О возникновении колебаний в одной задаче химической кинетики

Е.В. Щетинина[1]

[1]Самарский национальный исследовательский университет им. академика С.П. Королева, Московское шоссе 34А, Самара, Россия, 443086

Аннотация. Работа посвящена исследоваию модели брюсселятора при условии, что концентрация исходных веществ медленно изменяется. В работе исследуются режимы, возникающие в такой модели, и характер возникновения колебаний.

1. Введение

Исследование математических моделей сложных нелинейных систем часто бывает сопряжено со сложностями, возникающими из-за наличия в системе большого количества переменных и параметров. Для упрощения математической модели используют различные комбинации численных и аналитических методов. Часто параметры системы считаются константами. Это ведет, с одной стороны, к упрощению модели, а с другой стороны может послужить причиной недопонимания поведения реальной системы. Поэтому возникает вопрос об изменении характера движения при старении системы. Работа посвящена исследованию модели брюсселятора при условии, что концентрации исходных веществ в реакционном пространстве медленно меняются. В работе используются некоторые факты теории интегральных многообразий.

2. Метод интегральных многообразий

Метод интегральных многообразий является достаточно эффективным способ исследования сложных динамических систем. Основы этого метода были заложены в работах Боголюбова Н.Н., Митропольского Ю.А., Лыковой О.Б. Большое распространение этот метод получил для исследования систем, в которых различные переменные имеют различные скорости, так называемые разнотемповые системы [1]. Опишем основные идеи этого метода. Рассматривается система с быстрыми и медленными движениями:

$$\frac{dx}{dt} = f(x, y, a, \varepsilon), \varepsilon\frac{dy}{dt} = g(x, y, a, \varepsilon), \qquad (1)$$

где $x \in R^n, \mathrm{y} \in R^m, \mathrm{t} \in R$, a – параметр, $0 < \varepsilon \ll 1$. Здесь x – медленная переменная, y – быстрая переменная. Под интегральным многообразием понимается инвариантная поверхность дифференциальной системы. Среди интегральных многообразий системы (1) особый интерес представляют многообразия размерности медленной переменной, которые описываются уравнением $y=h(x, \varepsilon)$. Предполагается, что функция h достаточно гладко зависит от ε. Такие многообразия называются интегральными многообразиями медленных движений. Движение по медленному интегральному многообразию осуществляется в соответствии с уравнением

$$\dot{x} = f(x, h(x, \varepsilon), \varepsilon).$$

Предположим, что вырожденное уравнение $g(x,y,a,0)=0$ имеет изолированное решение $y=h_0(x,a)$. Тогда поверхность Г, задаваемая соотношением $y=h_0(x,a)$, называется медленным интегральным многообразием системы (1). Лист медленной поверхности устойчив, если собственные числа матрицы $\partial g/\partial y(\mathrm{x},\mathrm{h}_0(\mathrm{x},\mathrm{a}),\mathrm{a})$имеют отрицательные вещественные части. Если хотя бы у одного из собственных чисел этой матрицы вещественная часть становится положительной, то лист теряет устойчивость. В ε-окрестности устойчивого и неустойчивого листов медленной поверхности лежат устойчивое и неустойчивое медленные интегральные многообразия. Медленное интегральное многообразие представляет собой инвариантную поверхность, движение по которой осуществляется со скоростью порядка единицы.

Поверхность, на которой существуют собственные числа матрицы $\partial g/\partial y(\mathrm{x},\mathrm{h}_0(\mathrm{x},\mathrm{a}),\mathrm{a})$ с нулевой вещественной частью, называют поверхностью смены устойчивости. Наличие дополнительного параметра a обеспечивает условия для того, чтобы устойчивое и неустойчивое интегральные многообразия можно было склеить в одной точке поверхности срыва [3]. Существуют модели, в которых пара комплексно сопряженных собственных чисел, пересекающих вещественную ось в некоторый момент с ненулевой скоростью. Тогда в аналитических системах наблюдается эффект затягивания потери устойчивости. Этот эффект был подробно описан в работах Нейштадта А.И. [2]. Заметим, что существование дополнительного управляющего параметра в системе может влиять на изменение времени затягивания потери устойчивости [4].

3. Исследование автоколебательной системы

Рассмотрим модель, известную под названием брюсселятор. Брюсселятор стал основой описания процессов, возникающих в нелинейных неравновесных открытых системах различной природы: химической (периодические реакции, спирали), биологической (биологические часы), физической (диссипативные структуры в твердых телах), экономической (колебания курса на бирже) и т.д. Изначально эта математическая модель, описывала колебательную химическую реакцию (И.Р. Пригожин, Р. Лефевр, 1968). Эта модель возникает, например, при изучении 4-х сопряженных химических реакций

$$\boldsymbol{A \xrightarrow{k_1} X_1,\ 2X_1 + X_2 \xrightarrow{k_2} 3\,X_1,}$$
$$\boldsymbol{B + X_1 \xrightarrow{k_3} X_2 + D,\ X_1 \xrightarrow{k_4} E.}$$

Здесь A и B – исходные вещества, D и Е – конечные продукты, $\boldsymbol{X_1}$ и $\boldsymbol{X_2}$ – промежуточные продукты. Считается, что все стадии реакций необратимы, а концентрации веществ постоянны, конечные продукты в реакцию не вступают или сразу удаляются из реакционного пространства. Дифференциальные уравнения для концентрации веществ выглядят следующим образом

$$\boldsymbol{\dot{x_1} = A - (B+1)x_1 + x_1^2 x_2,}$$
$$\boldsymbol{\dot{x_2} = Bx_1 + x_1^2 x_2.}$$

В таком виде систему можно часто встретить в литературе. Известно, что система имеет нетривиальное положение равновесия

$$\boldsymbol{A - (B+1)x_1 + x_1^2 x_2 = 0,}$$
$$\boldsymbol{Bx_1 + x_1^2 = 0,}$$
$$\boldsymbol{x_1 = A, \quad x_2 = B/A.}$$

Линеаризуем систему в окрестности неподвижной точки. Матрица линеаризации имеет вид

$$\boldsymbol{L = \begin{pmatrix} B-1 & A^2 \\ -B & -A^2 \end{pmatrix}.}$$

Характеристическое уравнение

$$\boldsymbol{\lambda^2 + \lambda\left(A^2 + 1 - B\right) + A^2 = 0}$$

имеет корни

$$\boldsymbol{\lambda = -\frac{1}{2}\left(A^2 + 1 - B\right) \pm \sqrt{(A^2 + 1 - B) - 4A^2}.}$$

Напомним, что положение равновесия является устойчивым, если вещественная часть корней характеристического уравнения матрицы линеаризации отрицательна, и неустойчивым, если есть хотя бы один корень с положительной вещественной частью. Получаем, что при $\boldsymbol{B < A^2 + 1}$ положение равновесия является устойчивым, а при $\boldsymbol{B > A^2 + 1}$ положение равновесия неустойчиво. При $\boldsymbol{(A-1)^2 < B < A^2 + 1}$ положение равновесия является устойчивым фокусом. Это значит, что в исходной системе наблюдаются затухающие колебания вокруг положения равновесия. При $\boldsymbol{B > A^2 + 1}$ положение равновесия становится неустойчивым фокусом. Траектории, начинающиеся в малой окрестности положения равновесия, с течением времени достаточно быстро покидают эту окрестность. Известно, что в этом случае в системе появляется устойчивый предельный цикл. Таким образом, в системе наблюдаются автоколебания, а значение $\boldsymbol{B = A^2 + 1}$ является бифуркационным.

На рисунке 1 представлены траектории исходной модели при значениях *B* слева и справа от бифуркационных значений. На графиках видно, что чем меньше значение *B*, тем быстрее прекращаются колебательные процессы в системе, и решения сходятся к положению равновесия. При значении *B* справа от бифуркационного (последний график) в системе устанавливается периодическое движение.

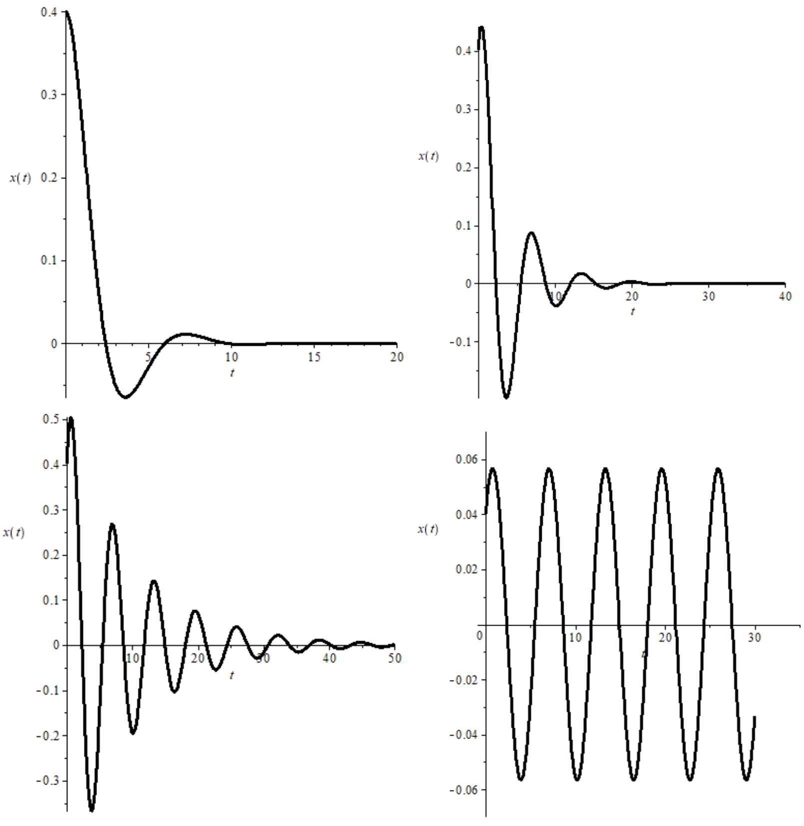

Рисунок 1. Изменение концентрации вещества $\boldsymbol{X_1}$ от времени при различных значениях величины *B*.

Рассмотрим задачу при условии, что концентрации веществ, участвующих в реакции, не являются постоянными величинами. Такая ситуация возможна, например, при неравномерности поступления веществ в реакционное пространство. Предположим, что концентрация вещества *B* с течением времени медленно растет. Т.е., рассмотрим быстро-медленную систему

$$\dot{x}_1 = A - (B+1)x_1 + x_1^2 x_2,$$
$$\dot{x}_2 = Bx_1 + x_1^2 x_2,$$
$$\dot{B} = \varepsilon,$$

где $\mathbf{0 < \varepsilon \ll 1}$. Здесь $\boldsymbol{x_1, x_2}$ – быстрые переменные, $\boldsymbol{B}$- медленная переменная. Эта система имеет медленное интегральное многообразие $\boldsymbol{x_1 = A}$, $\boldsymbol{x_2 = B/A}$. Учитывая проведенный ранее анализ, можно заключить, при изменении переменной *B* положение медленное многообразие меняет свою устойчивость с течением времени: оно является притягивающим при $\boldsymbol{B < A^2 + 1}$ и отталкивающим при $\boldsymbol{B > A^2 + 1}$. При линеаризации системы в малой окрестности этого многообразия получаем, что характеристическое уравнение матрицы линеаризации имеет пару комплексно сопряженных корней, вещественная часть которых растет с течением времени и пересекает мнимую ось с ненулевой скоростью. Известно, что в аналитических системах такой переход собственных чисел ведет к появлению эффекта затягивания потери устойчивости. Если начальные значения системы таковы, что $\boldsymbol{B(0) < A^2 + 1}$, то траектории системы, начинающиеся в некоторой малой окрестности положения, достаточно быстро приходят в малую окрестность притягивающего положения равновесия и остаются в ней до момента времени, при котором *B(t)* достигает своего бифуркационного значения. Однако при дальнейшем росте значений переменной *B(t)* траектории не сразу покидают малую окрестность положения равновесия, а остаются в ней еще некоторое время порядка 1, а потом резко срываются с отталкивающего положения равновесия. Появляются колебания с амплитудой порядка 1. Используя результаты [4], получаем, что медленное многообразие системы $\boldsymbol{x_1 = A, x_2 = B/A}$ является многообразием переменной устойчивости, а значит, с бесконечным временем затягивания потери устойчивости. Остальные траектории, начинающиеся при $\boldsymbol{B(0) < A^2 + 1}$, быстро попадают в малую окрестность притягивающего участка медленного многообразия и движутся вдоль него. Время нахождения около отталкивающего участка пропорционально времени, проведенному около притягивающего участка.

Таким образом, в модели брюсселятора при росте количества исходного вещества *B* наблюдается эффект затягивания потери устойчивости и происходит резкое качественное изменение поведения системы: если начальное значение $\boldsymbol{B(0)}$ меньше бифуркационного, в системе наблюдаются незначительные колебания около положения равновесия. Однако с течением времени, значительно позже момента, при котором $\boldsymbol{B(t)}$ перейдет бифуркационное значение, возникнут колебания с достаточно большой амплитудой. Причем, чем больше будет разность между бифуркационным значением величины *B* и начальным значением $\boldsymbol{B(0)}$, тем позднее произойдет срыв с положения равновесия, и тем больше будет амплитуда появившихся колебаний. На рисунке 2 представлены траектории быстро-медленной системы с различными начальными значениями переменной *B*. На графиках видна зависимость времени срыва от времени, проведенного около устойчивого участка положения равновесия.

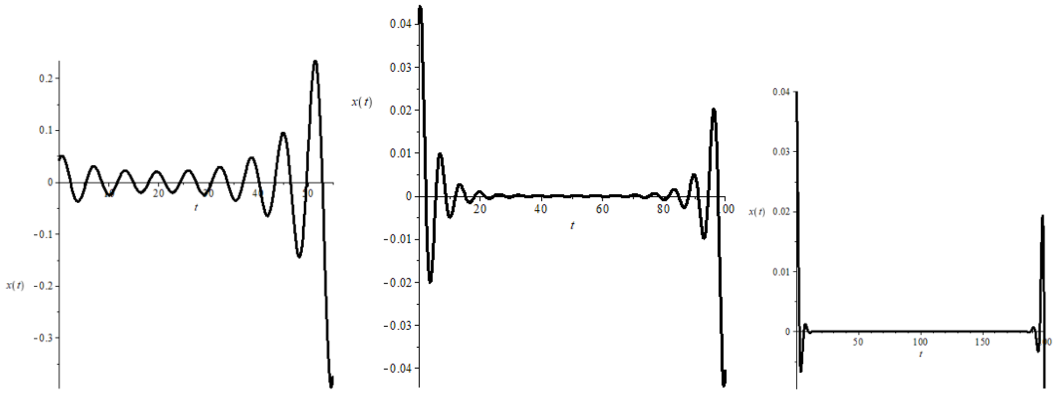

Рисунок 2. Изменение концентрации вещества $\boldsymbol{X_1}$ от времени при различных начальных значениях величины *B*.

4. Литература

[1] Воропаева, Н.В. Геометрическая декомпозиция сингулярно возмущенных систем / Н.В. Воропаева, В.А. Соболев. – М.:Физматлит, 2009. – 256 с.

[2] Нейштадт, А.И. О затягивании потери устойчивости при динамических бифуркациях /А.И. Нейштадт // Дифференциальные уравнения. – 1987. – Т. 23, № 12. – С. 2060-2067; 1988. – Т. 24, № 2. – С. 226-233.
[3] Соболев, В.А. Редукция моделей и критические явления в макрокинетике / В.А. Соболев, Е.А. Щепакинаю – М.: Физматлит, 2010. – 320 с.
[4] Щетинина, Е.В. Интегральные многообразия быстро-медленных систем и затягивание потери устойчивости / Е.В. Щетинина // Вестник СамГУ. Естеств.-научн. сер. – 2010. – Т. 6, № 80. – С. 93-105.

On oscillation appearance in one chemical problem

E.V. Shchetinina[1]

[1]Samara National Research University, Moskovskoe Shosse 34A, Samara, Russia, 443086

Abstract. The paper is devoted to the investigation of the Brusselator model under the assumption that the concentrations of initial substances slowly changing in time. This is the reason of appearance of the delayed loss of stability effect. Existence of oscillations is studied.