

Явление затягивания потери устойчивости в динамической модели автокаталитической реакции

М.А. Осипчук¹, Е.А. Щепаккина¹

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

Аннотация. Работа посвящена изучению явления затягивания потери устойчивости в случае складки медленной поверхности на примере динамической модели автокаталитической реакции типа Белоусова – Жаботинского.

1. Введение

В представленной работе исследуется нелинейная математическая модель, описывающая реакцию типа Белоусова – Жаботинского. Подобные реакции являются одним из важнейших примеров сложной нелинейной динамики в химической кинетике. Они демонстрируют большое разнообразие режимов, от простых периодических процессов до различных видов хаоса. Реакция Белоусова - Жаботинского представляет собой процесс окисления малоновой или броммалоновой кислоты ионами металлов переменной валентности [1]. В данной работе рассматривается модель трехмерного автокаталатора. Напомним, что автокаталатор – это реакционный сосуд, в котором протекает автокаталитическая реакция. В безразмерном виде динамическая модель имеет вид [2]:

$$\begin{aligned}\frac{dx}{d\tau} &= \mu \left(\frac{5}{2} + y \right) - xz^2 - x, \\ \frac{dy}{d\tau} &= z - y, \\ \varepsilon \frac{dz}{d\tau} &= xz^2 + x - z,\end{aligned}\tag{1}$$

где x , y , z - безразмерные концентрации реагирующих веществ, τ - безразмерное время, ε - малый положительный параметр, отражающий существенную разницу (до нескольких порядков) в динамике процессов, μ - скалярный положительный параметр, отражающий соотношение между скоростями химической реакции.

В работах [2, 3] было установлено, что в зависимости от значения параметра μ в химической системе могут наблюдаться два основных типа режима химической реакции – процесс с медленной динамикой и процесс с самоускорением. Роль своеобразного водораздела между этими двумя основными типами режимов играет критический режим, характеризующийся принципиальными отличиями в динамике по сравнению с перечисленными выше процессами. Было установлено, что критический режим связан с явлением затягивания потери устойчивости [4] и моделируется так называемой траекторией-уткой [5].

Целью настоящей работы является изучение явления потери устойчивости трехмерных систем в случае складки медленной поверхности на примере системы (1).

2. Основные результаты

Напомним, что медленной поверхностью [3] системы (1) является уравнение вида

$$g(x, y, z) = xz^2 - z + x = 0. \quad (2)$$

Пересечение медленной поверхности (2) и поверхности нерегулярных точек

$$\frac{\partial g}{\partial z} = 2xz - 1 = 0$$

задает кривые срыва

$$\begin{aligned} x = -\frac{1}{2}, \quad z = -1, \\ x = \frac{1}{2}, \quad z = 1. \end{aligned} \quad (3)$$

Кривые срыва делят медленную поверхность (2) на три части: устойчивый ($-1 < z < 1$) и два неустойчивых ($z > 1$ и $z < -1$), см. рисунок 1. Отметим, что в физически интересующей нас области $\Omega = \{x \geq 0, y \geq 0, z \geq 0\}$ находится одна устойчивая часть и одна неустойчивая часть медленной поверхности.

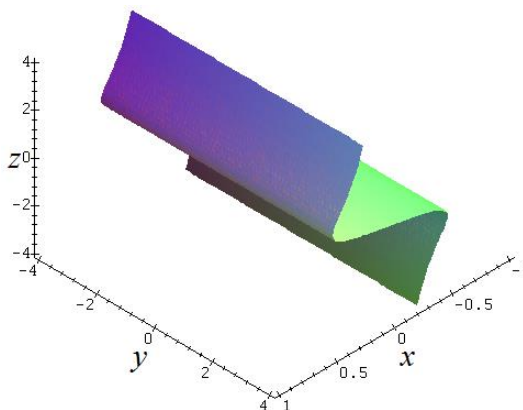


Рисунок 1. Медленная поверхность системы (1).

В зависимости от значения параметра μ особая точка

$$A \left(\frac{10\mu(1-\mu)}{29\mu^2 - 8\mu + 4}, \frac{5\mu}{2(1-\mu)}, \frac{5\mu}{2(1-\mu)} \right)$$

системы (1) может принадлежать как устойчивой, так и неустойчивой части медленной поверхности.

В ходе исследования [2, 3] понижена размерность системы (1) на основе метода интегральных многообразий сингулярно возмущенных систем. Сделан вывод, что при $0 \leq \mu < \frac{2}{7}$ особая точка лежит на устойчивой части медленной поверхности, при $\mu > \frac{2}{7}$ особая точка лежит на неустойчивой части медленной поверхности, а при $\mu = \frac{2}{7}$ особая точка лежит на кривой срыва (3).

Так как медленная поверхность (2) представляет собой нулевое приближение медленного инвариантного многообразия, то на основе проведенного анализа можно сделать выводы о поведении траекторий системы при различных значениях бифуркационного параметра μ .

При $0 \leq \mu < \frac{2}{7}$ траектория системы (1) после участка падения на устойчивое медленное инвариантное многообразие проходит вдоль него, стремится в особую точку, и это соответствует медленному режиму химической реакции, см. рисунки 2 и 3.

В случае $\mu = \frac{2}{7}$ особая точка лежит на кривой срыва, см. рисунок 4. Этот случай отвечает предельному медленному режиму, см. рисунок 5, так как при дальнейшем увеличении значения параметра динамика решений качественно изменяется.

В случае $\mu > \frac{2}{7}$ наблюдается режим с самоускорением. Это означает, что траектория системы после участка движения вдоль устойчивого медленного инвариантного многообразия

до некоторой точки, которая лежит на кривой срыва, срывается с медленного инвариантного многообразия и происходит переход к быстрой динамике, см. рисунки 6 и 7.

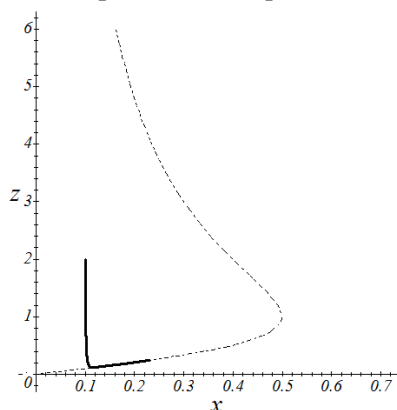


Рисунок 2. Проекция медленной поверхности (пунктир) и траектории системы (1) для случая $\mu = 0,1$; $\varepsilon = 0,01$.

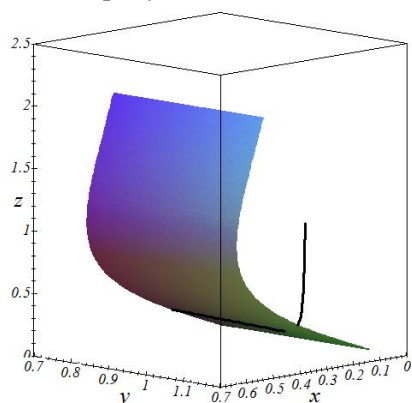


Рисунок 3. Медленная поверхность и траектория системы (1) для случая $\mu = 0,1$; здесь и далее значение параметра $\varepsilon = 0,01$.

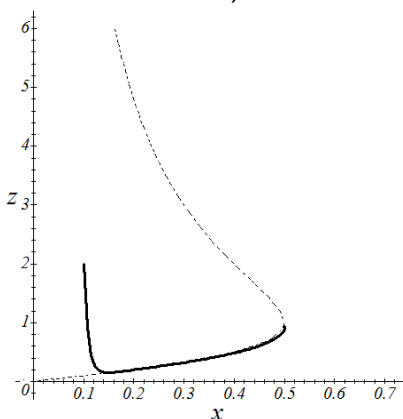


Рисунок 4. Проекция медленной поверхности (пунктир) и траектории системы (1) для случая $\mu = \frac{2}{7}$.

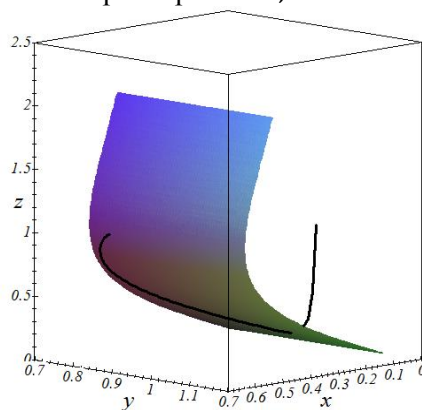


Рисунок 5. Медленная поверхность и траектория системы (1) для случая $\mu = \frac{2}{7}$.

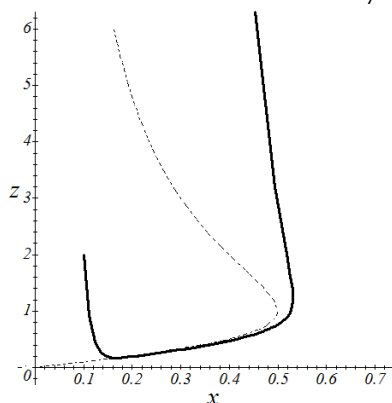


Рисунок 6. Проекция медленной поверхности (пунктир) и траектории системы (1) для случая $\mu = 0,4$.

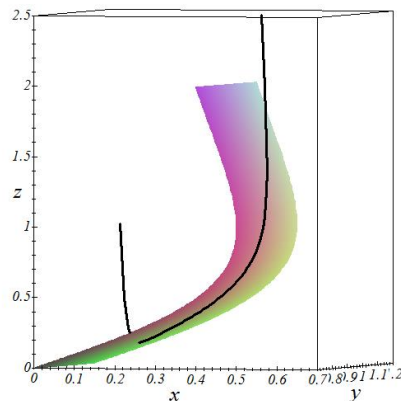


Рисунок 7. Медленная поверхность и траектория системы (1) для случая $\mu = 0,4$.

Если же выбором значения бифуркационного параметра μ склеить устойчивый и неустойчивый медленные многообразия в некоторой точке кривой срыва, то система (1) будет иметь решение-утку, отвечающее критическому режиму химической реакции. Данный режим будет служить границей между медленными режимами и режимами с самоускорением.

В работах [2, 3] было найдено критическое значение параметра μ^* и асимптотическое представление траектории-утки по степеням малого параметра ε . Так, выражения

$$\mu^* = \mu_0 + \varepsilon\mu_1 + \varepsilon^2\mu_2 + \dots, \quad \mu_0 = \frac{1}{\frac{5}{2} + \psi_0\left(\frac{1}{2}\right)},$$

$$\mu_1 = \frac{1}{\frac{5}{2} + \psi_0\left(\frac{1}{2}\right)} \left(\varphi_1\left(\frac{1}{2}\right) - \frac{1}{8}\varphi_1^2\left(\frac{1}{2}\right) + \mu_0\psi_1\left(\frac{1}{2}\right) \right),$$

$$z = \varphi_0(x) + \varepsilon\varphi_1(x) + \varepsilon^2\varphi_2(x) + \dots, \quad y = \psi_0(x) + \varepsilon\psi_1(x) + \varepsilon^2\psi_2(x) + \dots,$$

$$\varphi_0(x) = \frac{x}{1-x},$$

$$\psi'_0\left(\mu_0\left(\frac{5}{2} + \psi_0\right) - \varphi_0\right) = \varphi_0 - \psi_0, \quad \varphi'_0\left(\mu_0\left(\frac{5}{2} + \psi_0\right) - \varphi_0\right) = \varphi_1(2x\varphi_0 - 1),$$

$$\psi'_1\left(\mu_0\left(\frac{5}{2} + \psi_0\right) - \varphi_0\right) + \psi'_0\left(\mu_1\left(\frac{5}{2} + \psi_0\right) + \mu_0\psi_1 - 2x\varphi_0\varphi_1\right) = \varphi_1 - \psi_1$$

определяют первые приближения μ^* и соответствующей этому значению траектории-утки системы (1) в параметрической форме. Роль параметра в представлении траектории-утки играет фазовая переменная x . Траектория-утка системы (1) после участка движения по устойчивому медленному инвариантному многообразию продолжает непрерывно движение по неустойчивому медленному инвариантному многообразию, см. рисунки 8 и 9.

Была построена инвариантная поверхность со сменой устойчивости, целиком состоящая из траекторий-уток системы, выходящих из разных начальных точек и проходящих через разные точки на кривой срыва (3). Такое построение стало возможным благодаря использованию процедуры склейки во всех точках кривой срыва одновременно. При этом вместо «склеивающего» параметра использовалась «склеивающая» функция

$$\mu = \mu(y, \varepsilon) = \mu_0(y) + \varepsilon\mu_1(y) + \varepsilon^2\mu_2(y) + \dots.$$

Это процедура привела систему (1) к виду

$$\frac{dx}{d\tau} = (1 + 3\varepsilon + o(\varepsilon^2)) - xz^2 - x, \quad \frac{dy}{d\tau} = z - y, \quad \varepsilon \frac{dz}{d\tau} = xz^2 + x - z. \quad (4)$$

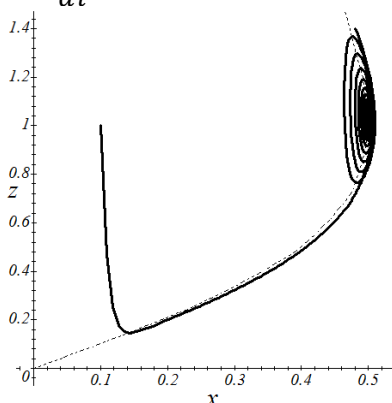


Рисунок 8. Проекция траектории-утки.

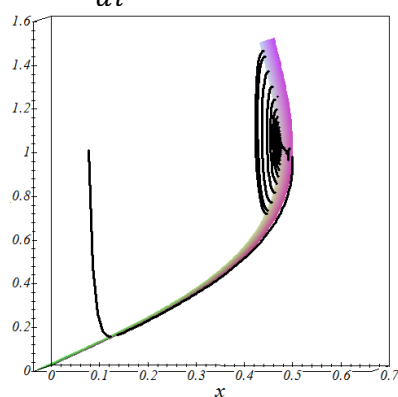


Рисунок 9. Траектория-утка системы (1).

На рисунке 10 представлена траектория системы (4), лежащая на цилиндрической инвариантной поверхности со сменой устойчивости. Каждый виток таких траекторий представляет собой локальную траекторию-утку системы.

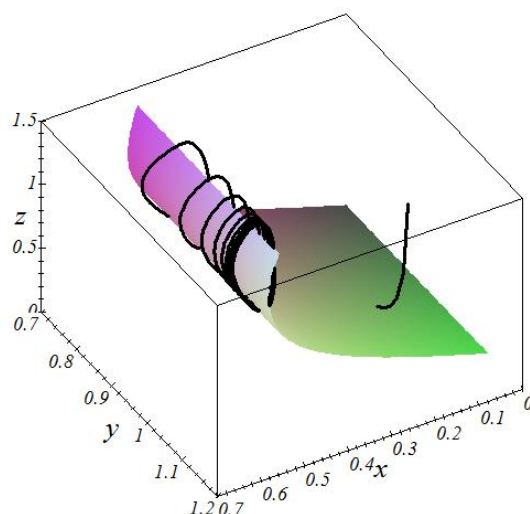


Рисунок 10. Траектории-утки системы (4).

3. Введение

В данной работе исследована зависимость длины участка траектории вдоль неустойчивой части медленной поверхности от начальных данных. Установлено, что чем больше продолжительность движения траектории системы (4) вдоль устойчивой части медленной поверхности, тем существенней затягивание потери устойчивости. Этот результат планируется обобщить для сингулярно возмущенных систем третьего порядка в случае складки медленной поверхности. В работе [6] была получена аналогичная зависимость для некоторого класса сингулярно возмущенных систем на плоскости. Принципиальным отличием является то, что полученный в [6] результат относится к случаю самопересечения медленной кривой.

4. Литература

- [1] Жаботински, А.М. Концентрационные автоколебания – Москва: Наука, 1974. – 179 с.
- [2] Shchepakina, E. Canards and black swans in a model of a 3-D autocatalator // Journal of Physics: Conference Series. – 2005. – Vol. 22(1). – P. 194-207.
- [3] Соболев, В.А. Редукция моделей и критические явления в макрокинетике / В.А. Соболев, Е.А. Щепакина – Москва: Физматлит, 2010. – 319 с.
- [4] Arnold, V.I. Theory of bifurcations / V.I. Arnold, V.S. Afraimovich, Yu.S. Il'yashenko, L.P. Shil'nikov // Dynamical Systems. Vol. 5. Encyclopedia of Mathematical Sciences – Springer: New York, 1994.
- [5] Benoit, E. Chasse au canard / E. Benoit, J.L. Calot, F. Diener, M. Diener // Collectanea Mathematica. – 1981. – Vol. 31-32. – P. 37-119.
- [6] Голодова, Е.С. Оценка затягивания потери устойчивости в дифференциальных системах с траекториями-утками / Е.С. Голодова, Е.А. Щепакина // Вестник Самарского государственного университета. – 2013. – Т. 104, № 3. – С. 12-24.

5. Благодарности

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Правительства Самарской области в рамках научного проекта № 16-41-630529.

Phenomenon of delay of stability loss in a dynamical model of autocatalytic reaction

M.A. Osipchuk¹, E.A. Shchepakina¹

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

Abstract. The work is devoted to the study of the phenomenon of delay of stability loss via a dynamical model of an autocatalytic reaction of the Belousov-Zhabotinsky type.