ИНТЕГРАЛЬНОЕ МНОГООБРАЗИЕ СО СМЕНОЙ УСТОЙЧИВОСТИ В МОДЕЛЯХ ХИМИЧЕСКОЙ КИНЕТИКИ

Т. В.Симонова

Самарский Государственный Университет,
simonovatv@mail.ru

Основным объектом рассмотрения является сингулярно возмущенная система [1,2] обыкновенных дифференциальных уравнений вида: $\dot{x} = f(x, y, z, \varepsilon)$, $\dot{y} = g(x, y, z, \varepsilon)$, $\varepsilon\dot{z} = p(x, y, z, \alpha, \varepsilon)$, где ε - малый положительный параметр, α – скалярный параметр, x – скалярная переменная, y и z – векторные переменные, размерностей n и m+1 соответственно. Под медленной поверхностью такой системы понимается поверхность, описываемая уравнением: $p(x, y, z, \alpha, 0) = 0$. Лист медленной поверхности устойчив, если собственные числа матрицы $\partial p / \partial z(x, y, \varphi(x, y, \alpha), \alpha, 0)$ имеют отрицательные вещественные части. Если хотя бы у одного из собственных чисел этой матрицы вещественная часть становится положительной, то лист теряет устойчивость. Листы медленной поверхности разделяются так называемыми поверхностями срыва, имеющими размерность вектора y, на которых $\det[\partial p / \partial z(x, y, \varphi(x, y, \alpha), \alpha, 0)] = 0$. В ε-окрестности устойчивого и неустойчивого листов медленной поверхности лежат устойчивое и неустойчивое медленные интегральные многообразия. [3,4] Наличие дополнительного скалярного параметра α обеспечивает условия для того, чтобы устойчивое и неустойчивое интегральные многообразия можно было склеить в одной точке поверхности срыва. Однако в том или ином моделируемом процессе возможны возмущения, в результате которых траектория может отклониться от рассчитанной. Таким образом, склеивая устойчивое и неустойчивое медленные интегральные многообразия в одной точке поверхности срыва нельзя гарантировать безопасность процесса. Данную проблему можно решить, если осуществить склейку этих многообразий во всех точках поверхности срыва одновременно при помощи уже не параметра, а склеивающей функции [5]. При внешнем возмущении траектория решения системы уравнений в этом случае просто перейдет с одной траектории на другую, так же описывающую безопасный режим.

В данной работе рассматривается динамическая модель системы пары связанных орегонаторов [6], заданная сингулярно возмущенной системой дифференциальных уравнений шестого порядка:

$$\begin{cases} \mu\varepsilon\dot{y}_1 = 0{,}25 + b_1x_1 - y_1(0{,}5 + z_1) + \mu\varepsilon\alpha(y_2 - y_1); \\ \mu\varepsilon\dot{y}_2 = 0{,}25 + b_2x_2 - y_2(0{,}5 + z_2) + \mu\varepsilon\alpha(y_1 - y_2); \\ \varepsilon\dot{z}_1 = 0{,}25 - z_1^{\,2} - y_1(0{,}5 + z_1) + \varepsilon\alpha(z_2 - z_1); \\ \varepsilon\dot{z}_2 = 0{,}25 - z_2^{\,2} - y_2(0{,}5 + z_2) + \varepsilon\alpha(z_1 - z_2); \\ \dot{x}_1 = 0{,}75 + 2z_1 - b_1x_1 + \alpha(\gamma + x_2 - x_1); \\ \dot{x}_2 = 0{,}75 + 2z_2 - b_2x_2 + \alpha(-\gamma + x_1 - x_2). \end{cases} \tag{1}$$

Здесь x, y, z - концентрации веществ, остальные параметры характеризуют их физические свойства, $\mu \approx 1 \cdot 10^{-2}$, $\varepsilon \approx 1 \cdot 10^{-5}$, $\gamma = 1/(4b_2) - 1/(4b_1)$, $\alpha = \rho k_0 T_0$.

Для системы (1) построено устойчивое интегральное многообразие в виде разложения по степеням μ:

$$y = h(x,z,\alpha,\varepsilon,\mu) = h_0(x,z,\alpha,\varepsilon) + \mu h_1(x,z,\alpha,\varepsilon) + \mu^2 h_2(x,z, \tag{2}$$

Все коэффициенты асимптотического разложения найдены.

$$h_i(x,z,\alpha,\varepsilon) = \begin{pmatrix} \overline{h}_i(x,z,\alpha,\varepsilon) \\ \overline{\overline{h}}_i(x,z,\alpha,\varepsilon) \end{pmatrix},\ \overline{h}_0(x,z,\alpha,\varepsilon,\mu) = \frac{1+4b_1x_1}{2+4z_1},\ \overline{\overline{h}}_0(x,z,\alpha,\varepsilon,\mu) = \frac{1+4b_2x_2}{2+4z_2}.$$

$$\overline{h}_1(x,z,\alpha,\varepsilon,\mu) = \left[\varepsilon\frac{\partial\overline{h}_0}{\partial x_1}\left(\frac{3}{4} + 2z_1 - b_1x_1 + \alpha(\gamma + x_2 - x_1)\right) + \right.$$

$$\left. + \frac{\partial\overline{h}_0}{\partial z_1}\left(\frac{1}{4} - z_1^2 - \left(\frac{1}{2} + z_1\right)\overline{h}_0 + \varepsilon\alpha(z_2 - z_1)\right) - \varepsilon\alpha(\overline{\overline{h}}_0 - \overline{h}_0)\right] \div \left(-\frac{1}{2} - z_1\right),$$

$$\overline{\overline{h}}_1(x,z,\alpha,\varepsilon,\mu) = \left[\varepsilon\frac{\partial\overline{\overline{h}}_0}{\partial x_2}\left(\frac{3}{4} + 2z_2 - b_2x_2 - \alpha(\gamma + x_2 - x_1)\right) + \right.$$

$$\left. + \frac{\partial\overline{\overline{h}}_0}{\partial z_2}\left(\frac{1}{4} - z_2^2 - \left(\frac{1}{2} + z_2\right)\overline{\overline{h}}_0 - \varepsilon\alpha(z_2 - z_1)\right) + \varepsilon\alpha(\overline{\overline{h}}_0 - \overline{h}_0)\right] \div \left(-\frac{1}{2} - z_2\right).$$

Выражения для $h_2(x,z,\alpha,\varepsilon,\mu)$ не приводятся ввиду их громоздкости.

Также построена и склеивающая функция в форме $\alpha^*(z,\varepsilon,\mu) = a_{00}(z,\mu) + \varepsilon a_{10}(z,\mu)$, где

$$a_{00} = \frac{3b_2}{4(b_2\gamma - z_2^2)};$$

$$a_{10} = [b_2(2z_2(b_2^2 z_2 + 3b_1b_2z_2^2 + 6b_2^2z_2^2 + 3b_1b_2z_2^3 + 4b_1^2z_2^4 -$$

$$- 3b_1b_2^2\gamma + 6b_2^3\gamma - 3b_1b_2^2z_2\gamma + 3b_2^3z_2\gamma - 8b_1^2b_2z_2^2\gamma + 4b_1^2b_2^2\gamma^2) +$$

$$+ 9b_2^2\gamma(b_1 + b_2))]/[16b_1z_2(b_2\gamma - z_2^2)^3]$$

Таким образом, рассматривая склеивающую функцию как управляющее воздействие, построен безопасный и наиболее целесообразный с технологической точки зрения режим.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Васильева А.Б., Бутузов В.Ф.* Асимптотические разложения решений сингулярно возмущенных уравнений. М.: Наука, 1973.
2. *Мищенко Е.Ф., Розов Н.Х.* Дифференциальные уравнения с малым параметром и релаксационные колебания. М.: Наука, 1975.
3. *Соболев В.А., Щепакина Е.А.* Интегральные поверхности со сменой устойчивости // Известия РАЕН. Серия МММИУ, 1997, Т.1, N 3, С. 151-175.
4. *Воропаева Н.В., Соболев В.А.* Декомпозиция многотемповых систем. Самара: НВФ «СМС», 2000.
5. *Shchepakina E.A., Sobolev V.A.* Integral manifolds, canards and black swans // Nonlinear. Analys. Theory, Methods, Applications. 2001. V. 44. P. 897-908.
6. *Broens, M. & Bar-Eli, K.,* Canard explosion and excitation in chemical systems. J. Phys. Chem. 95, 1991, 8706–8713.