

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

## Волчинская Татьяна Андреевна 601 группа

Отчет по практическому заданию №1 на тему:

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

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

Математическая модель, соответствующая данной реакции:

$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} = k_1 z - k_{-1} x - k_3 x z + k_{-3} y - k_2 z^2 x,$$
 
$$\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}t} = k_3 x z - k_{-3} y,$$
 
$$z = 1 - x - 2y - \text{концентрация свободных мест,}$$
 
$$0 \le x \le 1, 0 \le y \le 1, 0 \le x + 2y \le 1,$$
 
$$k_1 = 0.12, k_{-1} = 0.01, k_2 = 0.95, k_3 = 0.0032, k_{-3} = 0.002.$$

## Однопараметрический анализ по $k_1$

Стационарные состояния удовлетворяют системе уравнений:

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

Из второго уравнения выражаем переменную у

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

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

$$k_1 = \frac{k_{-1}x + k_3x(1 - x - 2y) - k_{-3}y + k_2x(1 - x - 2y)^2}{1 - x - 2y}$$

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

$$a_{11} = -k_1 - k_{-1} - k_3(1 - 2y - 2x) - k_2(1 - x - 2y)^2 + 2k_2x(1 - x - 2y)$$

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

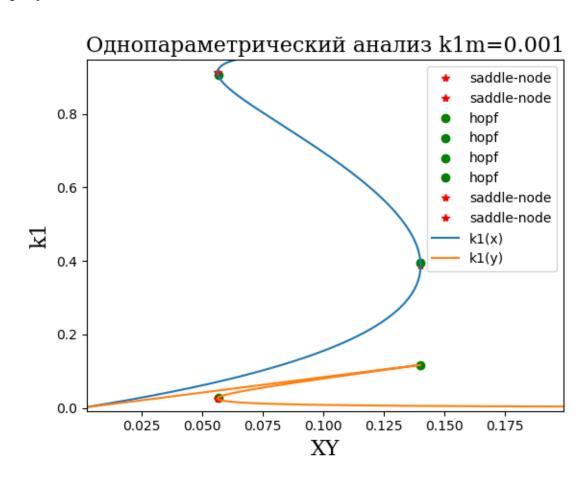
$$a_{21} = k_3(1 - 2y - 2x)$$

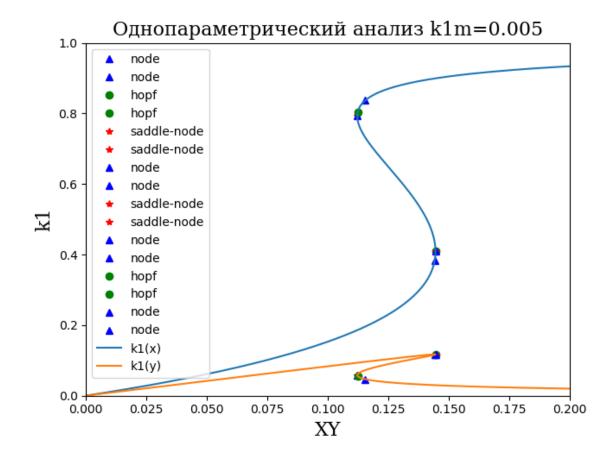
$$a_{22} = -2k_3x - k_{-3}$$

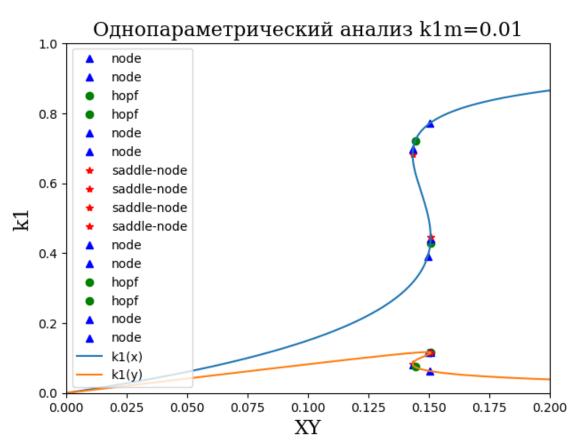
$$\Delta A = a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}$$

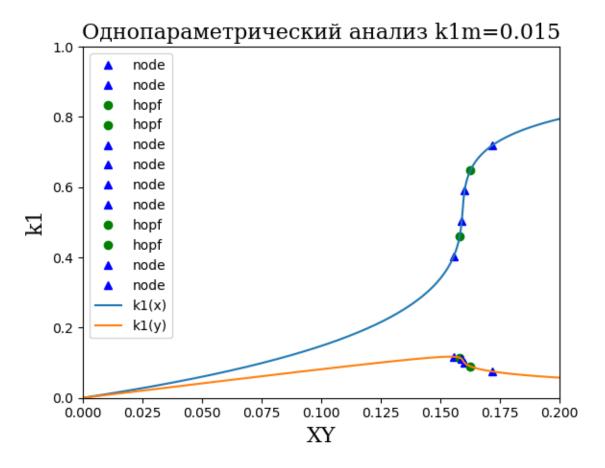
$$S_A = a_{11} + a_{22}$$

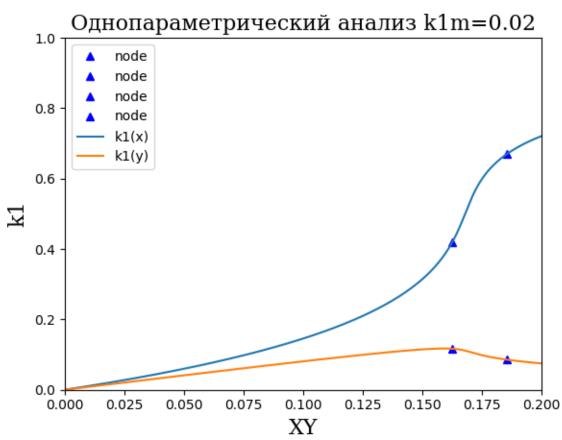
Затем находим точки бифуркации с помощью определения изменения знака Якобиана. В задании необходимо провести однопараметрический анализ для нескольких значений параметра  $k_{-1}=\{0,001;0,005;0,01;0,015;0,02\}$  и  $k_{-3}=\{0,0005;0,001;0,002;0,003;0,004\}$ . Приведем соответствующие результаты.

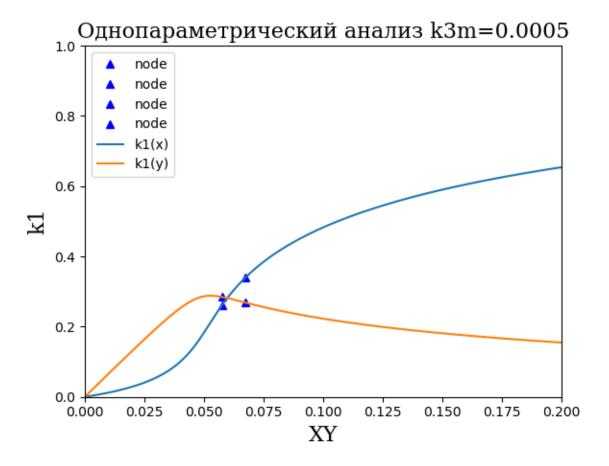


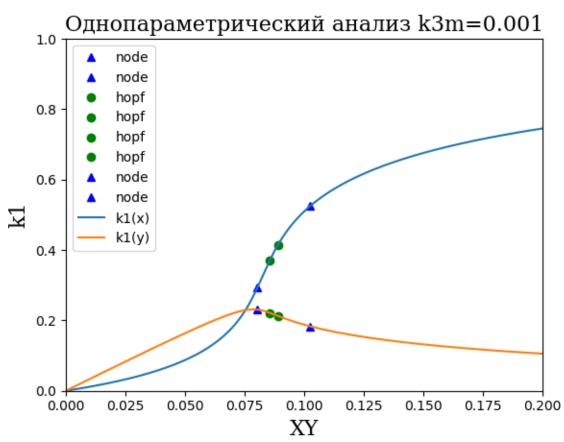


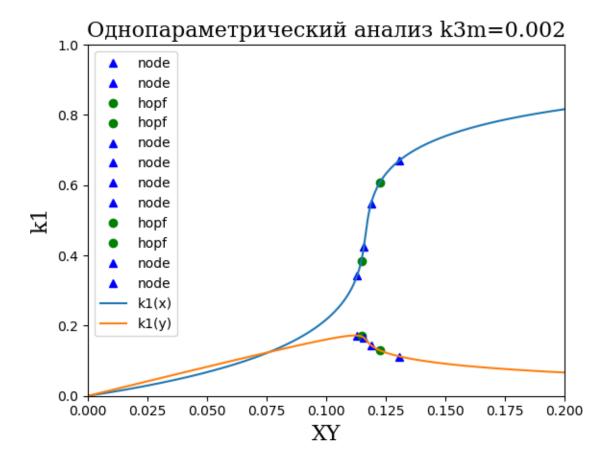


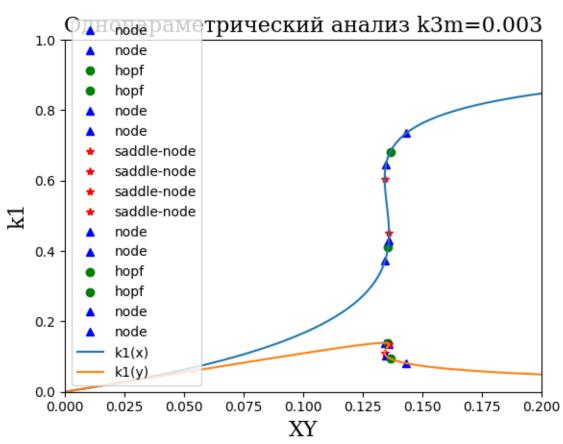


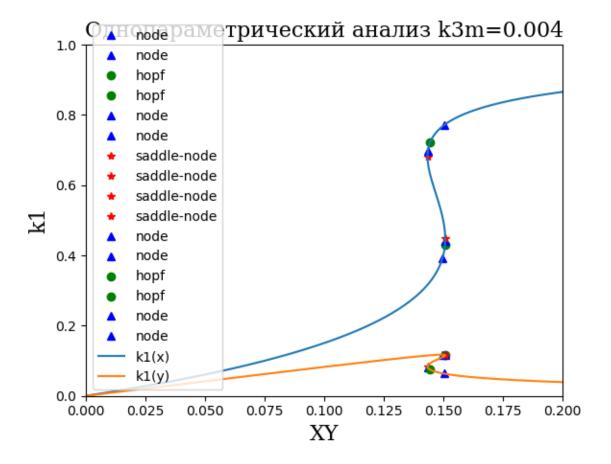






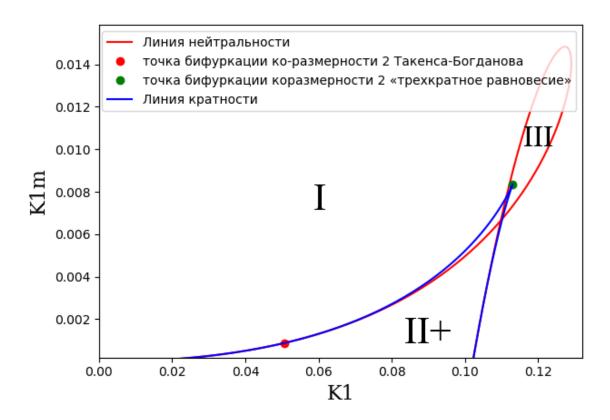




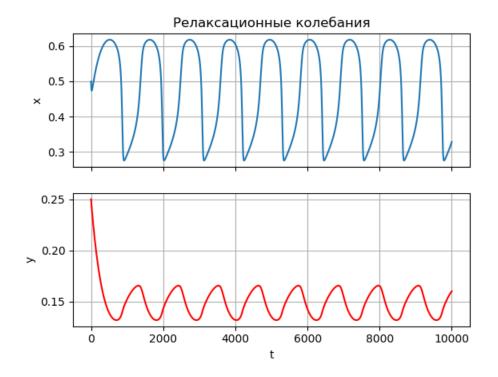


## Двухпараметрический анализ по $(k_1, k_{-1})$

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

