УДК 519.6
[1] **А.О. Антонюк**
Канд. фіз.-мат. наук, доцент, доцент
[2] **Н.Г. Антонюк**
Канд. хім. наук, доцент, доцент
[1]*Національний університет державної фіскальної служби України, м. Ірпінь, Київської області*
[2]*Національний університет «Києво-Могилянська академія», м. Київ*

ДО МІНІМІЗАЦІЇ НА МНОЖИНІ МАТРИЦЬ

Вступ. При розробці моделей масопереносу в процесах адсорбції багатокомпонентних сумішей речовин із розчинів найбільш розповсюдженими вважаються два підходи. В першому з них моделі представляються у вигляді системи звичайних диференціальних рівнянь, яка має вигляд [1]

$$\dot{x} = B(\Phi(x) - x),$$

де $x \in E^n, \Phi(x)$ – відома вектор-функція рівноважних концентрацій, x – вектор концентрацій речовин, B – матриця (nхn). Аналіз закономірностей кінетики адсорбції та розробка методів розрахунку технології розділення сумішей речовин вимагають знання чисельних величин елементів саме матриці коефіцієнтів B. Задача ідентифікації матриці B може бути зведена до оберненої задачі, тобто до задачі мінімізації функції нев'язки

$$F(B) = \sum_{i=1}^{N} \left\| x_{i\exp} - x(t_i, B) \right\|^2$$

де x_{iexp} – експериментально отримані значення концентрацій, $x(t_i,B)$ – значення концентрацій, які отримуються як розв'язок системи рівнянь в моменти часу t_i при певних значеннях матриці B.

Проте елементи матриці B не можна обирати довільно. Це пов'язано з тим, що реальний процес повинен бути стійким в околі точки x_*, для якої $\Phi(x_*) = x_*$. Тобто в процесі мінімізації нев'язки матрицю B слід вибирати таким чином, щоб матриця (похідна правої частини системи) $-B(\Phi'(x_*) - I)$ мала власні числа з позитивними дійсними частинами. Зрозуміло, що якщо вона буде позитивно визначеною, то така вимога буде автоматично виконуватися.

Нехай $\{A\}$ – множина позитивно визначених матриць. Тоді, вважаючи, що існує $(\Phi'(x_*) - I)^{-1}$, для будь-якої матриці $A \in \{A\}$ покладемо

$$B(A) = -A(\Phi'(x_*) - I)^{-1},$$

і бачимо, що матриця $-B(A)(\Phi'(x_*) - I) = A$ буде завжди позитивно визначеною за способом побудови. Отже, задача мінімізіції нев'язки тепер звелася до задачі мінімізації функції $F(B(A))$ на множині позитивно визначених матриць.

Але обмеження такого типу неможливо задати традиційною постановкою, тобто у вигляді системи нерівностей. Уже для розмірності 3 звичайними обмеженнями позитивно визначену матрицю задати досить складно.

Інший підхід до моделювання процесів масопереносу пов'язаний із заданням густин дифузійних потоків компонентів суміші у вигляді узагальненого закону Фіка. В цьому випадку рівняння кінетики адсорбції будуть рівняннями з частковими похідними [2]. Тут надамо розв’язок такої системи рівнянь

$$\overline{x} = (I - \frac{6}{\pi^2}\sum_{m=1}^{\infty}\frac{1}{m^2}\exp(-\frac{m^2\pi^2 t}{r_0^2}D))x_0 ,$$

де $\overline{x}$ – середня по об’єму сферичної частинки радіусу r_0 величина адсорбції, x_0 – початкова концентрація речовин.

Як бачимо, він також містить матрицю D, яка також повинна бути позитивно визначеною як умова збіжності наведеного матричного ряду.

В [2] запропоновано метод параметризації множини позитивно визначених матриць $\{A\}$. Суть цього методу полягає у формулюванні конкретної чисельної процедури, яка дозволяє довільному вектору розмірності n^2 ставити у відповідність позитивно визначену матрицю розмірності (nxn). Однак реалізація цього методу пов’язана з великими обчислювальними складнощами.

В даному дослідженні для методу [2] запропоновано декілька спрощених обчислювальних процедур, які дозволяють суттєво підвищити його ефективність.

Список використаних джерел

1. Михалевич В.С., Редковский Н.Н., Антонюк А.А. Некоторые методы минимизации на множестве неотрицательно определенных матриц // Кибернетика. - 1986. - № 6. – С. 84-97.

2. Антонюк А.А., Марутовский Р.М., Редковский Н.Н. Численное решение обратной задачи нестационарной массопроводности многокомпонентных смесей // Инженерно-физический журнал. – 1987. – Т. 53, №1. – С.113-117.