

На правах рукописи



Болтенков Степан Анатольевич

**ПРОГРАММНО-МАТЕМАТИЧЕСКИЙ КОМПЛЕКС ДЛЯ  
ПАРАМЕТРИЧЕСКОГО АНАЛИЗА МОДЕЛЕЙ ВИДА  
«РЕАКЦИЯ + ДИФФУЗИЯ»**

05.13.18 – математическое моделирование, численные методы  
и комплексы программ

**АВТОРЕФЕРАТ**

диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Красноярск  
2008

Работа выполнена в Федеральном государственном образовательном учреждении высшего профессионального образования «Сибирский федеральный университет»

**Научный руководитель:** д.ф.-м.н., профессор Добронев Борис Станиславович

**Официальные оппоненты:** д.ф.-м.н., профессор Белолипецкий Виктор Михайлович  
к.ф.-м.н., доцент Пушкарева Татьяна Павловна

**Ведущая организация:** Институт вычислительных технологий сибирское отделение Российской академии наук. г.Новосибирск.

Защита диссертации состоится «31» октября 2008 г. в 14 часов на заседании диссертационного совета ДМ 212.099.06 при Сибирском федеральном университете по адресу: 660074, Красноярск, ул. Киренского, 26, ауд-УЛК-1-15

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ФГОУ ВПО СФУ по адресу: 660074, Красноярск, ул. Киренского, 26, ауд-2-74.

Отзывы по реферату направлять по адресу: 660074, г.Красноярск, ул. Киренского, 26, ауд-УЛК 3-19, ученому секретарю диссертационного совета ДМ 212.099.06 Цареву Роману Юрьевичу.

Автореферат разослан «27» сентября 2008 г.

Ученый секретарь  
диссертационного совета  
к.т.н., доцент



Р.Ю. Царев

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

**Актуальность проблемы.** На сегодняшний день сложно представить современную химическую промышленность без повсеместного применения математического моделирования. Пожалуй, наиболее активно такое моделирование применяется в исследованиях химической кинетики.

Математическое моделирование критических явлений в гетерогенном катализе является одной из составных частей таких исследований. Нелинейная динамика каталитических процессов является причиной возникновения особых явлений: множественность стационарных состояний, автокатализ, диссипативные структуры. Некоторые осложняющие факторы, такие как диффузия, оказывают дополнительное влияние на динамику химического процесса. Одним из способов моделирования химических процессов, осложненных влиянием диффузии, является построение систем дифференциальных уравнений в частных производных.

В научной литературе пространственную упорядоченность, которая образуется под влиянием диффузионных процессов, принято называть структурами Тьюринга.

В настоящее время широко изучены модели, отражающие поведение реакции с диффузией в одномерном или, в меньшей степени, двумерном пространстве. Анализ поведения химических реакций с диффузией в объеме полностью отсутствует.

Изучению такого рода явлений посветили свои труды многие отечественные и зарубежные ученые среди которых: А.М. Жаботинский, В.И. Быков, Г.К. Боресков, В.И. Елохин, А.Д. Базыкин, А.Д. Васильев, М. Холодниок, М. Клич, М. Кубичек, М. Марек, Г. Хакен.

Особую значимость в исследованиях такого рода имеют системы автоматизации, поскольку изучение структур Тьюринга сталкивается с множеством аналитических выкладок и численных решений. Исследователи в этой области, как правило, фокусируются на рассматриваемой модели и, применяя математический аппарат и набор прикладных программ, стараются изучить ее. Однако применение параметрического анализа позволяет алгоритмизировать большую часть исследования модели структуры Тьюринга, избавив тем самым исследователя от кропотливого труда и сосредоточив его внимание на самой модели, а не на аналитических выкладках и численных решениях.

**Научная проблема** исследований определяется необходимостью изучения особенностей протекания каталитических процессов с учетом диффузии интермедиантов в объёме.

**Объект исследований** – концентрация промежуточных веществ в объёме твердотельных катализаторов.

**Предметом исследований** являются особенности протекания каталитических процессов, описываемых математическими моделями «реакция + диффузия», в объёме катализатора.

**Основная цель** настоящей работы – разработка программно-математического комплекса для параметрического анализа структур Тьюринга, моделирующих процессы химической кинетики с помощью дифференциальных уравнений в виде полиномов, во всех пространственных размерностях.

Для достижения указанной цели в работе поставлены следующие задачи:

1. Построить алгоритмы численного решения задач параметрического анализа структур Тьюринга.
2. Реализовать программное обеспечение для проведения всех этапов параметрического анализа структуры Тьюринга.

**Основная идея диссертации** заключается в применении численных и программных методов для проведения параметрического анализа моделей вида «реакция+диффузия». Последовательное применение необходимого комплекса численных методов и программных алгоритмов позволяет провести построение параметрических зависимостей, которые невозможно получить с помощью аналитических выкладок.

Все шаги параметрического анализа в достаточной степени хорошо формализуются, это значит, что их можно переложить на язык программирования. Наиболее удобным механизмом для этого служит объектно-ориентированное программирование, поскольку данный подход в наилучшей степени позволит разделить основные этапы параметрического анализа.

Для каждого шага исследования необходимо применять свой метод расчетов, однако объектно-ориентированное программирование позволяет создать ряд основных вычислительных механизмов, с помощью которых можно численно рассчитать все необходимые уравнения.

### **Методы исследования.**

Теоретические исследования выполнены с привлечением качественной теории дифференциальных уравнений, линейной алгебры, дифференциальной геометрии, численного анализа, теории программирования. В работе используются численные методы как для проведения параметрического анализа, так и для интегрирования систем дифференциальных уравнений. Помимо математического аппарата, широко применяется метод объектно-ориентированного программирования (ООП).

### **Научные результаты, выносимые на защиту:**

1. Программно-математический комплекс, который позволяет проводить все шаги параметрического анализа структур Тьюринга, а также численно моделировать поведение реакции при тех или иных параметрах в нуль-, одно-, дву- или трехмерных пространствах.
2. Численная модель процесса образования диссипативных структур во всех пространственных размерностях для простейшего каталитического триггера, а так же процесса течения химической реакции с диффундированием одного из веществ в объем.
3. Алгоритм проведения комплексного исследования структуры Тьюринга, включающий в себя построение параметрических зависимостей, бифуркационных кривых, фазовых портретов и временных зависимостей.

### **Научная новизна представленных в диссертации результатов.**

1. Впервые выполнены исследования математических моделей типичных каталитических реакций с учетом диффузии во всех пространственных размерностях.
2. Показана возможность построения параметрических и бифуркационных кривых в параметрическом анализе с помощью численных методов, что позволяет получить зависимости которые невозможно найти с помощью аналитических выкладок.

**Теоретическая значимость исследования** заключается в том, что расширена область применения параметрического анализа на модели вида «реакции+диффузия» для всех видов пространственной размерности.

**Практическая значимость исследования.** Практическую ценность имеет программно-математический комплекс для проведения всего цикла параметриче-

ского анализа структур Тьюринга с двумя интермедиантами для уравнений представленных в виде полиномов во всех пространственных размерностях.

Результаты диссертационного исследования могут быть использованы в качестве основы для проведения численных и натуральных экспериментов в научных подразделениях РАН и университетов, занимающихся проблемами гетерогенного катализа (Институт катализа СО РАН, Институт химической физики РАН, Научно-исследовательский физико-химический институт, МГУ и др.), а также в учебном процессе студентов и аспирантов СФУ, специализирующихся по прикладной математике.

Методическое значение имеет материал в виде: графиков, диаграмм и численных расчетов, который можно получить в результате работы с созданным программным обеспечением. С помощью данного материала можно наглядно проиллюстрировать все стадии параметрического анализа структур Тьюринга.

**Достоверность полученных результатов** определяется удовлетворительным совпадением численных и аналитических расчетов полученных для эталонных моделей. Результаты интегрирования систем сверялись с результатами, полученными различными методами интегрирования, в том числе неявными.

**Личный вклад.** Все результаты, представленные в диссертации и выносимые на защиту, получены автором лично.

**Апробация работы.** Основные результаты диссертационной работы были представлены и обсуждены на следующих научных семинарах и конференциях:

- IV Всероссийской научно-практической конференции студентов, аспирантов и молодых ученых «Молодежь и современные информационные технологии» (г. Томск, 2007);

- IX Школе-семинаре молодых ученых «Математическое моделирование и информационные технологии: управление, искусственный интеллект, прикладное программное обеспечение и технологии программирования», ММИТ'06 (г. Иркутск, 2007);

- VIII Всероссийской конференции молодых ученых по математическому моделированию и информационным технологиям (с участием иностранных ученых) (г. Новосибирск, 2007).

- Международная научная конференция "Современные проблемы математического моделирования и вычислительных технологий - 2008"(г. Красноярск, 2008)

**Структура диссертационной работы.** Работа состоит из введения, трех глав, заключения, списка литературы, содержащего 106 наименований работ отечественных и зарубежных авторов, и шести приложений. Объем основного текста работы – 107 с.

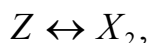
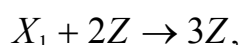
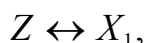
**Публикации.** Основные результаты диссертации опубликованы в 7 печатных работах, из них 3 статьи в изданиях по списку ВАК.

## СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **введении** обоснована актуальность темы, сформулированы цели и задачи исследования, показана научная новизна и практическая значимость.

В **первой главе** дается определение параметрического анализа, приводится общая методология исследования, рассказывается о сути гетерогенных реакций, а также о важности прогнозирования критических явлений, возникающих в динамических системах.

В качестве примера проводится исследование модели вида



которую описывает система дифференциальных уравнений

$$\frac{\partial x_1}{\partial t} = F(x_1, x_2),$$

$$\frac{\partial x_2}{\partial t} = G(x_1, x_2),$$

где

$$F(x_1, x_2) = k_1(1 - x_1 - x_2) - k_{-1}x_1 - k_2(1 - x_1 - x_2)^2 x_1,$$

$$G(x_1, x_2) = k_{-3}(1 - x_1 - x_2) - k_3x_2.$$

Дается определение каждого шага параметрического анализа с примерами численных решений.

Во **второй главе** рассматривается применение параметрического анализа для распределенных систем уравнений с двумя интермедиантами. Приводится сравнительный анализ для модели с диффузией в одно-, дву- и трехмерном пространстве. Общий вид уравнений выглядит следующим образом:

одномерный случай (реакция на каталитической проволоке):

$$\frac{\partial x_1}{\partial t} = F(x_1, x_2) + D_1 \frac{\partial^2 x_1}{\partial \xi^2},$$

$$\frac{\partial x_2}{\partial t} = G(x_1, x_2) + D_2 \frac{\partial^2 x_2}{\partial \xi^2};$$

двумерный случай (реакция на каталитической пластине):



$$\frac{\partial x_1}{\partial t} = F(x_1, x_2) + D_1 \left( \frac{\partial^2 x_1}{\partial \xi_1^2} + \frac{\partial^2 x_1}{\partial \xi_2^2} \right),$$

$$\frac{\partial x_2}{\partial t} = G(x_1, x_2) + D_2 \left( \frac{\partial^2 x_2}{\partial \xi_1^2} + \frac{\partial^2 x_2}{\partial \xi_2^2} \right);$$

трехмерный случай (реакция в каталитическом кубе):

$$\frac{\partial x_1}{\partial t} = F(x_1, x_2) + D_1 \left( \frac{\partial^2 x_1}{\partial \xi_1^2} + \frac{\partial^2 x_1}{\partial \xi_2^2} + \frac{\partial^2 x_1}{\partial \xi_3^2} \right),$$

$$\frac{\partial x_2}{\partial t} = G(x_1, x_2) + D_2 \left( \frac{\partial^2 x_2}{\partial \xi_1^2} + \frac{\partial^2 x_2}{\partial \xi_2^2} + \frac{\partial^2 x_2}{\partial \xi_3^2} \right).$$

Начальные данные:

$$t = 0: x_i = x_i(\xi_1, \xi_2), \quad i = 1, 2.$$

Краевые условия для отрезка (0,1) с непроницаемыми стенками:

$$\frac{\partial x_1}{\partial \xi}(0, t) = \frac{\partial x_2}{\partial \xi}(0, t) = \frac{\partial x_1}{\partial \xi}(l, t) = \frac{\partial x_2}{\partial \xi}(l, t) = 0;$$

для пластины (0,1)×(0,1) с непроницаемыми стенками:

$$\frac{\partial x_1}{\partial \xi_1}(0, \xi_2, t) = \frac{\partial x_1}{\partial \xi_2}(0, \xi_1, t) = \frac{\partial x_2}{\partial \xi_2}(0, \xi_1, t) = \frac{\partial x_2}{\partial \xi_1}(0, \xi_2, t) = 0,$$

$$\frac{\partial x_1}{\partial \xi_1}(l, \xi_2, t) = \frac{\partial x_1}{\partial \xi_2}(l, \xi_1, t) = \frac{\partial x_2}{\partial \xi_2}(l, \xi_1, t) = \frac{\partial x_2}{\partial \xi_1}(l, \xi_2, t) = 0;$$

для куба (0,1,0) ⊗ (0,0,1) ⊗ (1,0,0) с непроницаемыми стенками:

$$\frac{\partial x_{1,2}}{\partial \xi_1}(\xi_1, \xi_2, 0, t) = \frac{\partial x_{1,2}}{\partial \xi_2}(0, \xi_2, \xi_3, t) = \frac{\partial x_{1,2}}{\partial \xi_2}(\xi_1, 0, \xi_3, t) = 0,$$

$$\frac{\partial x_{1,2}}{\partial \xi_1}(\xi_1, \xi_2, 0, t) = \frac{\partial x_{1,2}}{\partial \xi_2}(0, \xi_2, \xi_3, t) = \frac{\partial x_{1,2}}{\partial \xi_2}(\xi_1, 0, \xi_3, t) = 0.$$

В качестве примера рассматривается система уравнений из первой главы. При построении бифуркационных кривых выделяется область параметров, где решение системы при определенных начальных значениях имеет диссипативную структуру.

Отдельно рассматривается механизм образования различных диссипативных структур при диффузии веществ в объеме (рис. 1).

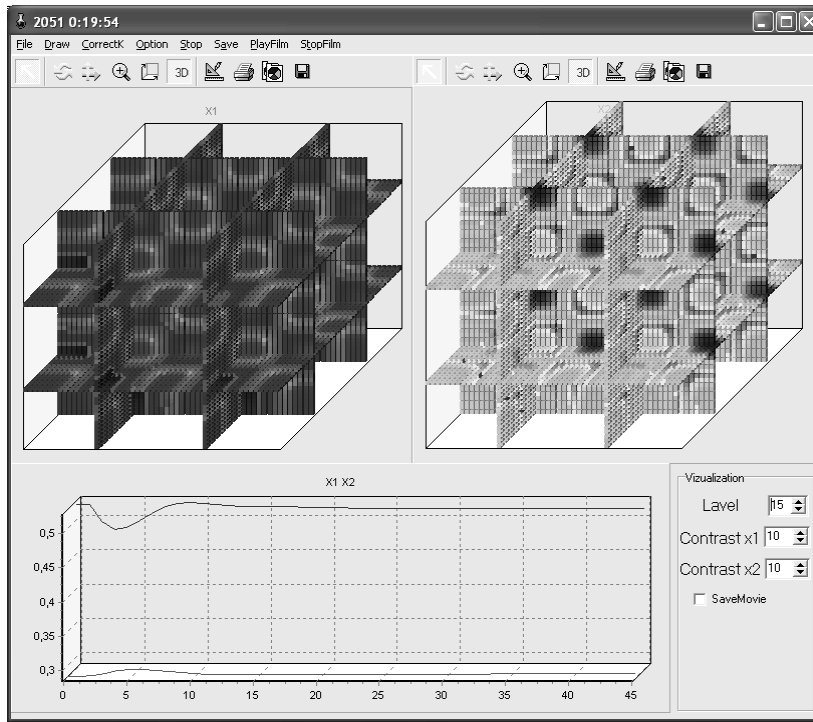


Рис. 1. Временная зависимость для трёхмерного случая ( $k_1 = 0,13$ ,  $k_{-1} = 0,011$ ,  $k_2 = 1$ ,  $k_3 = 0,003$ ,  $k_{-3} = 0,002$ ,  $D_1 = 0,001$ ,  $D_2 = 0,05$ ,  $W = 1$ )

Выявлена зависимость периода распределения веществ в пространстве от размерности системы. Показывается, что чем больше размерность системы, тем меньше период пространственного распределения вещества. Одна и та же реакция при всех прочих равных первоначально заданных условиях имеет различный период в одно-, дву- и трехмерном пространстве. Такая связь обусловлена влиянием так называемого волнового числа, которое появляется при линеаризации системы и в физическом смысле как раз представляет собой некоторый период распределения вещества в пространстве.

При построении бифуркационных кривых в параметрическом анализе распределенных систем в качестве параметров также рассмотрены коэффициенты диффузии. В результате чего были получены формулы

$L\Delta$  – кривая кратности

$$k_1(x_1) = \frac{(k_{-1}x_1 + k_2x_1z^2)}{z},$$

$$D_1(x_1, k_1(x_1)) = \frac{(-k_1 - k_{-1} - k_2z^2 + 2k_2x_2z)(-k_3 - k_{-3}) - (-k_1 - k_{-1} - k_2z^2 + 2k_2x_2z)D_2W}{(-k_3 - k_{-3})W - D_2W^2}; \quad (1)$$

$L\sigma$  – кривая нейтральности

$$k_1(x_1) = \frac{(k_{-1}x_1 + k_2x_1z^2)}{z},$$

$$D_1(x_1, k_1(x_1)) = \frac{(-k_1 - k_{-1} - k_2z^2 + 2k_2x_2z) + (-k_3 - k_{-3}) - D_2W}{W}. \quad (2)$$

На основании приведенных формул построен график бифуркационных кривых (рис. 2).

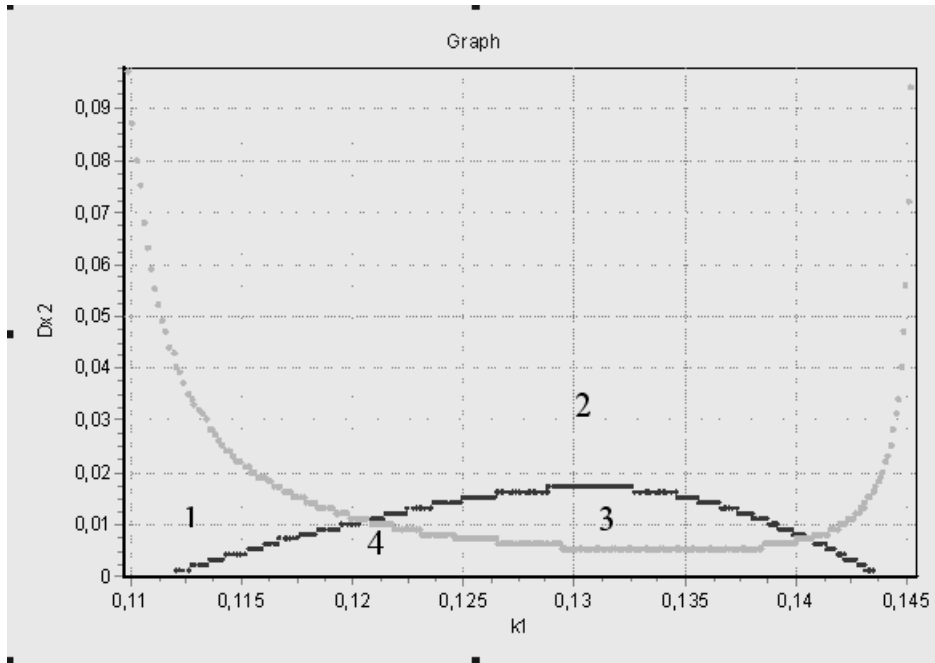


Рис. 2. Бифуркационные кривые (1)-(2) ( $k_{-1} = 0,011$ ,  $k_2 = 1$ ,  $k_3 = 0,003$ ,  $k_{-3} = 0,002$ ,  $D_1 = 0,001$ ,  $W = 1$ )

На графике можно выделить зоны значений параметров, в каждой из которых система дифференциальных уравнений будет иметь особый вид распределения вещества в пространстве.

Помимо систем уравнений с двумя интермедиантами, во второй главе приводится исследование системы с тремя переменными вида

$$\frac{\partial x_1}{\partial t} = F(x_1, x_2, x_3) + D_1 \frac{\partial^2 x_1}{\partial \xi^2},$$

$$\frac{\partial x_2}{\partial t} = G(x_1, x_2, x_3) + D_2 \frac{\partial^2 x_2}{\partial \xi^2},$$

$$\frac{\partial x_3}{\partial t} = Q(x_1, x_2, x_3) + D_3 \frac{\partial^2 x_3}{\partial \xi^2},$$

а также показан механизм возможного применения параметрического анализа для такого рода систем. В данном случае бифуркационные кривые будут иметь вид

$$\begin{aligned}
 P_1 &= f_{11} + f_{22} + f_{33} - \omega^2 (D_1 + D_2 + D_3), \\
 P_2 &= f_{13}f_{31} - f_{11}f_{22} - f_{11}f_{33} + f_{23}f_{32} - f_{22}f_{33} + f_{12}f_{21} + (D_1(f_{22} + f_{33}) + \\
 &+ D_2(f_{11} + f_{33}) + D_3(f_{22} + f_{11}))\omega^2 + (D_1D_2 + D_1D_3 + D_2D_3)\omega^4, \\
 P_3 &= f_{11}f_{22}f_{33} + f_{21}f_{13}f_{32} + f_{31}f_{12}f_{23} - f_{13}f_{32}f_{22} - f_{11}f_{23}f_{23} - f_{33}f_{12}f_{21} + \\
 &+ (f_{11}f_{33}D_2 + f_{23}f_{32}D_1 + f_{21}f_{12}D_3 - f_{11}f_{22}D_3 - f_{22}f_{33}D_1 - f_{31}f_{13}D_2)\omega^2 + \\
 &+ (f_{11}D_2D_3 + f_{22}D_1D_3 + f_{33}D_1D_2)\omega^4 + D_1D_2D_3\omega^6,
 \end{aligned}$$

где  $f_{ij}$  – элементы матрицы Якоби, а  $\omega$  – волновое число.

В качестве примера приводится ряд зависимостей для системы уравнений вида

$$\begin{aligned}
 F(x_1, x_2, x_3) &= k_1Z - k_{-1}x_1 - k_3x_1x_2, \\
 G(x_1, x_2, x_3) &= 2k_2Z^2 - 2k_{-2}x_2^2 - k_3x_1x_2, \\
 Q(x_1, x_2, x_3) &= k_4Z - k_{-4}x_3, \\
 Z &= 1 - x_1 - x_2 - x_3.
 \end{aligned}$$

В завершении главы рассматривается механизм реакции на каталитической поверхности с диффундированием одного из веществ в объём катализатора.

На поверхности процесс моделируется следующим образом:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial x_1}{\partial t} &= F(x_1, x_2, x_3) + D_1 \left( \frac{\partial^2 x_1}{\partial \xi_1^2} + \frac{\partial^2 x_1}{\partial \xi_2^2} \right), \\
 \frac{\partial x_2}{\partial t} &= G(x_1, x_2, x_3) + D_2 \left( \frac{\partial^2 x_2}{\partial \xi_1^2} + \frac{\partial^2 x_2}{\partial \xi_2^2} \right), \\
 \frac{\partial x_3}{\partial t} &= Q(x_1, x_2, x_3) + D_3 \left( \frac{\partial^2 x_3}{\partial \xi^2} + \frac{\partial^2 x_3}{\partial \xi_2^2} \right).
 \end{aligned}$$

Соответственно, коэффициенты диффузии задают степень диффузии на поверхности. Внутри куба (т. е. на всех слоях, кроме первого) моделирование идет уже без самих реакций:

$$\frac{\partial x_1}{\partial t} = D_{p1} \left( \frac{\partial^2 x_1}{\partial \xi_1^2} + \frac{\partial^2 x_1}{\partial \xi_2^2} + \frac{\partial^2 x_1}{\partial \xi_3^2} \right),$$

$$\frac{\partial x_2}{\partial t} = D_{p2} \left( \frac{\partial^2 x_2}{\partial \xi_1^2} + \frac{\partial^2 x_2}{\partial \xi_2^2} + \frac{\partial^2 x_2}{\partial \xi_3^2} \right),$$

$$\frac{\partial x_3}{\partial t} = D_{p3} \left( \frac{\partial^2 x_3}{\partial \xi_1^2} + \frac{\partial^2 x_3}{\partial \xi_2^2} + \frac{\partial^2 x_3}{\partial \xi_3^2} \right).$$

Таким образом, при автокаталитическом ходе реакции объём катализатора волнообразно наполняется диффундирующим веществом.

В **третьей главе** описана программная среда, с помощью которой проводились исследования, а также основные численные алгоритмы, применяемые при расчетах. Поскольку схема параметрического анализа достаточно хорошо алгоритмизирована, то вполне возможно переложить ее на язык программирования.

С помощью ООП предлагается рассмотреть все ПО (программное обеспечение) в виде схемы (рис. 3).



Рис. 3. Объектная схема приложения

При такой структуре программного кода приложение становится довольно универсальным. С помощью численных алгоритмов созданное ПО позволяет проводить параметрический анализ для систем, чьи реакции можно задать в виде

$$F(x_1, x_2) = a_1 x_1^2 + a_2 x_2^2 + a_3 x_1 x_2 + a_4 x_1 x_2^2 + a_5 x_1 x_2 + a_6 x_1 + a_7 x_2 + a_8, \quad (3)$$

$$G(x_1, x_2) = b_1 x_1^2 + b_2 x_2^2 + b_3 x_1 x_2 + b_4 x_1 x_2^2 + b_5 x_1 x_2 + b_6 x_1 + b_7 x_2 + b_8.$$

**Модель.** Данный блок представляет собой класс, методами которого являются функции (3) и два дополнительных метода. Параметрами класса выступают коэффициенты уравнений (3), представленных в виде динамических массивов, а также их предельные значения, полученные из предметной области. В результате, универсальным интерфейсом класса будет являться набор методов и параметров, которые инкапсулируют все необходимые данные.

**Численные методы.** Для каждого шага исследования необходимо применять свой метод расчетов, однако ООП позволяет создать ряд основных вычисли-

тельных механизмов, с помощью которых можно численно рассчитать все необходимые уравнения. Стоит отметить, что каждый из рассматриваемых методов представляет собой набор численных алгоритмов, не привязанных к конкретной функции. Таким образом, любой метод можно представить в виде метода некоторого общего класса. Для каждой стадии параметрического анализа предлагается набор методов, с помощью которых возможно решение поставленной задачи.

**Нахождение стационарных точек.** Основным методом был выбран метод Ньютона. Поскольку одним из первоначальных условий является задание элементов матрицы Якоби, то для метода Ньютона мы получаем необходимые частные производные.

В общем случае частные производные для якобиана можно находить и численно, но тогда в алгоритме появляется еще одна стадия, в которой может возникнуть погрешность, поскольку нахождение частных производных – процесс довольно простой и уже достаточно давно реализован в ряде прикладных программ, то вполне допустимо использовать готовые функции якобиана, найденные аналитическим способом.

При небольшом числе итераций данный метод обеспечивает достаточно высокую точность решений.

**Построение параметрических кривых.** Задачу по исследованию стационарных точек необходимо разбить на три стадии. Рассмотрим некоторую систему уравнений, заданную в следующем виде:

$$\begin{cases} F(\bar{P}_1, x_1, x_2) = 0, \\ G(\bar{P}_2, x_1, x_2) = 0, \end{cases} \quad (4)$$

где  $\bar{P}_{1,2}$  – вектор параметров.

Наложим некоторое ограничение на векторы параметров, а именно исключим возможность попаданий одного и того же параметра в оба вектора, т. е. не существует такого  $k \in \bar{P}_1$ , чтобы  $k \in \bar{P}_2$ . Данное ограничение не вытекает из предметной области и накладывается лишь для облегчения алгоритма поиска. В случае если в рассматриваемой модели указанное условие не выполняется, то строить параметрическую кривую для параметра, не удовлетворяющего этому условию, нельзя.

На первой стадии выясняется условие вхождения исследуемого параметра в систему.

Вторым шагом является поиск значения  $x_1$  или  $x_2$ .

На третьем шаге  $x_1$ ,  $x_2$  подставляются в функцию, в которой находится параметр  $k$ .

Из представленного алгоритма видно, что он инвариантен к значению  $x_1$ ,  $x_2$ , т. е. параметрическую кривую можно строить для любых интермедиантов.

**Построение бифуркационных кривых.** Как и в предыдущем случае, алгоритм построения бифуркационных кривых разделен на несколько шагов.

*Первый шаг.* По примеру алгоритма построения параметрических кривых необходимо определить вхождение коэффициента  $k_1$  в уравнения (4).

*Второй шаг.* Вычислить значения  $x_1$ ,  $x_2$ .

*Третий шаг.* Выполнить поиск значения коэффициента  $k_1$ .

*Четвертый шаг.* Выполнить поиск значения параметра  $k_{-1}$ .

На каждом шаге предлагается свой алгоритм счета.

**Фазовые портреты.** Последним шагом параметрического анализа является поиск решения исходной системы. Для этого необходимо проинтегрировать систему дифференциальных уравнений и, поскольку рассматриваемые уравнения невозможно решить аналитически, необходимо применить численные методы.

**Интерфейс** программного обеспечения представляет собой набор классов с методами, предназначенными для отображения информации, полученной на предыдущих этапах. Данный блок программы не привязан к вычислительным процедурам и в общем случае может применяться для любых иных целей, где есть необходимость в последовательном отражении информации, подобной той, что получается при расчетах в рассматриваемой модели. Для общей наглядности каждый отдельный блок программы представлен в виде отдельного класса. Таким образом, можно выделить набор основных классов.

Класс TGraph предназначен для отображения графиков, получаемых при построении параметрических зависимостей, а также фазовых портретов при решении системы дифференциальных уравнений и графиков динамики изменения концентрации вещества при численном счете.

Класс TPlant предназначен для отображения степени концентрации вещества на пластине при решении системы (4) в двумерном случае.

Класс TCube предназначен для отображения степени концентрации вещества в объёме при решении системы (4) в трехмерном случае. Интерфейс данного класса содержит значительное количество методов и параметров, предназначенных для вращения, сечения, масштабирования, смещения, а также ряд специфических функций, необходимых исследователю.

Поскольку одной из основных задач создания комплекса программ для параметрического анализа структур Тьюринга заключалась в универсальности, то отдельный параграф третьей главы посвящен рассмотрению алгоритмов представления функций, которые задаются в текстовом виде. В качестве основной был выбран алгоритм прямого счета, как наиболее эффективный, поскольку позволяет за один проход массива (функции) произвести вычисление. Очевидно, что такая функциональность обеспечивается первоначально заданными условиями.

Суть алгоритма заключается в однократном прохождении формулы слева направо и последовательном счете каждого слагаемого. Вся формула представляется в виде массива, элементами которого являются ссылки на массив значений параметров. Каждый элемент массива помимо ссылки на параметр содержит арифметический знак, который необходимо применить для следующего за ним элемента. При прямом прохождении массива алгоритм последовательно «накапливает» значения всех вычислений на предыдущих шагах и применяет то арифметическое действие, которое хранится в правой части ячейки массива.

В качестве еще одного метода рассматривается подход, при котором функции используются в качестве откомпилированной библиотеки. В данном случае экземпляр объекта должен храниться со всеми атрибутами в библиотеке, которая динамически будет подгружаться из основного модуля программы. Плюсы такого подхода – в максимально эффективном способе использования компилятора языка программирования. Минус – то, что в данном случае пользователю программы приходится самому программировать нужный ему экземпляр класса, тем самым теряется сам смысл универсализации программного обеспечения. Поэтому такой подход скорее подходит для развития ПО, чем для эксплуатации.

В заключительном параграфе третьей главы дается общий сравнительный анализ различных коммерческих продуктов по автоматизации математических расчетов с предлагаемым ПО. Делается вывод, что для поставленной задачи предлагаемый программный продукт подходит наилучшим образом.

В **заключении** приведены основные результаты, полученные в диссертации. Проведен параметрический анализ для модели, отвечающей системе «реак-



ция+диффузия», с различными кинетическими зависимостями. Данная задача является своего рода «изобретением велосипеда», поскольку уже была решена не единожды различными людьми, однако в данной работе рассматривается подход, который позволяет универсализировать параметрический анализ структур Тьюринга, и потому без общего рассмотрения этой темы не обойтись. Автор с помощью программно реализованных численных алгоритмов дал возможность исследователю, который изучает модели вида «реакция+диффузия», избавиться от сложных аналитических выкладок, которые, как было показано в работе, далеко не всегда можно сделать.

### **Заключение**

Созданный программно-математический комплекс должен позволить значительно лучше изучить модели вида «реакция+диффузия», а его гибкая архитектура и открытость протокола взаимодействия элементов системы расширить область применения данного продукта на другие сферы математического моделирования.

Данная работа позволяет обратить внимание исследователей в области химической кинетики на возможность применения численных алгоритмов не только для конечного решения построенной модели, но и для исследования самих динамических систем, избавляя тем самым от кропотливого труда выведения аналитических формул

Следующим шагом на этом пути должно стать распространение теории параметрического анализа на системы уравнений с тремя неизвестными; эта задача вскользь была затронута в диссертационной работе, однако для более широкого применения данного метода необходим принципиально новый подход к каждой стадии параметрического анализа, использование новых численных алгоритмов и, возможно, привлечение новых более современных языков программирования.

**В приложении 1** представлены копии сертификатов программы, полученных в государственном отраслевом Фонде алгоритмов и программ (ОФАП).

**В приложении 2** приведены построения различных бифуркационных кривых для каталитического осциллятора.

**В приложении 3** представлена динамика формирования диссипативных структур на пластине для каталитического осциллятора.

В **приложении 4** представлена динамика формирования диссипативных структур в каталитическом кубе для каталитического осциллятора.

В **приложении 5** приведены фазовые портреты для каталитического осциллятора в различных областях бифуркационного портрета.

Автор выражает искреннюю благодарность своему научному руководителю доктору физико-математических наук, профессору Добронцу Борису Станиславовичу за постоянное внимание, а также Быкову Валерию Ивановичу за оказанную поддержку.

## Список работ автора по теме диссертации

### По списку ВАК

1. Болтенков С.А. Нелинейное взаимодействие активной поверхности и объема твердого тела/ Болтенков С.А., В.И. Быков, С.Б. Цыбенкова // Доклады академии наук.- 2008.-Т. 421, №4, с. 494-497.
2. Болтенков С.А. Моделирование системы «автокаталитический осциллятор + диффузия» (трехмерный случай) // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. – 2007. – Т.5. <http://www.chemphys.edu.ru/pdf/2007-03-01-001.pdf>.
3. Болтенков С.А. Применение объектно-ориентированного программирования в параметрическом анализе структур Тьюринга // Наука и образование: электронное научное издание. Инженерное образование. – 2007. – Т. 6. <http://www.techno.edu.ru:16001/db/msg/57766.html>.

### В других изданиях:

4. Болтенков С.А. Исследование влияния коэффициентов диффузии структуры Тьюринга с помощью параметрического анализа// Материалы IX школы-семинара молодых ученых «Математическое моделирование и информационные технологии» 22-27 октября 2007 года. Издательство Института динамики систем и теории управления СО РАН, 2007,-197 стр.
5. Болтенков С.А. Бифуркационный анализ структуры Тьюринга //Молодежь и современные информационные технологии: сборник трудов IV Всероссийской научно-практической конференции студентов, аспирантов и молодых ученых. Томск, 28 февраля – 2 марта 2006 г. – Томск: Изд-во ТПУ, 2006.-418с.
6. Болтенков С.А. Программное обеспечение имеет сертификат регистрации отраслевого Фонда алгоритмов и программ: свидетельство № 7030, номер государственной регистрации 50200601796.
7. Болтенков С.А. Параметрический анализ структуры Тьюринга (двумерный случай)//Вестник КГТУ. Серия математические методы и моделирование.-2006.-Вып. 42. С. 5-12.

Болтенков Степан Анатольевич  
Программно-параметрический комплекс  
для параметрического анализа моделей вида «реакция+диффузия»  
Автореф. дисс. на соискание учёной степени кандидата физ.-мат. наук.  
Подписано в печать 22.09.2008. Заказ № 04  
Формат 60×90/16. Усл. печ. л. 1. Тираж 100 экз.  
Типография. 660062.г Красноярск. ул. Телевизорная 4Г