного интеграла в n-мерном фазовом пространстве для различных коэффициентов диффузии (динамика элемента среды определяется отображением $x^{j+1} = 1 - c|x^j|$, $c = 1.5$, $n = 20$). Видно, что корреляционная размерность, определяемая наклоном кривой, с ростом D уменьшается и достигает некоторой предельной величины. Это, по-видимому, можно трактовать как "упрощение" поведения системы, вызванного тем, что отдельные элементы системы начинают участвовать в общем движении из-за наличия внутренних связей, растущих с ростом коэффициента диффузии.

Итак, численно показано, что для различных нелинейных сред может быть введен параметр (λ_1), монотонно меняющийся с изменением коэффициента диффузии. Таким образом, зная закон, которому подчиняется динамическое поведение элемента среды (в форме отображения или обыкновенного дифференциального уравнения), возможно определение коэффициента диффузии по записи наблюдений в нескольких точках.

Можно ожидать, что предложенный подход будет полезен при анализе энцефалограмм, снимаемых в нескольких точках, при исследовании гидродинамических течений и диффузионного хаоса, а также в других случаях, когда использование реконструкции аттрактора вызывает трудности.

Настоящая работа была частично поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (грант № 96-01-01161).

Список литературы

[1] *Ахромеева Т.С., Курдюмов С.П., Малинецкий Г.Г., Самарский А.А.* Нестационарные структуры и диффузионный хаос. М.: Наука, 1992.

[2] *Неймарк Ю.И., Ланда П.С.* Стохастические и хаотические колебания. М.: Наука, 1987.

[3] *Ababrbanel H.D.I., Brown R., Sidorowich J.J., Tsimring L.S.* // Rev. Mod. Phys. 1993. Vol. 65. P. 1331.

[4] *Broomhead D.S., King G.P.* // Physica D. 1986. Vol. 20. P. 217–236.

[5] *Malinetskii G.G., Potapov A.B., Rakhmanov A.I., Rodichev E.B.* // Phys. Lett. A. 1993. Vol. 179. P. 15.

[6] Новое в синергетике. М.: Наука, 1996.