

ANA Z. IVANOVIĆ

NU IHTM, Univerzitet u Beogradu,
Centar za katalizu i hemijsko
inženjerstvo, Beograd

PREGLEDNI RAD

UDK 544.42/.43:66:543

DOI: 10.2298/HEMIND09054671

PREGLED SAVREMENIH METODA KOJE SE KORISTE U ANALIZI VREMENSKIH SERIJA NELINEARNIH DINAMIČKIH SISTEMA*

Dat je kritički prikaz metoda za karakterizaciju vremenskih serija nelinearnih dinamičkih sistema kao i njihov istorijski razvoj i preporuke za primenu. Za kompletnu analizu složenih dinamičkih sistema pored kvantitativnih metoda koje često predstavljaju jedini način da se pouzdano identifikuje oblik dinamike, koriste se i kvalitativne metode poput atraktora, metode razlaganja po singularnim vrednostima, Poenkareovog preseka, spektra snage i autokorelacije. Prisustvo haosa u ovakvim sistemima može biti potvrđeno određivanjem najvećeg pozitivnog Ljapunovljevog eksponenta koji pokazuje kako se menja rastojanje dve bliske početne tačke tokom evolucije dinamičkog sistema. Zatim, Kolmogorovljevom entropijom (K -entropija) meri se koliko je nereden, odnosno haotičan neki sistem. Kako su mnogi nelinearni sistemi osetljivi na početne uslove u smislu da njihove trajektorije koje su u početku bliske mogu da se razdvajaju i kod haotičnih sistema formiraju atraktore čudne, fraktalne geometrije. Čudni atraktori se mogu rekonstruisati iz vremenske serije jedne promenljive metodom razlaganja po singularnim vrednostima. Pored toga, značajan kvalitativni pokazatelj haosa je Poenkareov presek koji omogućuje da se iz njegovog izgleda u dvodimenzionalnoj ravni može odrediti karakter kretanja koje ga generiše u višedimenzionalnom faznom prostoru. Zatim, spektar snage je pogodan za kvalitativno razlikovanje sistema sa haotičnom dinamikom od periodične dinamike sa više frekvencija, dok autokorelaciona funkcija meri korelaciju (sličnost) signala sa samim sobom u različitim vremenskim intervalima.

Dinamika nelinearnih reakcionih sistema [1–3] udaljenih od ravnoteže obuhvata istraživanja različitih oblika monotone i (pulsatilne) diskontinualne evolucije reakcionih sistema, kao i prelaze jednih u druge, odnosno bifurkacije, pri čemu se posebna pažnja posvećuje regularnim oscilatornim procesima kao i oscilatornim procesima u neregularnom periodičnom režimu poznatom pod nazivom deterministički haos [4]. Neperiodične oscilacije reakcionih sistema nastaju pod strogo kontrolisanim uslovima i bez obzira na njihovu prividnu neredenost i dokazanu nepredvidljivost, odlikuju se determinističkim karakterom u pogledu niza osobina. U proučavanju zakonitosti neperiodičnih oscilacija nezaobilazni korak je određivanje tih invarijantnih osobina, kao i karakterizacija tipa haosa njihovom kvantifikacijom, što se uobičajeno naziva kvantifikacijom haosa. Međutim, zakonitosti nelinearne dinamike se mogu sagledati iz vremenskih serija samo uz pomoć specifičnih, sofisticiranih metoda analize, bez obzira da li su izvorni podaci dobijeni eksperimentalnim merenjima nekog signala ili numeričkim simulacijama.

Složenost problema karakterizacije nelinearne dinamike najbolje se vidi na primeru determinističkog haosa koji je najsloženija forma nelinearne dinamike. Primeri determinističkog haosa su identifikovani u najrazličitijim prirodnim sistemima uključujući industrijski

važne katalitičke reakcije, [5–7] biohemijske procese u ćelijama živih organizama, [8] dinamiku ekosistema, [9] ekonomiju, [10] saobraćaj [11]. Pokazalo se da, bez obzira na prirodu sistema, dinamika nekog od tipova determinističkog haosa pokazuje uvek iste, univerzalne osobine [3]. Nelinearni reakcioni sistemi su se pokazali kao odličan izvor za dobijanje kontrolisanog haotičnog stanja u laboratorijskim uslovima, kao dinamičkog stanja koje se može reprodukovati. Zahvaljujući determinističkoj prirodi fenomena, određivanje kvantitativnih pokazatelja haosa daje nove informacije o fizičko-hemijskoj prirodi reakcionog sistema koja prouzrokuje ovu pojavu, a u slučaju nelinearnih reakcionih sistema najčešće kroz vrednosti konstanti brzina u odgovarajućem modelu reakcionog mehanizma.

Jedan od problema u istraživanjima dinamike pomenutih reakcionih sistema jeste identifikacija oblika dinamike u graničnim slučajevima, koji se javljaju u blizini bifurkacije. Direktno vizuelno razlikovanje haotičnih i regularnih oscilacija moguće je samo u retkim slučajevima i sa velikom dozom nepouzdanosti. Zato kvantifikacija haosa često predstavlja jedini način da se pouzdano identifikuje oblik dinamike. Osim toga, kvantitativni pokazatelji haosa nose u sebi sofisticirane informacije o suptilnoj prirodi mehanizma koji je odgovoran za nastanak ove najsloženije forme nelinearne dinamike. Pored kvantitativnih, postoje i kvalitativni pokazatelji determinističkog haosa: geometrija atraktora, [12] Poenkareovi preseki, [1,13] spektar snage, [1] autokorelaciona funkcija [3,4].

I pored brojnih pokušaja, kvantifikacija haosa je i dalje netrivialni problem koji nema jedinstveno rešenje

Autor za prepisku: A. Ivanović, NU IHTM, Univerzitet u Beogradu, Centar za katalizu i hemijsko inženjerstvo, Njegoševa 12, Beograd.

E-pošta: ana.ivanovic@nanosys.ihtm.bg.ac.rs

Rad primljen: 15. oktobar 2009.

Rad prihvaćen: 22. oktobar 2009.

*Rad po pozivu povodom 20 godina od osnivanja Društva fiziko-hemičara Srbije.

[3]. Poznato je da je za adekvatnu karakterizaciju haotične dinamike neophodna kombinacija više metoda ali nije definisano koje metode treba koristiti u pojedinim slučajevima i kada će neka od njih dati pouzdani relevantni rezultat [3]. Način na koji se same metode koriste često je u velikoj meri arbitraran i zato kvalitet publikovanih rezultata ponekad više zavisi od iskustva istraživača nego od prirode sistema. Dodatni problem ili uzrok svih prethodno pomenutih problema je visok nivo složenosti nelinearnih reakcionih sistema koji su pod uslovima pojave determinističkog haosa ekstremno osetljivi na početne uslove. Zato je neophodno razviti pouzdane algoritme kvantifikacije haosa, kako bi se iz dinamike mogle izvući merodavne informacije o fizičko-hemijskoj prirodi sistema.

KVALITATIVNI POKAZATELJI HAOSA

Atraktori

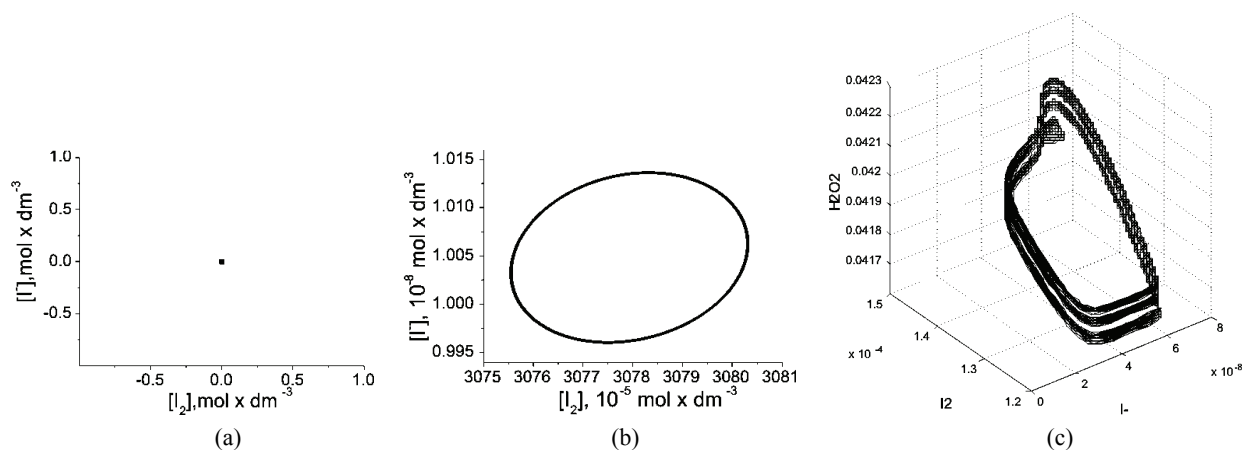
Da bi se objasnio pojam atraktora, neophodno je prvo objasniti pojam disipativnih sistema za koje su oni karakteristični. Disipativni sistemi su dinamički sistemi kod kojih se zapremina faznog prostora koju obuhvataju trajektorije smanjuje sa vremenom i teži nuli kada $t \rightarrow \infty$. Na taj način dolazi do zgušnjavanja trajektorija i njihovog privlačenja ka nekom geometrijskom objektu. Ti objekti nazivaju se atraktorima [3,4]. Drugim rečima, atraktor je skup tačaka na kojima se akumuliraju trajektorije dinamičkog sistema. Geometrijska struktura atraktora može biti vrlo jednostavna, kao što je to slučaj kada se formira stacionarna ili fiksna tačka koja predstavlja atraktor stabilnog dinamičkog sistema. Stacionarna tačka može biti stabilna i nestabilna. Stabilna je ukoliko sebi privlači sve trajektorije iz domena atrakcije. Ukoliko nije stabilna, fiksna tačka može biti izvor u faznom prostoru ili sedlasta tačka. Granični ciklus, kao posebni oblik atraktora, predstavlja zatvorenu liniju u faznom prostoru, kojoj u vremenskoj dimenziji odgovara pravil-

no periodično kretanje, odnosno periodične promene koncentracija reakcionih vrsta – oscilacije. Granični ciklus obično nastaje gubitkom stabilnosti fiksne tačke tako što ponor sa promenom parametra postane izvor, a oko njega se formira granični krug. S druge strane, geometrijska struktura atraktora može biti i vrlo složena, što je karakteristika dinamičkih sistema u kojima se pojavljuju oscilacije mešanih modova i deterministički kaos, (slika 1) [14–19]. U poslednjem slučaju trajektorije dinamičkog sistema se grupišu na tzv. čudnom atraktoru koji ima fraktalnu strukturu. Fraktali koji će biti detaljnije objašnjeni u daljem tekstu, predstavljaju geometrijske objekte sa razlomljenom dimenzijom.

Kao što je već rečeno, kod disipativnih sistema ukupna zapremina koju obuhvataju trajektorije u faznom prostoru dinamičkog sistema se smanjuje, ali to ne mora biti slučaj u svim pravcima. Na primer, ukoliko se u prostoru R^3 , zapremina kontrahuje u dva pravca, a u trećem se ne menja, lokalni atraktor će biti sličan duži. Najjednostavniji geometrijski objekat koji je kompaktan i lokalno liči na duž je krug, pa se takav atraktor naziva graničnim krugom. Granični krug je najjednostavniji primer periodičnog kretanja kada postoji samo jedna perioda i jedna frekvencija. Kako haotično kretanje nije periodično i nije stacionarno, njemu odgovaraju čudni atraktori.

Svojstva čudnog atraktora

Haotično kretanje nije periodično i nije ravnotežno. Takvom kretanju odgovaraju posebni atraktori čudnih svojstava tzv. čudni atraktori. Čudni atraktor (fraktalni atraktor) predstavlja ograničeni deo faznog prostora u kome se dešava beskonačno kretanje sistema koje se nikada ne ponavlja. Grafički bi se odgovarajuća trajektorija mogla predstaviti kao beskonačna linija u konačnom prostoru koja nikada ne seče samu sebe. Ova vrsta atraktora je stabilna, niskodimenziona i neperiodična. Čudni atraktori imaju necelobrojnu vrednost dimenzije.



Slika 1. Atraktori; a) tačka, b) granični krug i c) kaos u simulaciji Bray–Liebhafsky oscilatorne reakcije.

Figure 1. Attractors; a) point, b) limit cycle and c) chaos in the simulation of the Bray–Liebhafsky oscillatory reaction.

Osnovna karakteristika haotičnih dinamičkih sistema je da su veoma osetljivi na početne uslove. To znači da ukoliko, bar u jednom pravcu, umesto kontrakcije dođe do istezanja faznog prostora inicijalno bliske tačke će se tokom vremena naći proizvoljno daleko jedne od drugih, što ima za posledicu principijelnu neodređenost njihovog položaja, i pojavu haosa. Pošto su ovi sistemi disipativni, njihove trajektorije u faznom prostoru se ipak zadržavaju u ograničenoj zapremini, odnosno na atraktoru, a osetljivost na početne uslove čini da ovi atraktori imaju kompleksnu, fraktalnu geometriju. Pojava čudnog atraktora u dinamici sistema označava pojavu haosa.

Metoda razlaganja po singularnim vrednostima

Atraktori se mogu rekonstruisati iz vremenske serije jedne promenljive metodom Takensa [20] za različite vrednosti vremena kašnjenja. Ova metoda je veoma jednostavna u osnovi, i zato i dalje veoma popularna, ali je njena primena iz više aspekata nedovoljno definisana i arbitrarna u pogledu izbora kritičnih parametara od kojih zavisi krajnji rezultat.

Savremeni pristup rekonstrukciji atraktora predložen je od strane Broomhead-a i King-a [21] i zasnovan je na metodi razlaganja po singularnim vrednostima (SVD), koja je veoma korisna za ekstrahovanje kvalitativne dinamike iz eksperimentalnih podataka.

Ispitivani dinamički sistem je opisan setom diferencijalnih jednačina:

$$\frac{dx}{dt} = F(X)$$

gde $X(x_1, x_2, x_3, \dots)$ predstavljaju vektore stanja. Pošto je merena jedna promenljiva v , na primer $v = x_1$, dobijena je vremenska serija $\{v(k\tau)\}$, gde je τ razlika između dva uzastopna merenja, a k ima vrednost $k = 1, 2, \dots, N+d-1$. Podrazumeva se da je vremenska serija dobijena uzorkovanjem signala u ekvidistantnim vremenskim intervalima. Oznaka τ predstavlja vreme kašnjenja (time delay), $(N+d-1)$ ukupan broj eksperimentalnih tačaka, a d dimenziju prekrivanja (embedding). Potrebno je izabrati dovoljno veliku vrednost za d da bi se osigurala potpuna prekrivenost SVD spektra. Zatim, može se konstruisati d dimenzioni vektor $Y(t) = [v(t), v(t + \tau), \dots, v(t+(d-1)\tau)]$. Nizom vektora $Y(t_0)$, ($t_0 = \tau, 2\tau, \dots, N\tau$), možemo definisati $N \times d$ matricu trajektorije A :

$$A = \begin{bmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ \vdots \\ Y_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} v(\tau) & v(2\tau) & \dots & v(d\tau) \\ v(2\tau) & v(3\tau) & \dots & v((d+1)\tau) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ v(N\tau) & v((N+1)\tau) & \dots & v((N+1-d)\tau) \end{bmatrix} \quad (1)$$

koja sadrži sve bitne informacije o topologiji atraktora dinamičkog sistema, na osnovu Takens-ove teoreme [20].

Osnovna ideja Broomhead-a i King-a [21], jeste da je dovoljna dimenzija prekrivanja, d , jednaka broju

linearno nezavisnih vektora koji se mogu dobiti iz ranga matrice trajektorije A .

Primenom SVD metode matrica A se može razložiti na sledeći način:

$$A = USV^T \quad (2)$$

Elementi matrice S su singularne vrednosti i po konvenciji daju se u opadajućem nizu:

$$s_1 \geq s_2 \geq \dots \geq s_d \geq 0 \quad (3)$$

Ako matrica A ima rang n , gde je $n < d$, onda je:

$$s_1 \geq s_2 \geq \dots \geq s_n \geq s_{n+1} = \dots = s_d = 0 \quad (4)$$

Obrnuto, ako je $s_n > 0$, i $s_{n+1} = 0$, tada je rang od A jednako n .

SVD metoda daje set singularnih vektora matrice A , koga čine singularni vektori koji odgovaraju nenultim singularnim vrednostima i definišu prostor u kome se nalazi atraktor i singularni vektori koji odgovaraju nultim singularnim vrednostima i čine ortonormalan bazu nultog prostora matrice A , tj. potiču od šuma.

U praksi, singularne vrednosti nisu nikada zaista identične nuli. Umesto toga, rang matrice se prepoznaje na osnovu naglog i dramatičnog pada, obično za nekoliko redova veličine, između susednih elemenata dijagonalne matrice S .

Jednačina (3) napisana u obliku:

$$s_1 \geq s_2 \geq \dots \geq s_{n+1} \geq \dots \geq s_d \geq 0 \quad (5)$$

može biti iskorišćena za dekomponovanje prostora singularnih vektora u dva ortogonalna dela: deterministički podprostor koji odgovara vrednostima s_i , za $i = 1, \dots, n$; i podprostor šuma koji odgovara vrednostima s_i za $i = n + 1, \dots, d$.

Vrednosti s_i za $i = n + 1, \dots, d$; ukazuju na prag šuma, odnosno granicu šuma u vremenskoj seriji.

Kada se na ovaj način odaberu značajne singularne vrednosti iz SVD spektra, ostale se proglašavaju da su jednake nuli. Već je rečeno da nulte singularne vrednosti potiču od šuma. Zatim se signal i šum mogu razdvojiti tako što samo odabrane najveće singularne vrednosti iz matrice S stavimo u novu dijagonalnu matricu S_1 , a ostale dijagonalne elemente izjednačimo sa nulom, tako da dobijamo:

$$\bar{A} = US_1V^T \quad (6)$$

gde je \bar{A} filtrirana verzija originalne matrice trajektorije A .

Iako je metoda SVD mnogo pouzdanija od Takens-ove, ipak i ona nije lišena problema. Tako na primer, singularne vrednosti često ne pokazuju nagli pad nego eksponencijalno opadanje i ono je generalna karakteristika haosa u SVD spektru [20,22–28]. Pri tom, vrednost brzine opadanja zavisi od izabrane veličine dimenzije prekrivanja i oblika korišćenog modela. Lih i sarnici [27] predložili su objašnjenje kontinualnog opadanja

singularnih vrednosti u SVD spektru na sledeći način: metoda SVD je zasnovana na identifikovanju celobrojne vrednosti broja ortogonalnih baznih vektora. Međutim, haotični atraktori uvek imaju necelobrojnu dimenziju i zato fraktalna dimenzija doprinosi konačnom vrednošću ostalim singularnim vrednostima i vektorima.

POENKAREOVI PRESECI

Još jedan kvalitativni pokazatelj pojave haosa u sistemu je Poenkareov presek [1,3,13], koji je uveo veliki francuski matematičar s početka prošlog veka Anri Poenkare. Posmatrajmo neku trajektoriju u m -dimenzionalnom faznom prostoru i presecimo je sa nekom $(m-1)$ -dimenzionalnom hiperpovršu koja ne mora biti ravan; važno je da je transverzalna na tok. Skup tačaka u preseku, pri čemu se u obzir uzimaju samo ulazne tačke trajektorije sa jedne strane površi, zove se Poenkareov presek (slika 2).

Pogodnost Poenkareovog preseka ogleda se u tome što se iz njegovog izgleda u dvodimenzionalnoj ravni može odrediti karakter kretanja koje ga generiše u više-

dimenzionalnom faznom prostoru. Svi preseci su u ograničenom delu ravni Poenkareovog preseka. Bez obzira na tip dinamike, trajektorija između dva uzastopna prolaska kroz datu površ pravi jedan ciklus. Dakle, granični krug periodičnog kretanja generiše u Poenkareovom preseku samo jednu tačku, dok pojava udvajanja perioda generiše dve tačke. Kvaziperiodično kretanje sa dve nesamerljive frekvencije na torusu ostavlja otisak kruga. Kod haotičnog kretanja pravilne figure se ne mogu razaznati u preseku zato što se haotična trajektorija nikada ne vraća u istu tačku [3,4].

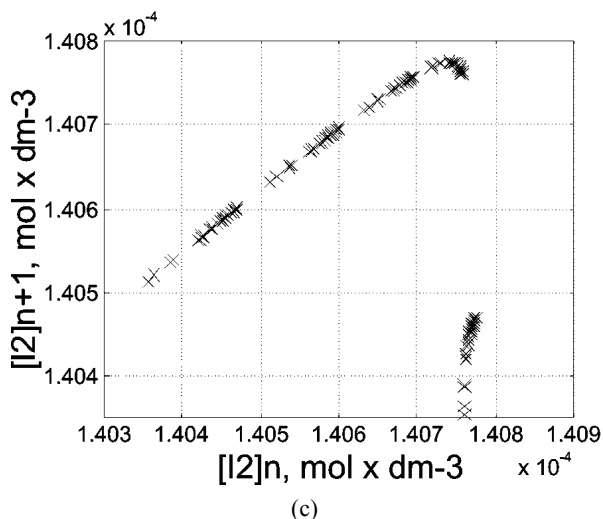
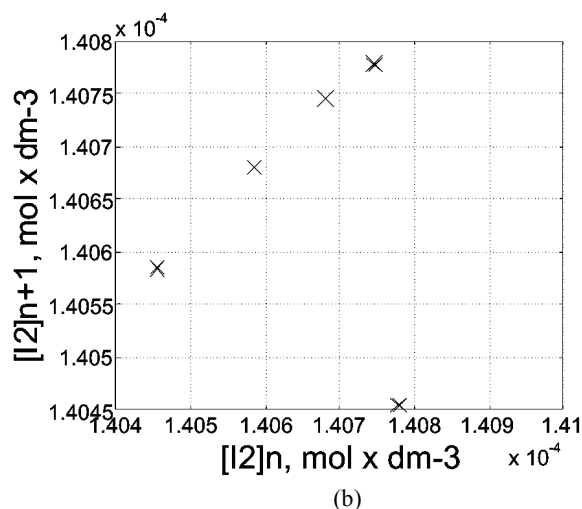
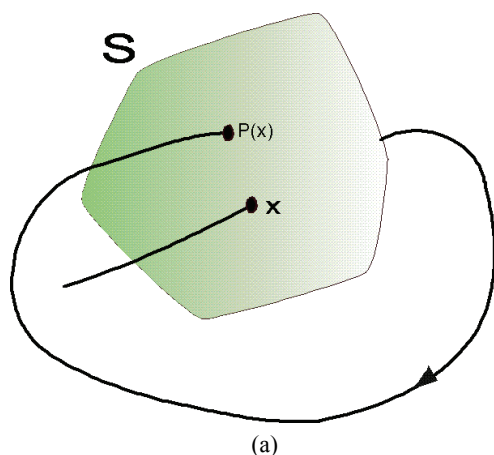
SPEKTAR SNAGE I AUTOKORELACIJA

Spektar snage predstavlja kvadrat modula Furijeve transformacije duž trajektorije:

$$P(\omega) = |\bar{x}(\omega)|^2$$

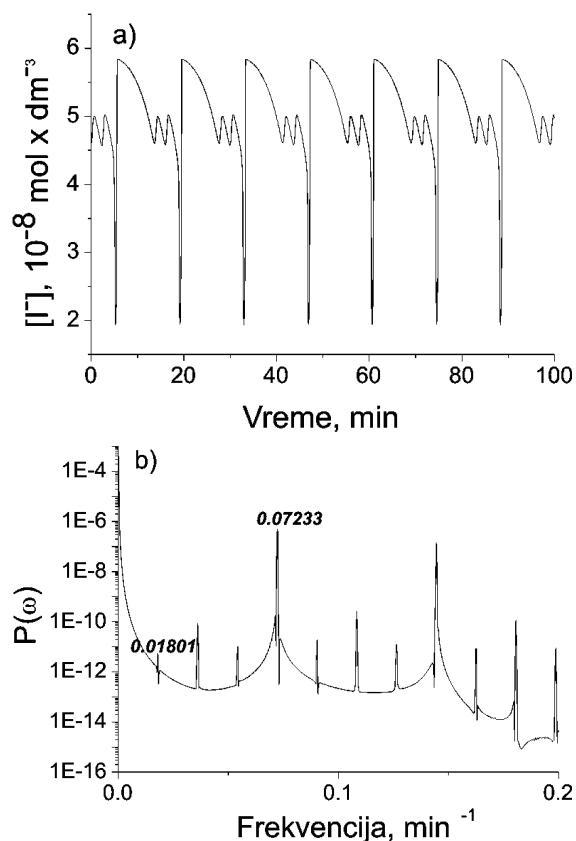
gde je

$$\bar{x}(\omega) = \int_0^{\infty} e^{i\omega t} x(t) dt \quad (7)$$



Slika 2. a) Poenkareov presek, b) Poenkareov presek koji odgovara vremenskoj seriji koja ima četiri velike i jednu malu oscilaciju u jednom periodu (pravilne oscilacije) i c) Poenkareov presek koji odgovara haotičnoj vremenskoj seriji Bray–Liebhafsky oscilatorne reakcije.
Figure 2. a) Poincaré section, b) Poincaré section that correspond to time series with four large and one small oscillation in one period and c) Poincaré section that correspond to chaotic time series in the Bray–Liebhafsky oscillatory reaction.

Spektar je pogodan za kvalitativno razlikovanje haotičnog kretanja od periodičnog kretanja sa više frekvencija. Naime, u spektru periodičnog kretanja vide se samo oštre linije koje odgovaraju određenim frekvencijama dok u spektru haosa preovladava širok ravan kontinuum. Međutim, i pored toga, u analizi haotičnih pojava nisu toliko korisni kao u analizi složenih harmonijskih signala. Naime, budući da su kvadrati modula, više ne poseduju informaciju o fazama, koja je jako važna za razumevanje onoga što se dešava na čudnim atraktorima. Na slici 3 prikazani su vremenska serija i spektar snage za simulaciju Bray–Liebhafsky oscilatorne reakcije pri jednoj vrednosti protoka.



Slika 3. a) Vremenska serija i b) spektar snage koji odgovara simulaciji Bray–Liebhafsky oscilatorne reakcije pri vrednosti protoka $4,9201 \times 10^{-3} \text{ min}^{-1}$.

Figure 3. a) Time series and b) power spectra that correspond to simulation of the Bray–Liebhafsky oscillatory reaction with the flow rate $4.9201 \times 10^{-3} \text{ min}^{-1}$.

Spektar snage daje informaciju o broju velikih oscilacija u vremenskoj seriji, kao i o tipu oscilacija. Na slici 3b može se uočiti glavni pik na frekvenci od $0,07233 \text{ min}^{-1}$ i njegovi harmonici na višim frekvencama. Recipročna vrednost frekvencije glavnog pika odgovara rastojanju između dve velike oscilacije u vremenskoj seriji. Recipročna vrednost frekvencije prvog pika u spektru snage na frekvenci od $0,01801 \text{ min}^{-1}$ podeljena sa dužinom jednog prividnog perioda u vremen-

skoj seriji daje broj njegovih ponavljanja u toku jednog stvarnog perioda. Na taj način se identifikuje tip dinamike u sistemu sa udvajanjem perioda, u slučajevima kada to nije očigledno iz same vremenske serije.

Kao i spektar snage, autokorelaciona funkcija takođe predstavlja rezultat integracije neke funkcije signala u odnosu na vreme, ali za razliku od spektra snage, autokorelaciona funkcija meri korelaciju (sličnost) signala sa samim sobom u različitim vremenskim intervalima. Korelacija je visoka za regularna kretanja, dok za haotična kretanja ona brzo opada na nulu. Opadanje autokorelacione funkcije na nulu je jedan od kvalitativnih pokazatelja determinističnog haosa.

KVANTITATIVNI POKAZATELJI HAOSA

Ljapunovljevi eksponenti

Ljapunovljev eksponent pokazuje kako se menja rastojanje dve bliske početne tačke tokom evolucije dinamičkog sistema. Ove veličine variraju od tačke do tačke na atraktoru ali je njihova srednja vrednost invarijantna. Osim toga, dinamički sistem je okarakterisan sa onoliko vrednosti Ljapunovljeveg eksponenta kolika je dimenzionalnost njegovog atraktora, jer se dve podjednako bliske tačke na atraktoru međusobno udaljavaju različitim brzinama, zavisno od pravca na kome su inicijalno pozicionirane. Na kraju, ukoliko je srednja vrednost najvećeg Ljapunovljeveg eksponenta pozitivna sistem je haotičan [3,4].

Obeležimo vremensku seriju sa $x(t_0), x(t_1), x(t_2), \dots$ kao x_0, x_1, x_2, \dots . Jednostavnosti radi, pretpostavimo da je vremenski interval između uzoraka jednak, tako da možemo pisati:

$$t_n - t_0 = n\tau \quad (8)$$

gde je τ vremenski interval između dva uzorka.

Ako se sistem ponaša haotično, manifestovaće se divergencija (razilaženje) bliskih trajektorija. Da bismo ovu pojavu opisali prvo odaberemo neku vrednost iz vremenske serije vrednosti x , i nazovemo je x_i , a zatim u vremenskoj seriji tražimo drugu vrednost, koja je bliska sa x i nazovemo je x_j . Zatim formiramo niz razlika:

$$\begin{aligned} d_0 &= |x_j - x_i| \\ d_1 &= |x_{j+1} - x_{i+1}| \\ d_2 &= |x_{j+2} - x_{i+2}| \\ d_n &= |x_{j+n} - x_{i+n}| \end{aligned} \quad (9)$$

Za ovaj niz pretpostavljamo da opada eksponencijalno, sa porastom vrednosti n .

Formalno možemo napisati:

$$d_n = d_0 e^{\lambda n} \quad (10)$$

ili nakon logaritmovanja u obliku:

$$\lambda = \frac{1}{n} \ln \frac{d_n}{d_0} \quad (11)$$

U praksi, jednačina (11) predstavlja definiciju Ljapunovljevog eksponenta. Različite vrednosti Ljapunovljevih eksponenata u jednom dinamičkom sistemu se dobijaju za različite pravce divergiranja inicijalno bliskih tačaka. Ljapunovljevi eksponenti se ređaju u opadajućem nizu, $\lambda_1 > \lambda_2 > \dots > \lambda_m$. Ljapunovljevih eksponenata ima onoliko, koliko ima dimenzija u faznom prostoru i oni sačinjavaju Ljapunovljev spektar dinamičkog stanja. Ljapunovljev spektar je isti u svim tačkama atraktora, kao i u svim tačkama iz domena atrakcije, jer se dobija usrednjavanjem kretanja po čitavom atraktoru. Ukoliko je makar jedan od eksponenata pozitivan, sistem je haotičan. Zbog toga su Ljapunovljevi eksponenti pogodni za klasifikaciju atraktora. Najpre, za bilo koji atraktor (prema definiciji disipativnih sistema) ukupna kontrakcija mora biti veća od ukupne ekspanzije, tako da je $\sum \lambda_i < 0$. Za granični krug je $\lambda_1 = 0$, dok su ostali $\lambda_i < 0$; za torus je $\lambda_1 = \lambda_2 = 0$, a ostali eksponenti su negativni $\lambda_i < 0$. U slučaju čudnih atraktora, najmanje jedan eksponent mora biti veći od nule.

Gore opisana procedura za određivanje Ljapunovljevih eksponenata odnosi se na algoritam preuzet iz knjige Chaos and Nonlinear Dynamics [3]. Problemi same metode sastoje se u sledećem: čitav postupak dugo traje, jer se trajektorije koje se porede biraju interaktivno uz učešće procene važenja aproksimacije eksponencijalnog porasta od strane operatera. Zatim, često dolazi do velikog rasipanja tačaka iz čijeg se nagiba računa Ljapunovljev eksponent, i na taj način se povećava greška određivanja. Dalje, neophodno je izvršiti usrednjavanje dobijenih vrednosti Ljapunovljevog eksponenta, ali tako da uzorak na kome se usrednjavanje vrši zaista reprezentuje zastupljenost odgovarajuće vrednosti u ukupnom vremenskom nizu. Na kraju, neophodno je obratiti pažnju i na to da trajektorije koje se porede ne budu suviše blizu u vremenskom nizu, što bi dovelo do pogrešnog rezultata.

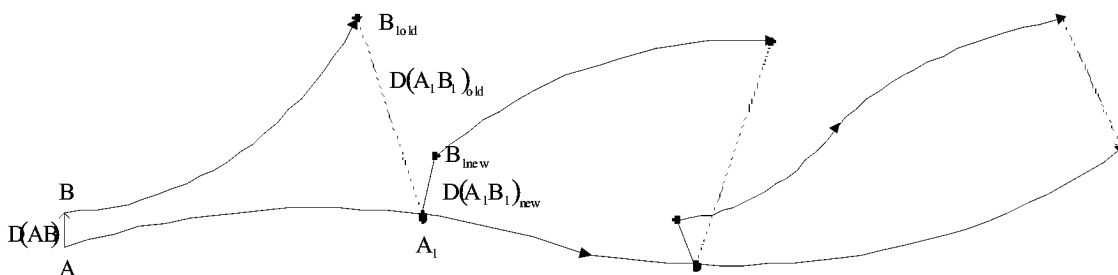
Pored ovog, značajno je pomenuti i algoritam autora Wolf-a i saradnika [29], koji se podjednako uspešno može primeniti kako na eksperimentalno dobijenim rezultatima, tako i na rezultate dobijene simulacijom.

Sušтина Wolfovog modela je da se primenom Takensove teoreme, od polazne vremenske serije za zadatu vrednost vremena kašnjenja τ , formira matrica trajektorije. Zatim se definiše polazna tačka A za $t = 0$ (slika 4). Na osnovu zadatih parametara, traži se u vremenskoj seriji najbliža tačka u n -dimenzionom prostoru, B. Neka je D_{AB} Euklidovo rastojanje između tačaka A i B, u multidimenzionom rekonstruisanom prostoru, pošto je atraktor smešten u fazni prostor reakcionih vrsta. Zatim se u vremenskoj seriji pronade položaj sistema nakon pomeranja za vrednost t_{evol} (vreme pomeranja koje se preporučuje da bude oko polovine srednjeg orbitalnog perioda), polazeći od obe tačke A i B. Nakon toga ponovo se računa rastojanje između tako dobijenih tačaka A_1 i $B_{1\text{new}}$ koje označavamo sa $D(A_1 B_{1\text{old}})$. Iz promene rastojanja računa se početna vrednost Ljapunovljevog eksponenta po formuli:

$$\frac{\log \frac{D_{A_1 B_{1\text{old}}}}{D_{AB}}}{t_{\text{evol}} DT \log 2}$$

gde je DT vreme između dve susedne tačke u vremenskoj seriji. Sledeći korak je usrednjavanje vrednosti Ljapunovljevog eksponenta po čitavom atraktoru. Zatim, procedura se ponavlja od tačke do tačke kroz čitavu vremensku seriju i usrednjene vrednosti se ažuriraju. Međutim, eksponencijalna zavisnost divergencije među susednim tačkama na atraktoru je primenljiva samo za jako mala rastojanja. Zbog toga, umesto tačke $B_{1\text{old}}$ tražimo novu tačku u prostoru stanja koja će biti najbliža tački A_1 , ali tako da se nalazi na istom pravcu u odnosu na tačku A_1 . Ako se nađe odgovarajuća zamena, nova tačka se proglašava za $B_{1\text{new}}$ i ponavlja se prethodna procedura, nakon koje se dobija nova vrednost Ljapunovljevog eksponenta. Ove vrednosti se sabiraju i računa se srednja vrednost. Ako se odgovarajuća zamena ne nađe, postupak se nastavlja sa starom $B_{1\text{old}}$. Procedura se ponavlja duž čitave trajektorije dok početna tačka A ne dođe do kraja vremenske serije.

Pored ovog tradicionalnog ali veoma pouzdanog postupka određivanja Ljapunovljevih eksponenata, razvijeni su u skorije vreme brži algoritmi, od kojih se neki takođe zasnivaju na metodi SVD [30].



Slika 4. Šematski prikaz evolucije i procedure zamene koji je korišćen za određivanje Ljapunovljevog eksponenta.

Figure 4. Schematic representation of the evolution and replacement procedure used to estimate Lyapunov exponent from time series.

Ljapunovljevi eksponenti su našli široku primenu u medicini u analizi signala koji su haotični; elektrokardiografskih promena kod pacijenata sa epilepsijom; signala očnog pritiska, srčanog ritma [31,32], u ekonomiji u analizi berze [33], u analizi složenih dinamičkih sistema kao što su Bray–Liebhafsky i Belousov–Zhabotinski oscilatornim reakcijama [34,35], u kvantnoj mehanici [36].

Iz spektra Ljapunovljevih eksponenata moguće je izračunati druge dinamičke karakteristike atraktora, kao što su K -entropija (Kolmogorovljeva entropija) i Ljapunovljeva (fraktalna) dimenzija.

Kolmogorovljeva entropija

Kolmogorovljeva entropija (K -entropija) meri koliko je neuređen, odnosno haotičan neki sistem. Po Šenovoj interpretaciji, neuređenost je usko povezana sa količinom informacija koju posedujemo o sistemu na nekom nivou rezolucije [3,4,37].

K -entropija data je kao granična vrednost:

$$K = \lim_{l \rightarrow 0} \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} I(l, T) \quad (12)$$

gde je $I(l, T)$ količina informacije dobijena praćenjem trajektorije u intervalu T sa preciznošću l .

Dakle, K -entropija meri količinu informacije potrebnu za precizno određivanje trajektorije u faznom prostoru. Takođe, može se shvatiti i kao brzina gubljenja neke početne informacije o položaju sistema u faznom prostoru.

Pogodnost K -entropije ogleda se u razlikovanju haotičnog kretanja od regularnog ili slučajnog i sastoji se u sledećem: za regularna kretanja $K = 0$; za slučajna kretanja $K \approx \ln N \rightarrow \infty$. Haotična kretanja su u odnosu na vrednost K negde između regularnih i slučajnih. Bitno je napomenuti da je kod jednodimenzionih haotičnih sistema, K -entropija jednaka Ljapunovljevom eksponentu. U više dimenzija, ukoliko je više od jednog Ljapunovljevog eksponenta pozitivno, važi da je K jednako sumi pozitivnih eksponenata, $K = \sum \lambda_i^+$.

FRAKTALI I FRAKTALNA DIMENZIJA

Matematička definicija fraktala glasi: fraktal je skup tačaka čija je fraktalna dimenzija veća od topološke dimenzije. Još preciznije: fraktal je entitet koji ima nece-lobrojnu fraktalnu dimenziju [3,4].

Fundamentalna odlika fraktalnih objekata je samo-sličnost. Naime, njihovi delovi su (po nekoj osobini) „slični“ celini.

Fraktalnu dimenziju sebi sličnog skupa najprostije definišemo sa:

$$d = \log(P) / \log(s) \quad (13)$$

gde se objekt (skup) sastoji od P kopija samog sebe umanjjenih za faktor s .

Dimezionalnost atraktora

Ako je atraktor fiksna tačka, rećićemo da je njegova dimenzija jednaka jedinici, zato što je tačka nula-dimenzioni objekat u geometriji. Ako je atraktor linija ili prosta zatvorena kriva može se reći da mu je dimenzija jedan, zato što su linija ili kriva jednodimenzioni objekti. Slično tome, površina ima dimenziju dva, zapremna dimenziju tri. Ova intuitivna definicija dimenzionalnosti odgovara definiciji topološke dimenzionalnosti.

Dimenzionalnost atraktora je blisko povezana sa dinamikom. Na primer, dimenzionalnost atraktora daje ocenu broja stvarnih stepena slobode za sistem.

Fraktalna dimezija atraktora u prostoru stanja

Mnogi nelinearni sistemi su osetljivi na početne uslove u smislu da njihove trajektorije koje su u početku bliske mogu da se razdvajaju i kod haotičnih sistema da formiraju atraktore čudne, fraktalne geometrije.

Topološka dimenzija je uvek ceo broj kako za tačku tako i za set tačaka i iznosi nula, zatim za liniju ili krivu jedan itd. Topološka dimezija je uvek manja ili jednaka takozvanoj metričkoj dimenziji. Primer je Koch-ova kriva. Njena topološka dimenzija je jedan, zato što je to kriva, dok je fraktalna dimezija 1,26.

Kaplan i York [38] predložili su da se dimenzija atraktora u multidimenzionom prostoru može definisati u funkciji srednjeg Ljapunovljevog eksponenta u tom prostoru. Ako su Ljapunovljevi eksponenti poredani od najvećeg ka najmanjem čineći spektar Ljapunovljevih eksponenta: $\lambda_1 > \lambda_2 > \dots > \lambda_d$, i ako je j najveći ceo broj za koji važi $\lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_j > 0$, Ljapunovljeva dimenzija se definiše na sledeći način:

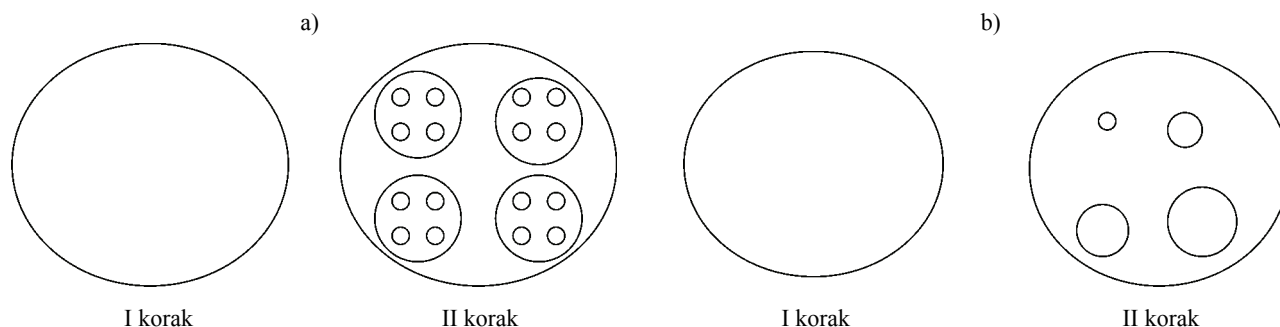
$$D_L = j + \frac{\sum_{i=1}^j \lambda_i}{-\lambda_{j+1}} \quad (14)$$

Atraktori haotičnih dinamičkih sistema mogu biti monofraktali (u daljem tekstu samo fraktali) ili multifraktali [3,4].

Višestruko skalirani fraktali nazivaju se multifraktalima. Razlika između fraktala na jednoj strani i multifraktala na drugoj strani se najbolje može uočiti na sledećem primeru.

Kod običnih fraktala počinje se sa konstrukcijom od jednog objekta veličine L , pa se on podeli na M identičnih delova, od kojih je svaki umanjena kopija početnog objekta. U sledećem koraku (iteraciji) se na svakom od tih objekata ponavlja ista procedura (slika 5a).

Osnovna razlika između fraktala i multifraktala je u tome što se u prvom koraku konstrukcije kod multifraktala stvara M kopija originalnog objekta, ali različite veličine i ta se procedura kasnije ponavlja (slika 5b).



Slika 5. a) Formiranje monofraktala i b) formiranje multifraktala.
Figure 5. Monofractal construction and b) multifractal construction.

Multifraktali su takođe našli primenu u različitim oblastima. U medicini se koriste za ispitivanje kompleksnosti srčanog ritma, krvnog pritiska, moždanih promena; u geologiji, za karakterizaciju vremenske fluktuacije geoelektričnog signala, u analizi gustine saobraćaja i predviđanja promena na berzi [39–43].

ZAKLJUČAK

Metode za karakterizaciju haosa se još razvijaju. Ovdje nabrojane metode (metoda razlaganja po singularnim vrednostima, Poenkareovi preseki, spektar snage i autokorelacija, Ljapunovljevi eksponenti, Kolmogorovljeva entropija, fraktali...) daju mogućnost da se iz vremenskih serija izvuče niz informacija o fizičko-hemijskoj prirodi dinamičkih sistema, kako bi se oni u praksi mogli upotrebiti za dijagnostiku, optimizaciju upravljanja i efikasnije dizajniranje procesa. Međutim, i pored brojnih prednosti ove metode su suočeni sa određenim problemima: Poenkareovi preseki haotičnih sistema mogu biti složeni za interpretaciju, u spektru snage se ne može odrediti broj malih oscilacija, određivanje Ljapunovljevih eksponentata često zavisi od iskustva istraživača, u analizi multifraktala početna serija na osnovu koje se ispituje multifraktalnost se može dobiti na više načina.

Zahvalnica

Autor se zahvaljuje Ministarstvu za nauku i tehnološki razvoj Republike Srbije (projekat br. 142019) na finansijskoj podršci.

LITERATURA

- [1] S. K. Scott, Chemical Chaos, School of Chemistry, University of Leeds, Oxford, 1991.
- [2] Lj. Kolar-Anić, S. Anić, V. Vukojević, Dinamika nelinearnih sistema od monotone do oscilatorne evolucije, Fakultet za fizičku hemiju, Univerzitet u Beogradu, 2004.
- [3] R. C. Hilborn, Chaos and Nonlinear Dynamics, 2nd ed., Oxford University Press, 2000.
- [4] M. Belić, Deterministički haos, Sveske fizičkih nauka 3 (3) (1990) 1.
- [5] R. Imbihl, Catal. Today **105** (2005) 206.
- [6] B. Blümich, L.B. Datshevich, A. Jess, T. Oehmichen, X. Ren S. Stapf, Catal. Today **105** (2005) 206.
- [7] V.P. Zhdanov, Physica D **144** (2000) 87.
- [8] R. Larter, J. Phys. Chem. **B** 107 (2003) 415.
- [9] S. Rinaldi, C. Solidoro, Theor. Popul. Biol. **54** (1998) 62.
- [10] D. Guégan, Ann. Rev. Control **33** (2009) 89.
- [11] P. Shang, X. Li, S. Kamae, Chaos Soliton. Fract. **25** (2005) 121.
- [12] D. Ruelle, F. Takens, Commun. Math. Phys. **20** (1971) 167.
- [13] A.L. Kawchzński. in: J. Gorecki, A.S. Cukrowski, A.L. Kawciński, B. Nowakowski (Eds.), Proceedings of the Third International Symposium: Far from Equilibrium Dynamic of Chemical Systems, World Scientific Publishing, 1994.
- [14] W.C. Bray, J. Am. Chem. Soc. **43** (1921) 1262.
- [15] W.C. Bray, H.A. Liebhaufsky, J. Am. Chem. Soc. **53** (1931) 38.
- [16] G. Schmitz, J. Chem. Soc. **84** (1987) 957.
- [17] Lj. Kolar-Anić, G. Schmitz, J. Chem. Soc. Faraday Trans. **88** (1992) 343.
- [18] Lj. Kolar-Anić, Đ. Mišljenović and S. Anić, G. Nicolis, React. Kinet. Catal. Lett. **54** (1995) 35.
- [19] Lj. Kolar-Anić, Đ. Mišljenović, S. Anić, React. Kinet. Catal. Lett. **57** (1996) 37.
- [20] F. Takens, in: D.A. Rand, L.S. Young, (Eds.), Dynamical Systems of Turbulence, Lecture notes in mathematics, Springer, Berlin, Vol. 898, 1981, p. 361.
- [21] D.S. Broomhead, G.P. King, Physica D **20** (1986) 217.
- [22] J.-Y. Ko, J.-S. Lih, M.-C. Ho, C.-C. Tsai, J.-L. Chern, Chinese J. Phys. **37** (5) (1999) 449.
- [23] W.M. Macek, Physica D **122** (1998) 254.
- [24] M. Palus, I. Dvorak, Physica D **55** (1992) 221.
- [25] A.M. Fraser, Physica D **34** (1989) 391.
- [26] A.M. Albano, J. Muench, C. Schwartz, A.I. Mess, P.E. Rapp, Phys. Rev. A **36** (1988) 3017.
- [27] J.-S. Lih, J.-Y. Ko, J.-L. Chern, I.-M. Jiang, Europhys. Lett. **40** (1) (1997) 7.
- [28] A.I. Mess, P.E. Rapp, J.S. Jennings, Phys. Rev. **36** (1) (1987) 340.
- [29] A. Wolf, J.B. Swift, H.L. Swinney, J.A. Vastano, Physica D **16** (1985) 285.
- [30] L. Dieci, C. Elia, Math. Comput. Simul. **79** (2008) 1235
- [31] E.D. Übeyli, İ. Gülerb, Eng. Appl. Artif. Intel. **17** (2004) 567

- [32] E.D. Ü beyli, İ. Güler, *Comput. Biol. Med.* **35** (2005) 405.
- [33] A. Serletis and P.Gogas, *Res. Econ.* **51** (1997) 359
- [34] A.Z. Ivanović, Ž.D. Čupić, M. M. Janković, Lj.Z. Kolar-Anić, S.R. Anić, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **10** (2008) 5848.
- [35] O.Z. Didenko, P.E. Strizhak, *Chem. Phys. Lett.* **340** (2001) 55.
- [36] V.I. Man'ko, R.V. Mendes, *Physica D* **145** (2000) 330.
- [37] P. Grassberger, I. Procaccia, *Phys. Rev. Lett.* **50** (5) (1983) 346.
- [38] J. Kaplan, J.A. Yorke, *Springer Lect. Notes Math.* **730** (1979),204
- [39] M. Mezer, O. Stiedl, *Eur. J. Appl. Physiol.* **90** (2003) 305.
- [40] A.N. Pavlov, A.R. Ziganshin, O.A. Klimova, *Chaos, Soliton. Fract.* **24** (2005) 57.
- [41] J. Wang, X. Ning, Y. Chen, *Physica A* **325** (2003) 485.
- [42] L. Telesca, G. Colangelo, V. Lapenna, M. Macchiato, *Chaos Soliton. Fract.* **18** (2003) 395.
- [43] S. P.-Jian, S. J.-Sheng, *Chinese Phys. Soc.* **12** (2) (2007) 365.

SUMMARY

OVERVIEW OF THE CONTEMPORARY TECHNIQUES FOR THE ANALYSIS OF TIME SERIES FROM NON-LINEAR DYNAMIC SYSTEMS

Ana Z. Ivanović

Center for Catalysis and Chemical Engineering, Institute of Chemistry, Technology and Metallurgy University of Belgrade, Njegoševa 12, 11000 Belgrade, Serbia

(Review paper)

Interpretation of irregular dynamics of various systems as a deterministic chaotic process is increasingly popular and widely used in almost all fields of science. It is based on an idea that structurally complex systems can perform dynamics with only a few degrees of freedom reflecting a strange attractor in the system phase space. For complex oscillation description, many different methods are required. Beside quantitative methods such as Lyapunov exponent, Kolmogorov entropy and fractal dimension, there is a qualitative one such as attractors, singular value decomposition method, Power spectra and autocorrelation, Poincaré section. Determination of the Lyapunov exponents is a quantification method, which can be also used to evaluate other chaos quantifiers, such as the Lyapunov dimension of the attractor or the Kolmogorov entropy. The Lyapunov exponent is usually determined using the Wolf method, which allows the estimation of the largest nonnegative Lyapunov exponent from a time series. Dissipative dynamical systems that exhibit chaotic behavior, often has strange attractor in phase space. Strange attractors are typically characterized by fractal dimension, which is smaller than the number of degrees of freedom. However, fractal dimension is measure of global scaling property but multifractality depends on local scaling properties of the object, and therefore, obviously, there is a need for some other quantity to qualify the system. Singular-value decomposition method can be used for the strange attractor reconstruction from one-dimensional chaotic time series. The attractor reconstruction from the finite time series can give initial information about the structure of the dynamical system. A Poincaré map can be interpreted as a discrete dynamical system with a state space that is one dimension smaller than the original continuous dynamical system. Because it preserves many properties of periodic and quasiperiodic orbits of the original system and has a lower dimensional state space it is often used for analyzing the original system. The Power spectra capture the frequency content of a stochastic process and helps identify periodicities. Autocorrelation measure correlation of the signals with itselfs in the different time intervals.

Ključne reči: Dinamički sistem • Ataktori • Metoda razlaganja po singularnim vrednostima • Poenkareovi preseki • Spektar snage i autokorelacija • Ljapunovljevi eksponenti • Kolmogorovljeva entropija • Fraktali
Key words: Dynamical system • Attractors • Singular value decomposition methods • Poincaré section • Power spectra and autocorrelation • Lyapunov exponent • Kolmogorov entropy • Fractals