Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова
Факультет вычислительной математики и кибернетики
Кафедра математической физики

Цыбров Евгений Германович

601 группа

Отчет по практическому заданию №2 на тему:

Построение параметрического портрета системы. Нахождение областей множественности стационарных состояний и автоколебаний.

Москва 2018

Постановка задачи

Рассматривается автокаталитическая химическая реакция, в которой вещество Y адсорбируется на поверхность катализатора и десорбируется с поверхности с буферной стадией в зависимости от наличия свободных мест. Кинетическая схема реакции имеет вид:

$$1)\ X + * \Leftrightarrow_{k_{-1}}^{k_{+1}} [X] \quad 2)\ [X] + 2* \rightarrow^{k_2} 3* + X \quad 3)\ [X] + * \Leftrightarrow_{k_{-3}}^{k_{+3}} [Y]$$

Математическая модель, соответствующая данной реакции:

$$\frac{\mathrm{d}x}{dt} = k_1 z - k_{-1}x - k_3 xz + k_{-3}y - k_2 z^2 x,$$

$$\frac{dy}{dt} = k_3 xz - k_{-3}y,$$

$$z = 1 - x - 2y - \text{концентрация свободных мест},$$

$$0 \le x \le 1, 0 \le y \le 1, 0 \le x + 2y \le 1,$$

$$k_1 = 0.12, k_{-1} = 0.01, k_2 = 0.95, k_3 = 0.0032, k_{-3} = 0.002.$$

Однопараметрический анализ по k_1

Стационарные состояния удовлетворяют системе уравнений:

$$k_1 z - k_{-1}x - k_3 xz + k_{-3}y - k_2 z^2 x = 0,$$

$$k_3 xz - k_{-3}y = 0,$$

Из второго уравнения выражаем переменную y

$$y = \frac{k_3 x(1-x)}{k_{-3} + 2xk_3}$$

и подставим в первое уравнение. Из получившегося уравнения выразим k_1 через остальные параметры и переменную y:

$$k_1 = \frac{k_{-1}x + k_3 x(1 - x - 2y) - k_{-3}y + k_2 x(1 - x - 2y)^2}{1 - x - 2y}$$

В пределах заданного диапазона изменения переменной x находим соответствующие значения y и k_1. Затем найдем элементы матрицы Якоби, её след и её определитель:

$$a_{11} = -k_1 - k_{-1} - k_3(1 - 2y - 2x) - k_2(1 - x - 2y)^2 + 2k_2 x(1 - x - 2y)$$

$$a_{12} = -2k_1 + 2k_3x + k_{-3} + 4k_2x(1 - x - 2y)$$

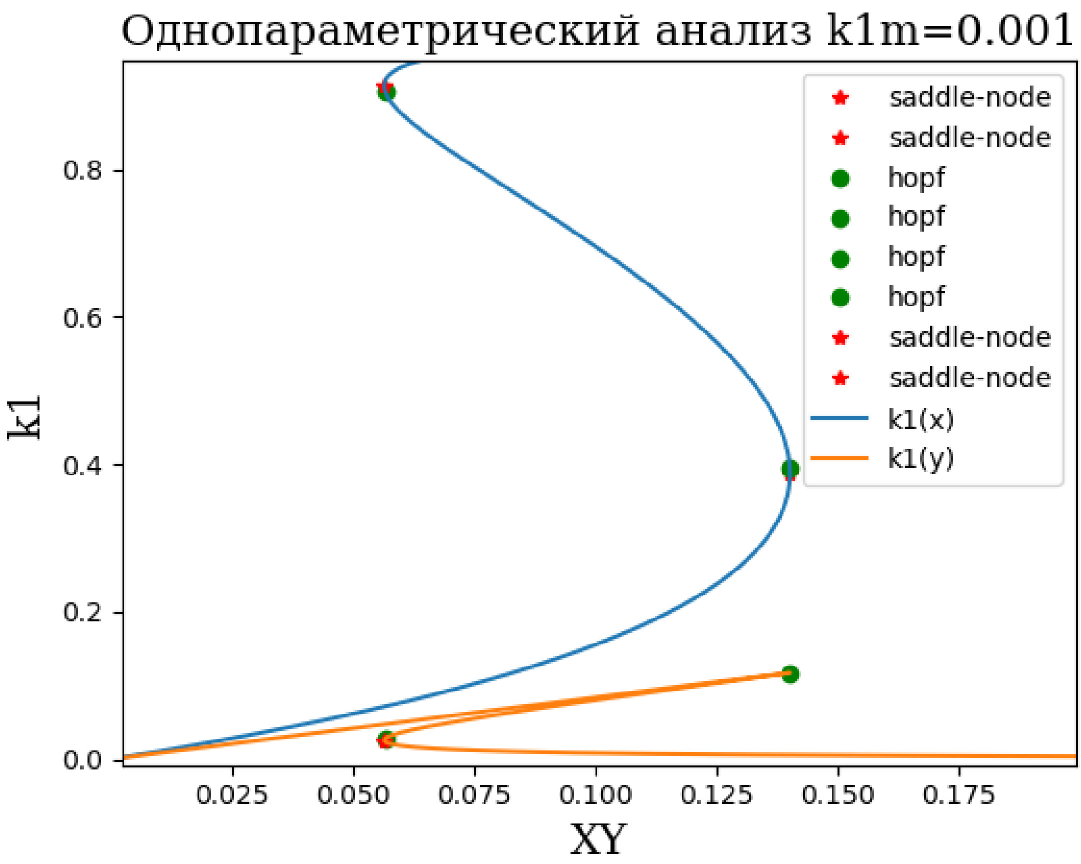
$$a_{21} = k_3(1 - 2y - 2x)$$

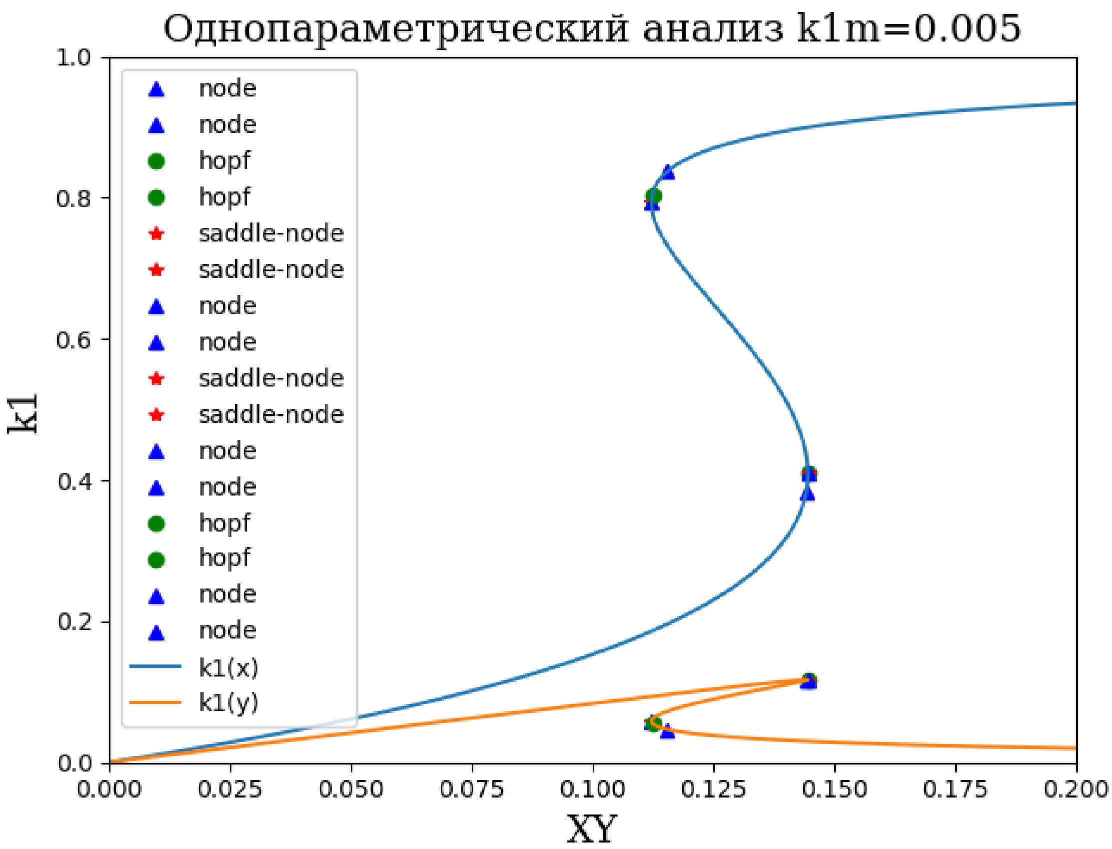
$$a_{22} = -2k_3x - k_{-3}$$

$$\Delta A = a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}$$

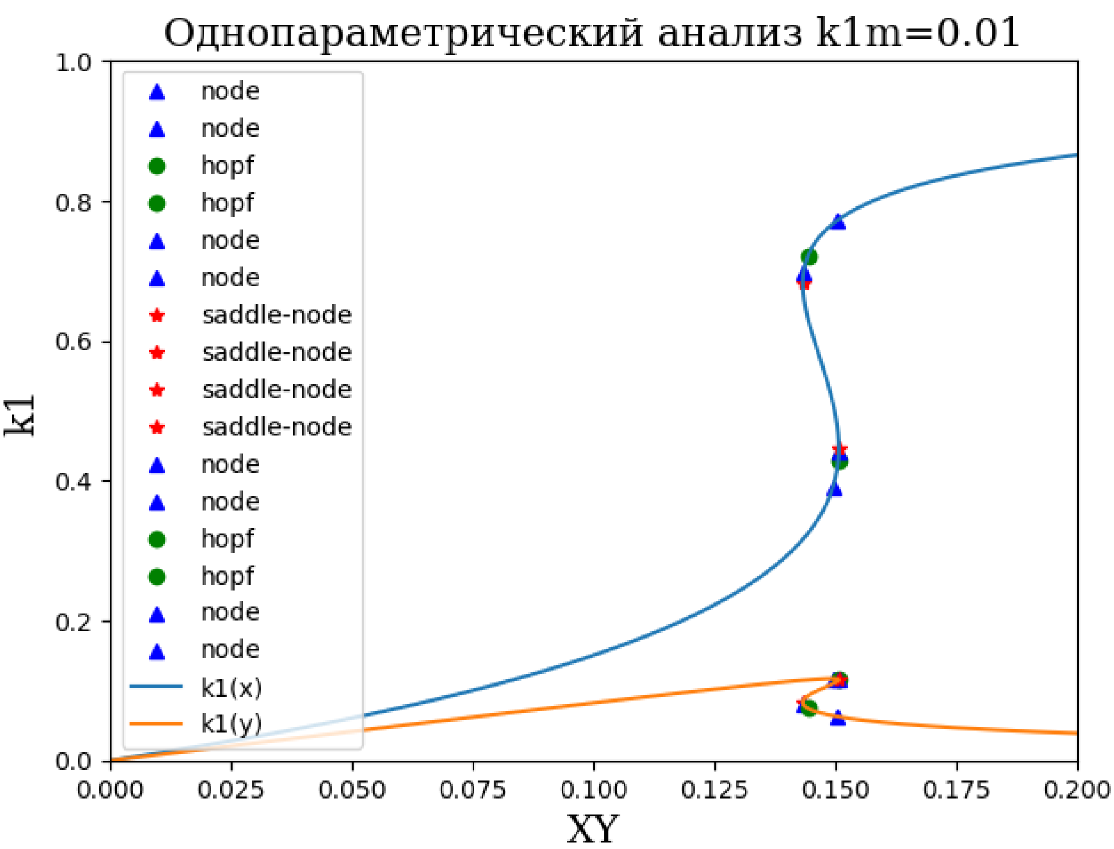
$$S_A = a_{11} + a_{22}$$

Затем находим точки бифуркации с помощью определения изменения знака Якобиана. Задании необходимо провести однопараметрический анализ для нескольких значений параметра $k_{-1} = \{0{,}001; 0{,}005; 0{,}01; 0{,}015; 0{,}02\}$ и $k_{-3} = \{0{,}0005; 0{,}001; 0{,}002; 0{,}003; 0{,}004\}$. Приведем соответствующие результаты.

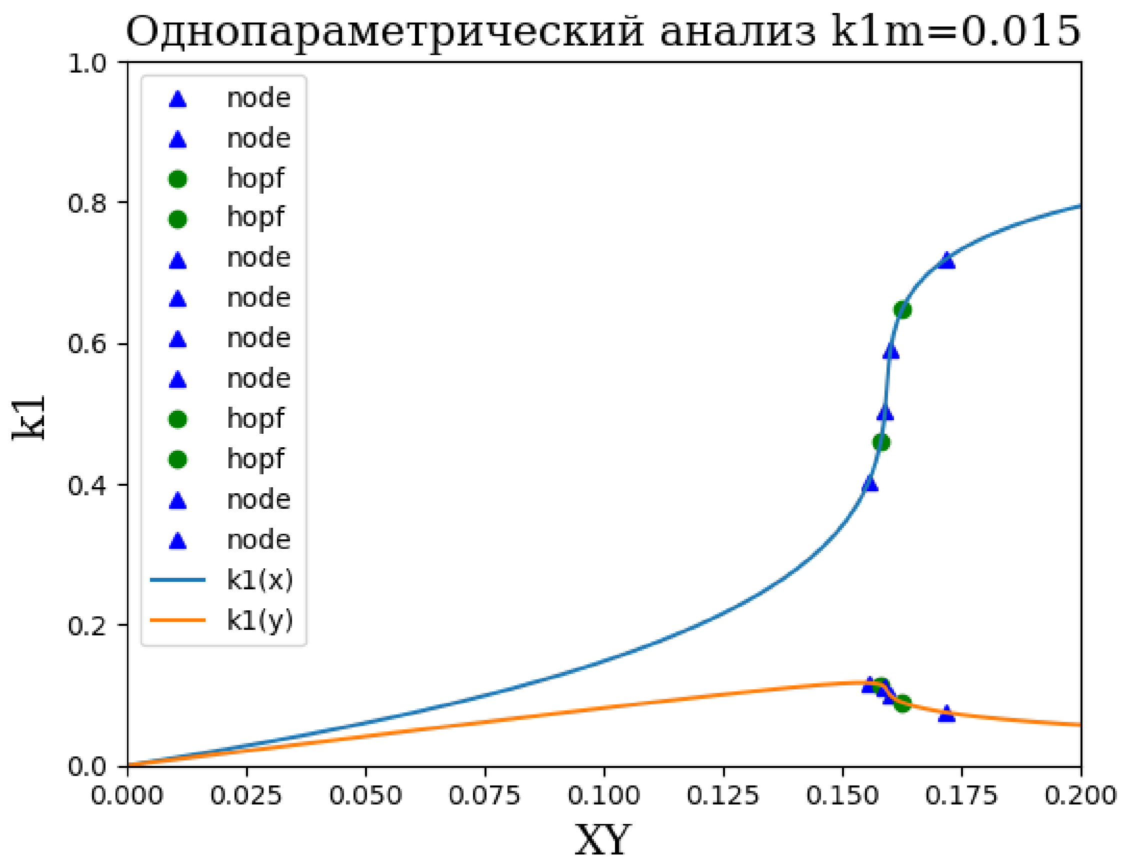


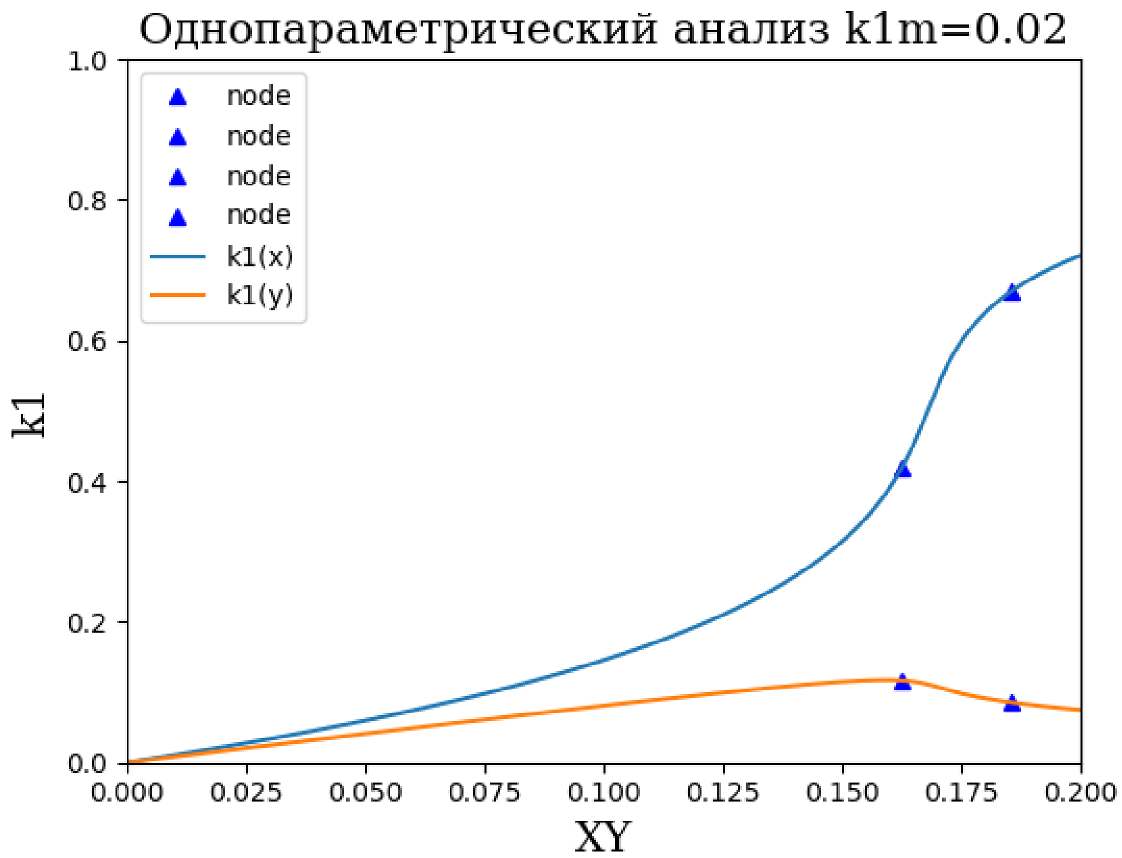


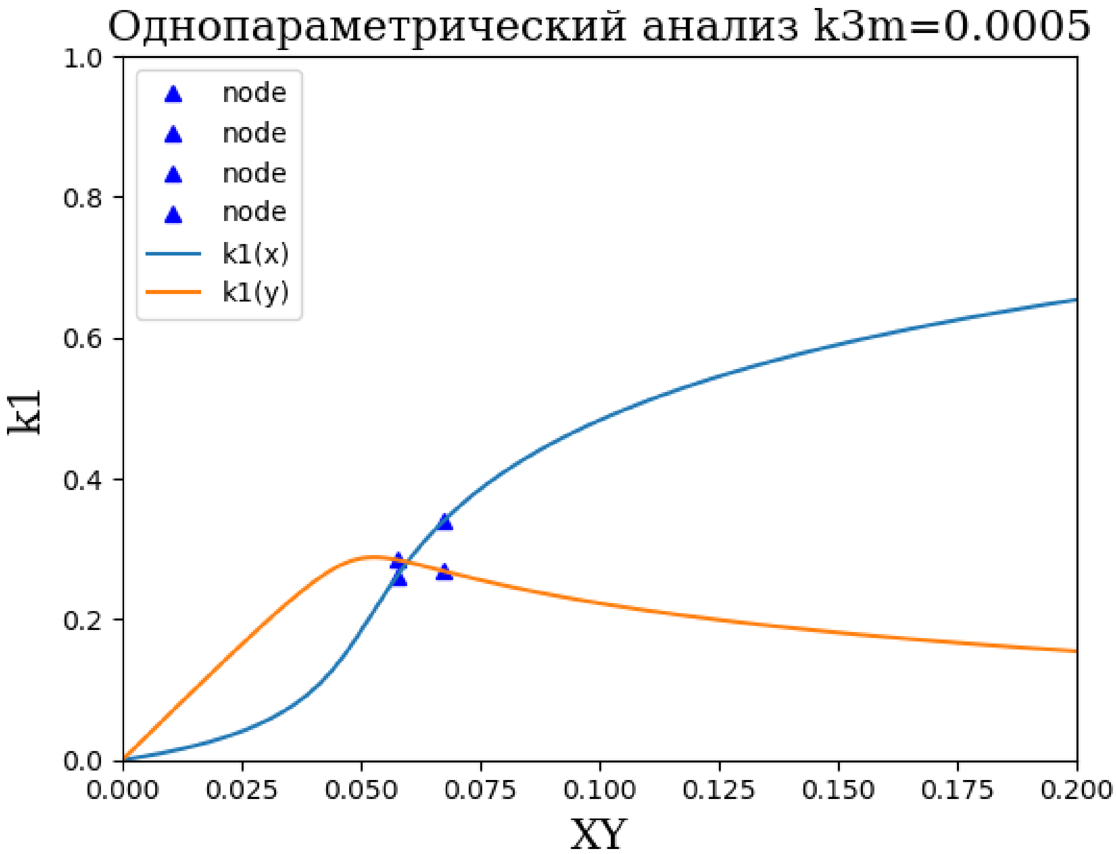
Однопараметрический анализ k1m=0.005
k1
XY
1.0
0.8
0.6
0.4
0.2
0.0
0.000
0.025
0.050
0.075
0.100
0.125
0.150
0.175
0.200
node
node
hopf
hopf
saddle-node
saddle-node
node
node
saddle-node
saddle-node
node
node
hopf
hopf
node
node
k1(x)
k1(y)

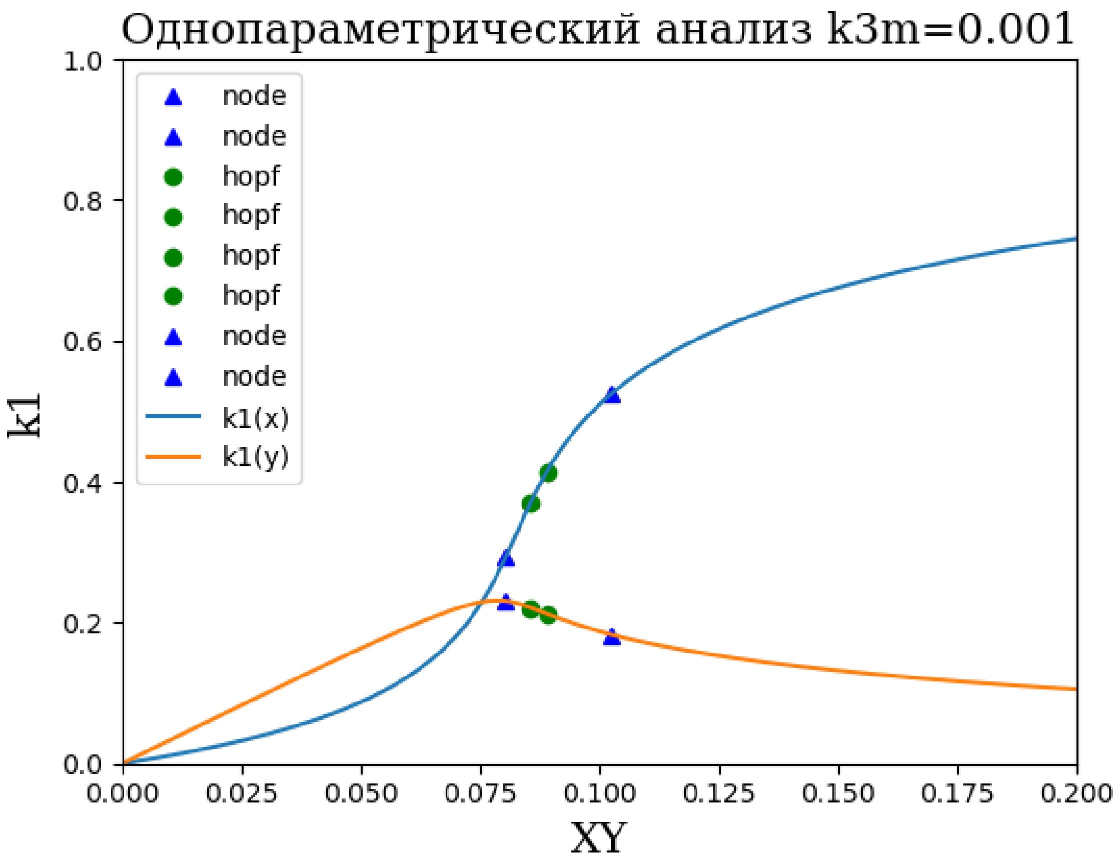


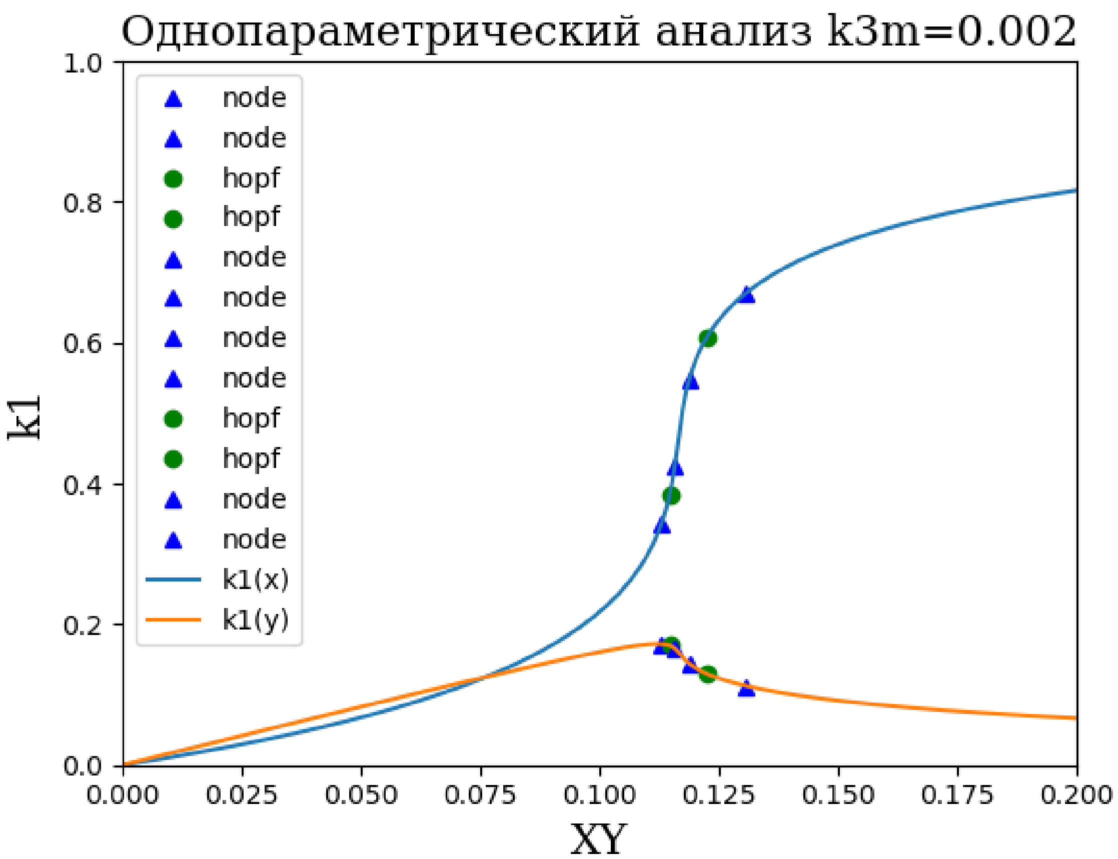
Однопараметрический анализ k1m=0.01
k1
XY
1.0
0.8
0.6
0.4
0.2
0.0
0.000
0.025
0.050
0.075
0.100
0.125
0.150
0.175
0.200
node
node
hopf
hopf
node
node
saddle-node
saddle-node
saddle-node
saddle-node
node
node
hopf
hopf
node
node
k1(x)
k1(y)

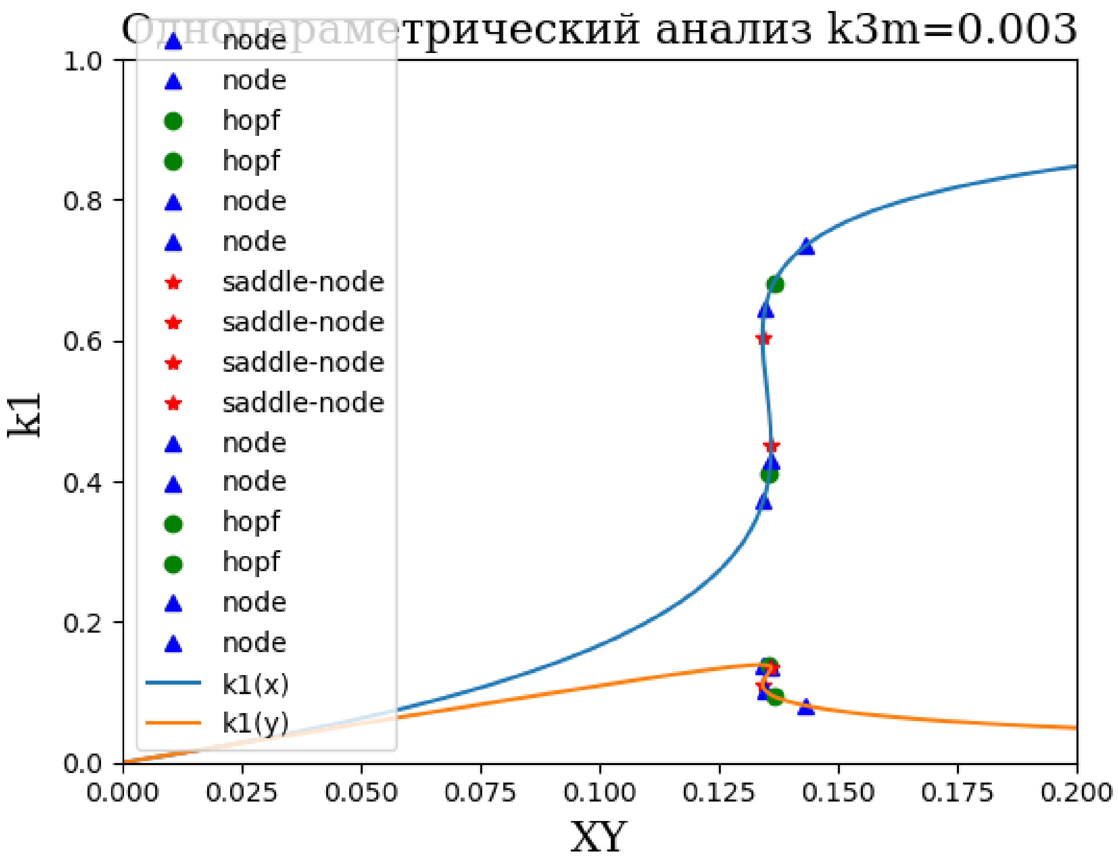

Однопараметрический анализ k1m=0.015
node
node
hopf
hopf
node
node
node
node
hopf
hopf
node
node
k1(x)
k1(y)
k1
XY
0.0
0.2
0.4
0.6
0.8
1.0
0.000
0.025
0.050
0.075
0.100
0.125
0.150
0.175
0.200

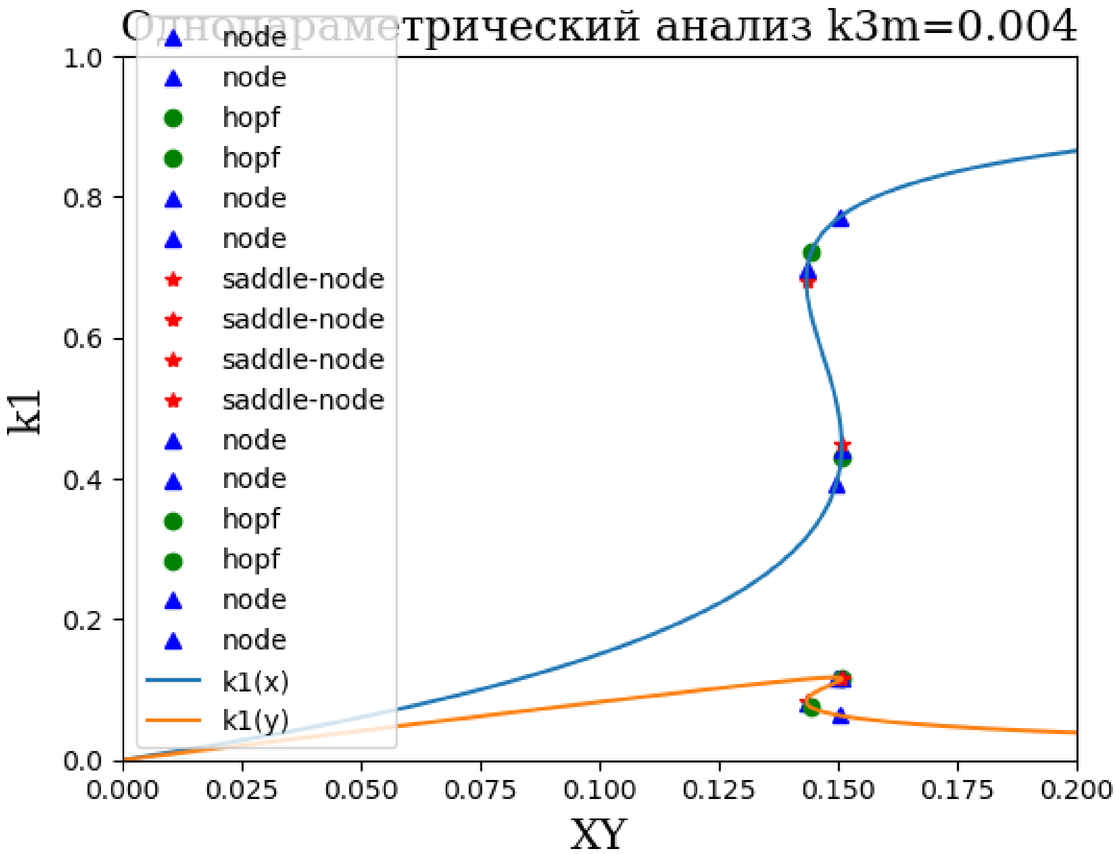

Однопараметрический анализ k1m=0.02
node
node
node
node
k1(x)
k1(y)
k1
XY
0.0
0.2
0.4
0.6
0.8
1.0
0.000
0.025
0.050
0.075
0.100
0.125
0.150
0.175
0.200


Однопараметрический анализ k3m=0.0005
node
node
node
node
k1(x)
k1(y)
k1
XY
0.0
0.2
0.4
0.6
0.8
1.0
0.000
0.025
0.050
0.075
0.100
0.125
0.150
0.175
0.200


Однопараметрический анализ k3m=0.001
node
node
hopf
hopf
hopf
hopf
node
node
k1(x)
k1(y)
k1
XY
0.0
0.2
0.4
0.6
0.8
1.0
0.000
0.025
0.050
0.075
0.100
0.125
0.150
0.175
0.200

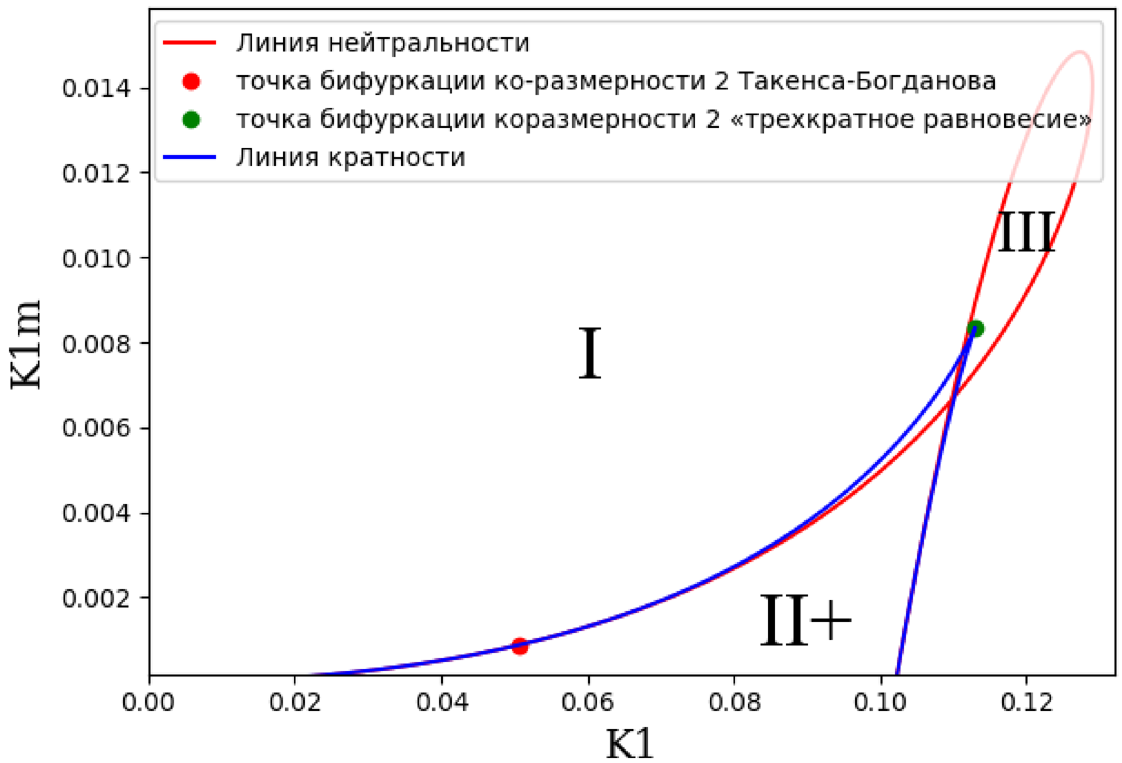

Однопараметрический анализ k3m=0.002
node
node
hopf
hopf
node
node
node
node
hopf
hopf
node
node
k1(x)
k1(y)
k1
XY
0.0
0.2
0.4
0.6
0.8
1.0
0.000
0.025
0.050
0.075
0.100
0.125
0.150
0.175
0.200


Однопараметрический анализ k3m=0.003
node
node
hopf
hopf
node
node
saddle-node
saddle-node
saddle-node
saddle-node
node
node
hopf
hopf
node
node
k1(x)
k1(y)
k1
XY
0.0
0.2
0.4
0.6
0.8
1.0
0.000
0.025
0.050
0.075
0.100
0.125
0.150
0.175
0.200

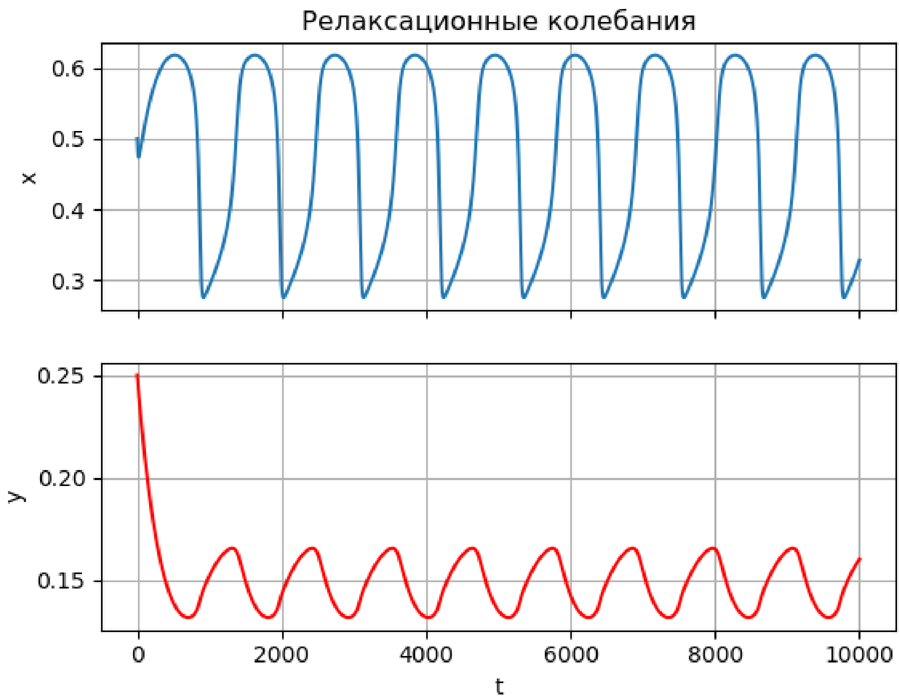

Однопараметрический анализ k3m=0.004
k1
XY
1.0
0.8
0.6
0.4
0.2
0.0
0.000
0.025
0.050
0.075
0.100
0.125
0.150
0.175
0.200
node
node
hopf
hopf
node
node
saddle-node
saddle-node
saddle-node
saddle-node
node
node
hopf
hopf
node
node
k1(x)
k1(y)

Двухпараметрический анализ по (k_1, k_{-1})

Для двухпараметрического анализа на плоскости (k_1, k_{-1}) построим линии кратности и нейтральности. Линия кратности получается при вырожденности матрицы Якоби, а линия нейтральности- при равенстве нулю следа матрицы Якоби.



Автоколебания система имеет в области III (внутри петли), где существует единственное неустойчивой стационарное состояние. В области II+ существует три состояния, одно из них устойчиво.



Фазовый портрет