A Brüsszelátor dinamikája Shaun Ault és Erik Holmgreen dolgozata alapján (March 16, 2003)

Várdainé Kollár Judit

szeminárium
Budapest
2006. november 6.

1. Bevezetés:

Belouszov–Zsabotyinszkij-reakció: Ce(III) és a Ce(IV) keletkezése ciklikus - kálium-bromát és malonsav jelenlétében.
Az alábbi egyenletek megmutatják az egyszerűsített folyamatot:

$$Ce(III) \rightarrow Ce(IV)$$

$$Ce(IV) + CHBr(COOH)_2 \rightarrow Ce(III) + Br^- + otherproducts$$

Mi szükséges ahhoz, hogy egy reakció oszcilláljon?

- A reakció legyen távol az egyensúlytól.
- A reakcióban legyenek autokatalikus lépések.
- A rendszernek legyen legalább két állandósult állapota. (bistabilitás)

Oszcilláló reakciók:

- gyártási folyamatokban

- a szívben az ingerközpont - a szinuszcsomó működését vezérli

- glükolitikus ciklusban előforduló köztes anyagcsere termékek koncentrációja

Az előző előadásokból ismeretes, hogy a kémiai kinetikai egyenletek a következő módon írhatók:

$$A + B \rightarrow C + D$$

$$-[\dot{A}] = -[\dot{B}] = [\dot{C}] = [\dot{D}] = -r_a = k[A][B]$$

Kicsit összetettebb rendszer esetén, vegyük hozzá:

$$2A \rightarrow 3E$$

$$-[\dot{B}] = [\dot{C}] = [\dot{D}] = k[A][B]$$

$$[\dot{A}] = -k_3[A][B] - 2k_6[A]^2$$

$$[\dot{E}] = 3k_6[A]^2$$

2. A Brüsszelátor: (Ilya Prigogine)

$$A \to X$$

$$2X + Y \to 3X$$

$$B + X \to Y + C$$

$$X \to D$$

A Brüsszelátor dinamikája leírható egy kétdimenziós közönséges differenciálegyenlet-rendszerrel:

$$\dot{X} = a + X^2Y - bX - X$$

$$\dot{Y} = bX - X^2Y, \qquad (1)$$

ahol $X(t), Y(t) \in \mathbb{R}$, $\quad a, b > 0$.

3. Dimenziómentes alak

Transzformáció: $t = \tau T, \quad x(t) = \xi X(t), \quad y(t) = \eta Y(t)$
a τ, ξ és η ügyes választásával.

(Dimenziómentes, ha: $\xi = \frac{X(t)}{X^*}$, $\eta = \frac{Y(t)}{Y^*}$)

Transzformálva:

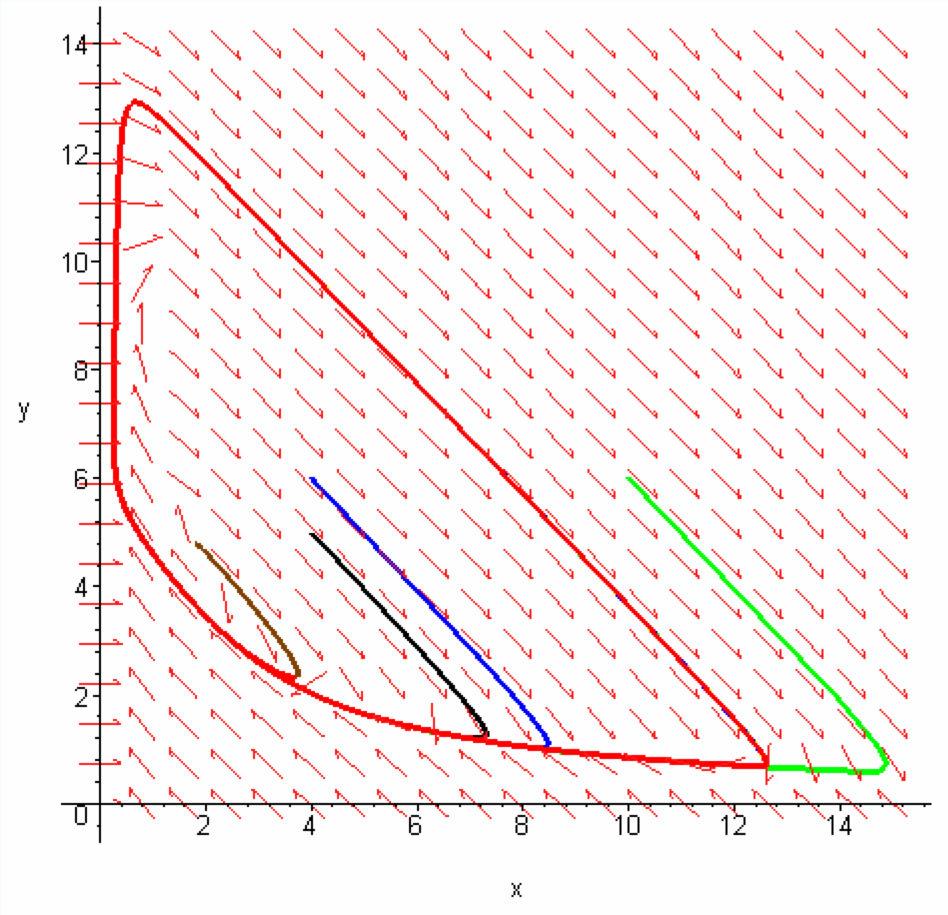
$$\dot{x} = \frac{\xi a}{\tau} + \frac{1}{\tau \xi \eta} x^2 y - \frac{b+1}{\tau} x$$

$$\dot{y} = -\frac{1}{\tau \xi^2} x^2 y + b \frac{\eta}{\tau \xi} x$$

Legyen: $\tau := 1 \quad \xi := \dfrac{1}{a} \quad \eta := 1$ ekkor :

$$\begin{aligned} \dot{x} &= 1 + a x^2 y - (b+1) x \\ \dot{y} &= a(bx - a x^2 y) \end{aligned}$$

Fázisportré:



4. Egyensúly:

A rendszer stacionárius pontjára kapjuk:

$$1 - (b+1)\bar{x} + a\bar{x}^2\bar{y} = 0$$

$$b\bar{x} - a\bar{x}^2\bar{y} = 0,$$

ahonnan: $\bar{x} = 1 \quad \bar{y} = b/a$.

5. Lineáris stabilitási analízis

A rendszer Jacobi-mátrixa:

$$Df(x,y) = \begin{pmatrix} -b-1+2axy & ax^2 \\ a(b-2axy) & -a^2x^2 \end{pmatrix},$$

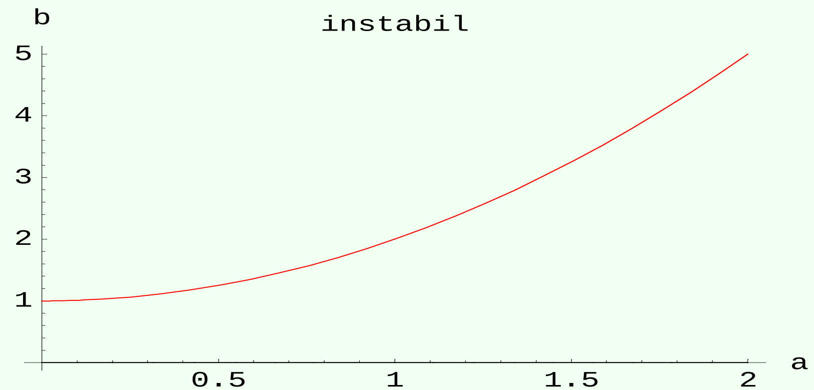
$(\bar{x},\bar{y}) = (1, b/a)$-t behelyettesítve:

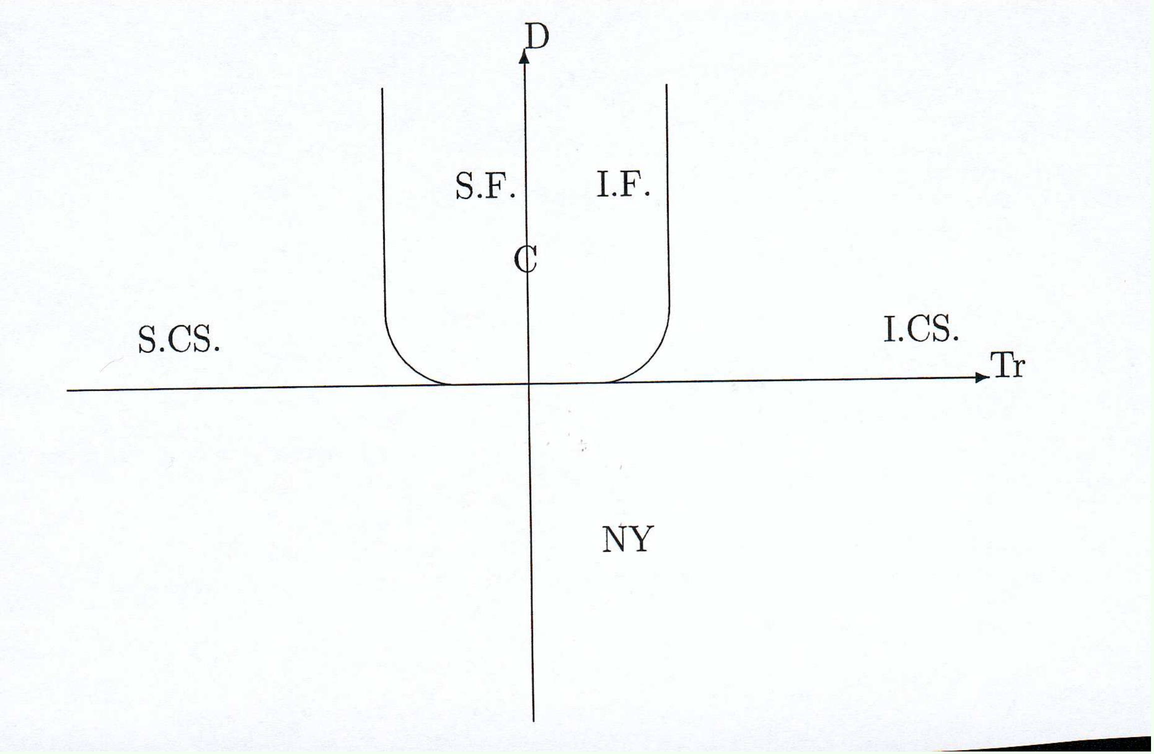
$$Df(1,b/a) = \begin{pmatrix} b-1 & a \\ -ab & -a^2 \end{pmatrix}.$$

Vizsgálva a stabilitást, kapjuk a nyomra és a determinánsra:

$$\tau = \mathrm{Trace}(Df(1,b/a)) = b - a^2 - 1$$

$$\Delta = \mathrm{Det}(Df(1,b/a)) = a^2$$


b
instabil
5
4
3
2
1
0.5
1
1.5
2
a


D
S.F.
I.F.
C
S.CS.
I.CS.
Tr
NY

$$a > 0 \Longrightarrow \Delta > 0 \to (\bar{x}, \bar{y}) \text{ nem nyeregpont}$$

$$\Delta > 0 \text{ és } b < a^2 + 1, \text{ akkor } \tau < 0; \text{ attraktor}$$

$$\Delta > 0 \text{ és } b = a^2 + 1 \Longrightarrow \text{Hopf-bifurkáció}$$

$$\Delta > 0 \text{ és } b > a^2 + 1, \text{ akkor } \tau > 0; \text{repellor}$$

6. A Hopf-bifurkáció megjelenése

A Jacobi mátrix sajátértékei a $\lambda^2 - \lambda(b-1-a^2) + a^2 = 0$ egyenletből kapjuk.
$b_c = a^2 + 1$ esetén a sajátértékek tiszta képzetesek:
1.

$$\lambda_{1,2}(b) = \pm ia$$

2. $\tau = b - a^2 - 1 \quad (b_c = a^2 + 1 \Longrightarrow \tau = 0) \quad \Delta = a^2 \Longrightarrow \tau^2 - 4\Delta < 0.$

$$Re(\lambda(b)) = \frac{1}{2}\tau \text{ tehát } \left.\frac{\partial Re(\lambda_{1,2}(b))}{\partial b}\right|_{b=b_c} = \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial b}[b - a^2 - 1] = \frac{1}{2} \neq 0$$

7. $b_c = a^2 + 1$ közeli periódus

$$\lambda = \frac{1}{2}(\tau \pm \sqrt{\tau^2 - 4\Delta})$$

Ha $b = b_c$, akkor τ eltűnik, így

$$\lambda_c = \pm i\sqrt{\Delta}$$

$\Delta = a^2$-ből:

$$\Im(\lambda_c) = a$$

és a közelítés periódusa: $2\pi/a$.

8. Nullavonalak:

$\dot{x} = 0$ kijelölésével az $\dot{x}$ nullavonalára kapjuk:

$$1 - (b+1)x + ax^2y = 0 \quad \Longleftrightarrow \quad y = \frac{(b+1)x - 1}{ax^2}$$

$\dot{y} = 0$ kijelölésével az $\dot{y}$ nullavonalra kapjuk:

$$bx - ax^2y = 0 \rightarrow \quad x(b - axy) = 0 \Longrightarrow x = 0 \quad \text{vagy:} \quad y = \frac{b}{ax}$$

(A második esetben a nullavonalon $x = 0$ nem lehetséges.)

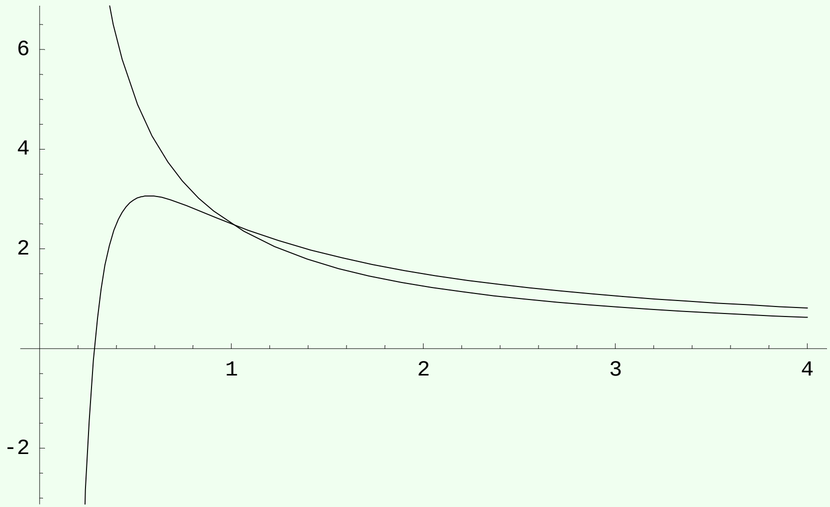
In[21]:= a := 1

b := 2.5

$$y := \frac{(b+1)\,x - 1}{a\,x^2}$$

$$z := \frac{b}{a\,x}$$

```
Plot[{y, z}, {x, 0.1, 4}]
```



Out[25]= - Graphics -

9. Bendixson-zsák

Hol metszi az x tengelyt az $\dot{x}$ nullavonal?

$$1 - (b+1)x + 0 = 0 \quad \Longrightarrow x = \frac{1}{b+1}$$

Az $y = \frac{b}{ax}$ nullavonal és az $x = \frac{1}{b+1}$ metszéspontja adja:

$$y = \frac{b(b+1)}{a}$$

Megkonstruáljuk az "l" egyenest:

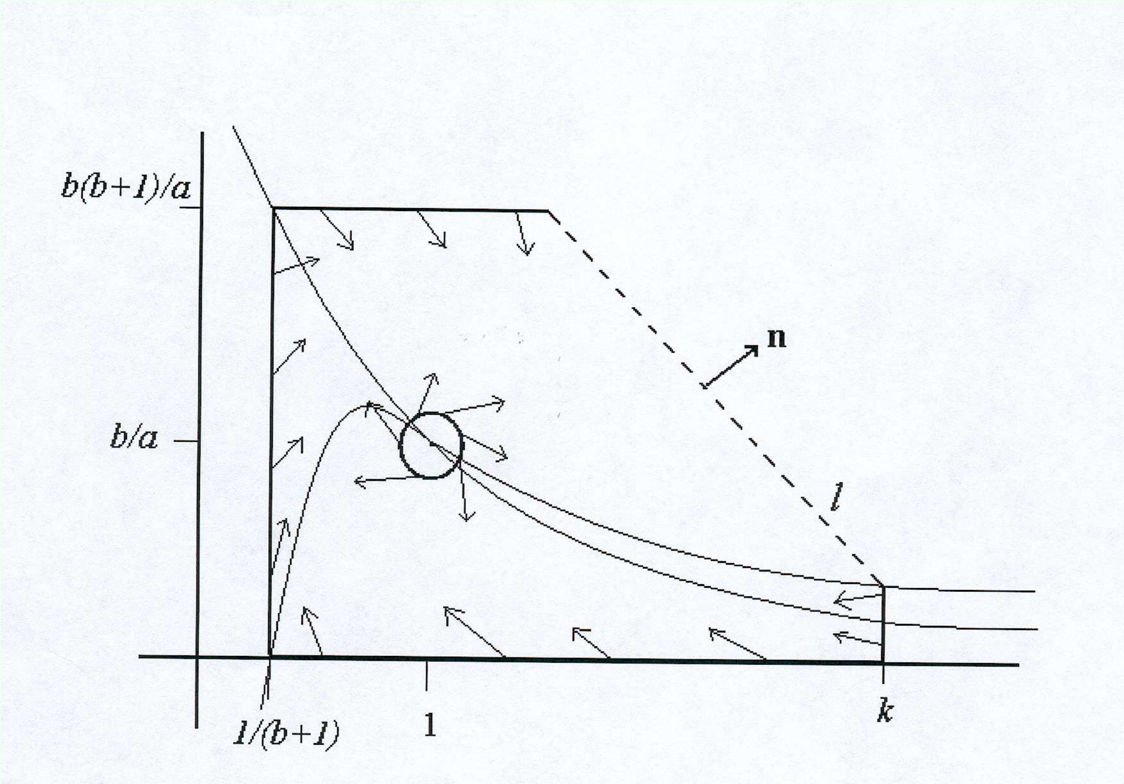
$$(c_1, c_2) \cdot (\dot{x}, \dot{y}) < 0$$

$c_1 = c_2 = 1$-t választva, elvégezzük a skalárszorzást, kapjuk:

$$1 - (b+1)x + ax^2y + abx - a^2x^2y < 0$$

Ábrázolás után:

$$x > 1$$



b(b+1)/a
b/a
n
l
1/(b+1)
1
k

Köszönöm a figyelmet!

Várdai Judit vardai.judit@ymmfk.szie.hu