8. DINAMIKAI RENDSZEREK

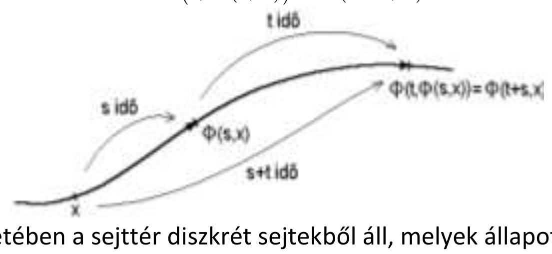
A gyakorlat célja az, hogy egy kétváltozós reakciókinetikai rendszer vizsgálatával a hallgatók megismerjék a dinamikai rendszerek alapfogalmait, elsajátítsák a lineáris stabilitásvizsgálat alapjait, és megismerkedjenek egy olyan programmal, amely kétdimenziós differenciálegyenlet-rendszerek numerikus megoldásával képes a fázissík megrajzolására.

Különböző tudományterületeken – pl. mechanikában, reakciókinetikában, populációbiológiában, meteorológiában – sokféle időben változó folyamatot ún. dinamikai rendszerekkel írnak le. A dinamikai rendszerek[1] olyan determinisztikus modellek, melyekben a rendszer jelenlegi állapota egyértelműen meghatározza annak jövőbeli fejlődését. A rendszerek fejlődését leíró modell lehet időben diszkrét (pl. egymás után következő populációk; sejtautomata modellek[2]) vagy folytonos (pl. kémiai koncentrációk változása). Utóbbi esetben matematikailag differenciálegyenlet-rendszerek felállításával fogalmazzuk meg azt a szabályt, ami a fejlődést leírja. Ezek legtöbbször bonyolult nemlineáris közönséges autonóm differenciálegyenlet-rendszerek, melyek nemlinearitásukból eredően analitikusan legtöbbször nem megoldhatók. Numerikus módszerekkel természetesen előállíthatunk egyes megoldásokat, de mivel ezek rögzített kezdeti értékekhez és paraméterértékekhez tartozó megoldások, ezzel nem kapunk általános képet más kezdeti értékekhez, ill. más paraméterértékekhez tartozó megoldásokról. Nemlineáris differenciálegyenlet-rendszerek esetén pedig a megoldások igen bonyolultak is lehetnek, és jellegük is (pl. monoton-e vagy sem) érzékenyen függhet a differenciálegyenlet-rendszerben foglalt paraméterek értékeitől is. Ebben az áttekintésben segít a **dinamikai rendszerek** – más néven **nemlineáris dinamika** – tudománya, amely azt vizsgálja, hogy különböző paramétertartományokban milyen típusú megoldások lépnek fel, milyen ezek stabilitása, és a paraméterek változtatásával ezek hogyan alakulnak át egymásba.

A dinamikai rendszerek elméletében alapvető fogalom az állapottér, fázistér fogalma. A **fázistér** a rendszert meghatározó független állapotváltozók (fázisváltozók) által kifeszített tér, amely pl. egy térben mozgó tömegpont esetében hat dimenziós (három hely- és három sebességkoordináta); adott mennyiségű ideális gáz esetén két dimenziós (pl. a p–V sík); reakciókinetikában a reakcióban résztvevő kémiai komponensek koncentrációit megadó (tehát a komponensek számával megegyező dimenziós) tér. A fázistérben a rendszer adott időpontbeli állapota (fázisa) egyetlen ponttal (egy vektorral) adható meg. Az idő változásával a fázispont egy görbe – az ún. **trajektória** – mentén mozog, a rendszer állapota az időben előre-hátra egyértelműen követhető a fázistérben. (A fázistér maga nem tartalmazza az időt.) A fázistér használatának az a nagy előnye, hogy azon több kiindulási állapotnak megfelelő folyamatot is ábrázolhatunk együtt, és

---

[1] A matematikai definíció szerint dinamikai rendszernek nevezik a $\Phi : \mathrm{R} \times \mathrm{M} \rightarrow \mathrm{M}$ leképezést, ami megadja, hogy az x_0 kezdeti állapot t idő múlva mely x állapotba megy át, vagyis $(t,x_0) \mapsto x$, ha
- a leképezés folytonosan differenciálható;
- rögzített t-re a leképezés kölcsönösen egyértelmű és az inverz is folytonosan differenciálható;
- a leképezés csoporttulajdonsággal bír, azaz $\Phi\left(t,\Phi\left(s,x\right)\right) = \Phi\left(t+s,x\right)$:



[2] A sejtautomata modellek esetében a sejttér diszkrét sejtekből áll, melyek állapota valamilyen szabály szerint szinkronizáltan változik. Adott szabály esetén a különböző kiindulási állapotok határozzák meg a sejttér időbeli fejlődését, vagyis, hogy pl. a sejtek kihalnak-e vagy élni fognak. Bizonyos esetekben hosszú távon kialakulhatnak látványos álló vagy haladó, periodikusan váltakozó mintázatok is.

a paraméterek rögzített értéke esetén egyetlen "képbe" sűríthetjük az összes lehetséges kiindulási állapothoz tartozó megoldást. A fázistérbe sűrített megoldásokat fázisfolyamnak nevezik (flow), amit a **fáziskép, fázisportré** ábrázol.

A fázisportré jellegét meghatározza, hogy a rendszer konzervatív, explozív vagy disszipatív-e.

→ **Konzervatív** rendszer esetében a trajektóriák legtöbbje zárt görbe, mivel ekkor létezik egy megmaradó, "konzerválódó" mennyiség, amely egy-egy trajektória mentén állandó. A megmaradó mennyiség létéből következik, hogy a rendszer viselkedésének jellege hosszú távon nem változik.

→ **Explozív** rendszer fázisterében majdnem minden vagy minden trajektória "elmegy a végtelenbe". Valódi fizikai, kémiai stb. rendszer esetében persze a "robbanás", az explózió valahol megáll, hiszen nem áll rendelkezésre pl. végtelen anyagmennyiség vagy nem érhető el végtelen nagy sebesség.

Modellek lehetnek explozívak vagy konzervatívak, de a valóságban szigorú értelemben véve minden rendszer

→ **disszipatív**: ezek fázisterében mindig van egy vagy több halmaz – ún. **attraktor** –, amely "vonzza" a trajektóriákat. (A fázistér kevés számú pontját kivéve) tetszőlegesen választott pontból kiindulva a rendszer egy átmeneti, tranziens szakasz után előbb-utóbb valamelyik attraktorba jut és azontúl ott marad, a viselkedése állandósul. Az állandósult viselkedés jellegét az attraktor típusa határozza meg. A legfontosabb attraktortípusok a pont-, a periodikus és a kaotikus attraktorok.

A **pontattraktor** a fázistérnek olyan pontja, amelyet elérve a fázispont tovább már nem mozog, a változók értékei állandósulnak (**egyensúlyi pont**, vagy **stabil stacionárius pont**).

A **periodikus attraktor** egy zárt görbe a fázistérben, amelyen a fázispont minden periódusban körbejár, a változók értékei egyszerű vagy összetett szabályos oszcillációkat végeznek (**stabil határciklus**).

Kaotikus (más néven különös) **attraktor** a fázistérnek olyan részhalmaza, amelyen belül a mozgás nem ismétli önmagát, "kaotikus". A változók időbeli fejlődése szabálytalan görbét ír le, amely hasonlíthat ugyan oszcillációra, de nem jelölhető ki rajta egy pontosan ismétlődő szakasz. A fázistérben a nagyon közeli pontokból (közeli kiindulási állapotokból) induló trajektóriák egymástól exponenciálisan távolodhatnak, így bármilyen közel is veszünk fel két kiindulópontot, azok nem maradnak egymás közelében (de mindkettő az attraktoron belül marad). Ugyanakkor ez a kaotikus viselkedés determinisztikus: azonos kiindulási állapotból indulva mindig azonos megoldást kapunk. Kísérleteknél azonban a kiindulási pontok, ill. a paraméterek értékeinek tökéletes egyenlősége nem biztosítható, így más lesz a megoldás. Kaotikus attraktor csak akkor fordulhat elő, ha a fázistér legalább három dimenziós.

Ha a rendszert kitérítjük addigi állapotából, kimozdítjuk az attraktorból, visszatér oda, mert az attraktorok **stabilisak**, vonzzák a trajektóriákat. Előfordul azonban az is, hogy egy rendszernek több attraktora van egyszerre; ekkor mindegyik attraktornak megvan a saját vonzási medencéje a fázistérben.

Az attraktorok száma és típusa egy adott dinamikai rendszernél függhet a rendszerben szereplő **paraméterek** értékeitől is. A paraméterek értékének változtatásakor az attraktorok számában és/vagy típusában bekövetkező változást **bifurkációnak** nevezik. A kritikus bifurkációs paraméterértéket átlépve a rendszer viselkedése hirtelen jellegében megváltozik (pl. pontattraktor helyett periodikus attraktor jön létre, amivel az addigi állandósult állapotot oszcilláció váltja fel).

A fázistér egy pontján csak egy trajektória mehet át a dinamikai rendszerek determinisztikussága miatt. Ennek megfelelően a fázisportré körülbelüli szemléltetésére alkalmas az ún. **iránymező** is: a fázistérben bizonyos sűrűséggel felvett pontokba a deriváltakkal megadott kis vektorokat rajzolhatunk, amelyek a trajektóriáknak érintői; ezek mutatják, hogy az adott pontból merre fejlődik tovább a rendszer.

A dinamikai rendszerek alapfogalmainak megismerése után a továbbiakban **autonóm differenciálegyenlet-rendszerekkel** megadható dinamikai rendszerekről lesz szó:

$\dot{\underline{x}} = \underline{f}(\underline{x})$, ahol $\underline{x} \in R^n$ (a pont az idő szerinti differenciálást jelöli).

Az autonóm azt jelenti, hogy a jobboldal az időtől expliciten nem függ.

A differenciálegyenlet-rendszer megoldásgörbéinek jellegéről (pl. arról, hány pontattraktora van a rendszernek, van-e másféle attraktora is, mekkora az egyes attraktorok vonzási tartománya, vannak-e végtelenbe menő megoldások,...) nyerhetünk információkat maguknak a megoldásoknak az ismerete nélkül is (**differenciálegyenletek kvalitatív elmélete**).

A differenciálegyenlet-rendszer vizsgálatának lépései:

1. Az **egyensúlyi**, illetve **stacionárius pontok** meghatározása az $\underline{f}(\underline{x}) = \underline{0}$ algebrai egyenletrendszer megoldásával. Mivel ezekben a pontokban $\dot{\underline{x}} = \underline{0}$, ezért ezeket a pontokat kiindulási pontként választva a rendszer "örökké" abban a pontban marad. Ha viszont kis zavarás, perturbáció kicsit kimozdítja a rendszert abból a pontból, akkor a rendszer vagy visszatér oda – ekkor a stacionárius pont stabilis (pontattraktor), vagy nem – ekkor a stacionárius pont nem stabilis.
2. A stacionárius pontok **stabilitásának vizsgálata**, amit a továbbiakban részletezünk.

Nemlineáris rendszerek stacionárius pontjainak stabilitásvizsgálatát a lineáris rendszerekére vezethetjük vissza, ha a differenciálegyenlet-rendszert linearizáljuk a stacionárius pontok környezetében, ezért először a lineáris differenciálegyenlet-rendszer stacionárius pontjának stabilitását vizsgáljuk meg.

Lineáris differenciálegyenlet-rendszer stacionárius pontjának stabilitásvizsgálata

Egy lineáris, autonóm, állandó együtthatós differenciálegyenlet ill. -rendszer mindig megoldható.

Egydimenziós eset:

Az $\dot{x} = kx$ differenciálegyenlet $x(0) = x_0$ kezdeti értékhez tartozó megoldása $x(t) = x_0 \cdot e^{kt}$.

A stacionárius pont az $x = 0$ pont. Ez a pont $k < 0$ esetén stabilis (ekkor az exponenciális tag időben csökken, bármely $x_0 \neq 0$ pontból az origóba tart), $k \geq 0$ esetén nem stabilis.

Magasabb dimenziós eset:

Az $\dot{\underline{x}} = \mathbf{A}\underline{x}$ lineáris rendszer megoldása tipikus esetben $\underline{s}_i \cdot e^{\lambda_i t}$ tagok lineáris kombinációjaként áll elő, ahol λ_i az **A** mátrix i-edik sajátértéke és $\underline{s}_i$ a hozzá tartozó sajátvektor. A stacionárius pont típusának meghatározásához ilyenkor tehát az **A** mátrix sajátértékeit kell kiszámolni. Stabilis akkor és csak akkor lesz a stacionárius pont, ha az összes sajátérték negatív. Ha a sajátértékek komplex számok, akkor a valós rész előjelét kell vizsgálni.

Nézzük részletesen a kétdimenziós esetet:

(magasabb dimenziós lineáris rendszernél a stabilitásvizsgálat hasonló módszerrel történik)

$$\underline{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix}, \quad \text{vagyis}$$

$$\dot{x}_1 = a_{11}x_1 + a_{12}x_2 \tag{1a}$$

$$\dot{x}_2 = a_{21}x_1 + a_{22}x_2 \tag{1b}$$

Az $a_{11}x_1 + a_{12}x_2 = 0$, $a_{21}x_1 + a_{22}x_2 = 0$ (2)

algebrai egyenletrendszer megoldásával kapjuk, hogy stacionárius pontja (mint minden lineáris rendszeré) az origó.

Az **A** mátrix sajátértékeit a $\det(\mathbf{A}-\lambda\mathbf{E}) = 0$ egyenlet (az ún. karakterisztikus polinom) megoldásával kapjuk meg:

$$\det(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{E}) = \det\begin{bmatrix} a_{11} - \lambda & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} - \lambda \end{bmatrix} = \lambda^2 - (a_{11}+a_{22})\,\lambda + (a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}) = 0 \tag{3}$$

Ezt az egyenletet megoldva a sajátértékek:

$$\lambda_{1,2} = \frac{a_{11}+a_{22}}{2} \pm \sqrt{\frac{(a_{11}+a_{22})^2}{4} - (a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21})} \qquad (4)$$

<u>A sajátértékektől függően a stacionárius pontok lehetnek:</u>

stabilak, azaz vonzóak, ha mindkét sajátérték (valós része) negatív;
instabilak,
ezen belül taszítóak, ha mindkét sajátérték (valós része) pozitív;
ún. nyeregpontok, ha az egyik sajátérték pozitív, a másik negatív;
a vonzó ill. taszító pontok lehetnek
csomópontok, ha a sajátértékek valósak;
fókuszpontok, ha a sajátértékek komplexek;
és előfordulhatnak elfajult esetek:
ún. nyeregcsomó, ha (legalább) az egyik sajátérték zérus;
ún. egytengelyű csomó, ha a két sajátérték egyenlő;
ún. centrum, ha a komplex sajátértékek valós része zérus.

Rövidebb alakba írhatjuk a fenti kifejezéseinket, ha felhasználjuk, hogy

$a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21} = \det\mathbf{A}$ és $a_{11} + a_{22} = \mathrm{tr}\mathbf{A}$ ("tr**A**" az **A** mátrix „nyoma”, „trace”-e) (5)

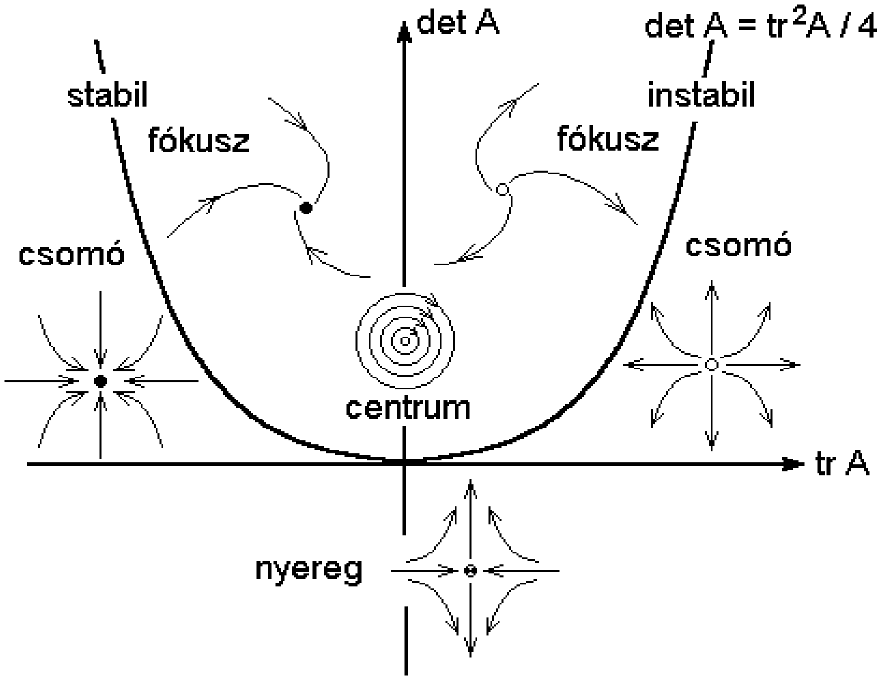
Ezzel a karakterisztikus polinom:

$$\lambda^2 - \mathrm{tr}\mathbf{A} \cdot \lambda + \det\mathbf{A} = 0 \qquad (6)$$

és a sajátértékek:

$$\lambda_{1,2} = \frac{\mathrm{tr}\mathbf{A}}{2} \pm \sqrt{\frac{(\mathrm{tr}\mathbf{A})^2}{4} - \det\mathbf{A}}\ . \qquad (7)$$

Ha kiszámoljuk az **A** mátrix determinánsát és nyomát, akkor a sajátértékek kiszámolása nélkül is megállapíthatjuk, milyen típusú a stacionárius pont a tr**A** – det**A** sík, ill. az alábbi táblázat segítségével:



a sajátértékek:	a tr**A** – det**A** sík tartománya:	a stacionárius pont típusa:
$\lambda_1 \cdot \lambda_2 < 0$, az egyik sajátérték pozitív, a másik negatív	det **A** < 0	**nyereg**
Re $\lambda_1 > 0$ és Re $\lambda_2 > 0$ mindkét sajátérték (valós része) pozitív	det **A** > 0 és tr **A** > 0	**instabil** (csomó vagy fókusz)
Re $\lambda_1 < 0$ és Re $\lambda_2 < 0$ mindkét sajátérték (valós része) negatív	det **A** > 0 és tr **A** < 0	**stabil** (csomó vagy fókusz)
λ_1 és λ_2 valósak	det **A** < (tr **A**)^2 / 4	**csomó** (stabil vagy instabil)
λ_1 és λ_2 komplex konjugáltak	det **A** > (tr **A**)^2 / 4	**fókusz** (stabil vagy instabil)
λ_1 és λ_2 valósak, de legalább az egyik zérus	det **A** = 0	**nyeregcsomó**
λ_1 és λ_2 komplex konjugáltak, a valós részük zérus	det **A** > 0 és tr **A** = 0	**centrum**
λ_1 és λ_2 valósak, és $\lambda_1 = \lambda_2$	det **A** = (tr **A**)^2 / 4	**egytengelyű csomó**

Példa:
Adott egy kétváltozós lineáris rendszer **A** együttható-mátrixa:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} p & 9 \\ -1 & -2 \end{bmatrix}$$

Határozzuk meg, hogy a "p" paraméter értékét változtatva hogyan változik a stacionárius pont típusa!

Megoldás: tr **A** = p–2; tr **A** = 0, ha $p_1 = 2$
det **A** = –2p+9; det **A** = 0, ha $p_2 = 4{,}5$
(tr **A**)^2 = 4 det **A**, ha $p^2+4p-32=0 \Rightarrow p_3 = 4,\ p_4 = -8$

tehát ha	$p < -8$	stabilis csomó
	$-8 < p < 2$	stabilis fókusz
	$2 < p < 4$	instabil fókusz
	$4 < p < 4{,}5$	instabil csomó
	$p > 4{,}5$	nyereg

Nemlineáris differenciálegyenlet-rendszer stacionárius pontjainak stabilitásvizsgálata
Általában az $\dot{\underline{x}} = \underline{f}(\underline{x})$ differenciálegyenlet-rendszer nem megoldható, de az $\underline{x}_0$ stacionárius pontokat (az ilyen rendszereknek általában egynél több stacionárius pontja van!) ekkor is meg tudjuk határozni az $\underline{f}(\underline{x}) = \underline{0}$ algebrai egyenletrendszer megoldásával, és azok stabilitását is meg tudjuk vizsgálni a lineáris esethez hasonlóan az alábbiak szerint.
A módszer azon alapul, hogy az $\underline{x}_0$ stacionárius ponttól való eltérésre, a $\underline{\xi} = \underline{x} - \underline{x}_0$ változóra vonatkozó differenciálegyenlet-rendszer formailag megegyezik az eredetivel: $\dot{\underline{\xi}} = \underline{f}(\underline{\xi})$ (mivel $\dot{\underline{x}}_0 = 0$, és ezért $\dot{\underline{\xi}} = \dot{\underline{x}}$), és megegyezik a stacionárius pontjuk körüli Taylor-soruk is:
$\dot{\underline{x}} = \underline{f}(\underline{x}) \approx \underline{f}(\underline{x}_0) + \partial\underline{f}/\partial\underline{x} \cdot (\underline{x}-\underline{x}_0) + \ldots$ ill.
$\dot{\underline{\xi}} = \underline{f}(\underline{\xi}) \approx \underline{f}(\underline{0}) + \partial\underline{f}/\partial\underline{\xi} \cdot \underline{\xi} + \ldots$
(A $\underline{\xi}$-re vonatkozó differenciálegyenlet-rendszer stacionárius pontja az origó.)

$\underline{x}_0$ stacionárius pont, ezért $\underline{f}(\underline{x}_0) = \underline{0}$, és $\underline{x}_0$ környezetében jó közelítés a lineáris tag, a magasabb rendű tagok elhanyagolásával a differenciálegyenlet-rendszert linearizálhatjuk a stacionárius pont környezetében. A $\dot{\underline{\xi}} = \partial\underline{f}/\partial\underline{\xi} \cdot \underline{\xi}$ differenciálegyenlet-rendszer pedig a fentiekben vizsgált $\dot{\underline{x}} = \mathbf{A}\underline{x}$ alakú, vagyis ez az egyenletrendszer alkalmas arra, hogy meghatározzuk az adott stacionárius pont stabilitását, típusát.
A $\partial\underline{f}/\partial\underline{\xi} = \partial\underline{f}/\partial\underline{x} = \mathbf{J}$ mátrixot **Jacobi-mátrix**nak hívják.

Az $\dot{x} = f(x,y)$, $\dot{y} = g(x,y)$ kétdimenziós nemlineáris differenciálegyenlet-rendszer Jacobi-mátrixa:

$$\mathbf{J} = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial f}{\partial x} & \dfrac{\partial f}{\partial y} \\ \dfrac{\partial g}{\partial x} & \dfrac{\partial g}{\partial y} \end{bmatrix} \tag{8}$$

A stacionárius pontok koordinátáit egyenként behelyettesítjük a **J** mátrixba, és a kapott mátrix alapján (a lineáris esethez hasonlóan) elvégezzük a stabilitásvizsgálatot. Ld. lejjebb a megoldott mintafeladatokat.
(Megjegyezzük, hogy ha **J**-nek van zérus valósrészű sajátértéke, akkor a lineáris közelítés nem elegendő, magasabb rendű tagokat is kell vizsgálni a stacionárius pont stabilitásának és típusának eldöntéséhez.)

Példa:
Határozzuk meg az alábbi rendszer stacionárius pontjainak koordinátáit,
és linearizálás után állapítsuk meg azok típusát!

$$\dot{x} = x + y$$
$$\dot{y} = (y + 2x)\,(y + 1)\,(y + 2x + 1)$$

Megoldás:
A stacionárius pontok koordinátái: $x_1 = 0,\quad y_1 = 0$; $x_2 = 1,\quad y_2 = -1$; $x_3 = -1,\quad y_3 = 1$

A Jacobi-mátrix:

$$\mathbf{J} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 2(y+1)(2y+4x+1) & (y+2x)(y+2x+1)+(y+1)(y+2x)+(y+1)(y+2x+1) \end{bmatrix}$$

Az $(x_1,y_1) = (0,0)$ pontban

$$\mathbf{J}_1 = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 1 \end{bmatrix}$$

$\det \mathbf{J}_1 = -1$, tehát a (0,0) pont **nyeregpont**.

Az $(x_2,y_2) = (1,-1)$ pontban

$$\mathbf{J}_2 = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}$$

$\det \mathbf{J}_2 = 2$, $\operatorname{tr} \mathbf{J}_2 = 3$, $(\operatorname{tr} \mathbf{J}_2)^2 > 4 \det \mathbf{J}_2$, tehát az (1,–1) pont **instabil csomó**.

Az $(x_3,y_3) = (-1,1)$ pontban

$$\mathbf{J}_3 = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -4 & -2 \end{bmatrix}$$

$\det \mathbf{J}_3 = 2$, $\operatorname{tr} \mathbf{J}_3 = -1$, $(\operatorname{tr} \mathbf{J}_3)^2 < 4 \det \mathbf{J}_3$, tehát a (–1,1) pont **stabilis fókusz**.

Kinetikai differenciálegyenlet-rendszer felírása a reakciómechanizmus alapján

Tekintsük a következő reakciót:

$$\alpha A + \beta B + \ldots \xrightarrow{k} \alpha' A + \beta' B + \ldots \qquad (9)$$

A, B, ... a reakcióban részt vevő komponensek,
α, β, ... a reagensek, α', β', ... a termékek sztöchiometriai együtthatói,
k a reakciósebességi együttható.

Tömeghatás-kinetikát feltételezve a reakció sebessége:

$$v = k[A]^{\alpha}[B]^{\beta}\ldots \qquad (10)$$

Az egyes komponensek koncentrációváltozásának sebességét leíró differenciálegyenlet a reakciósebességből úgy számolható, hogy azt megszorozzuk annyival, amennyivel nő az adott komponens sztöchiometriai együtthatója a reakcióban (azaz amennyi *keletkezik* belőle az adott reakcióban). Pl. az A komponens koncentrációváltozási sebessége a fenti reakcióban:

$$\frac{d[A]}{dt} = [\dot{A}] = (\alpha' - \alpha)\cdot v = (\alpha' - \alpha)\cdot k[A]^{\alpha}[B]^{\beta}\ldots \qquad (11)$$

Ha egy komponens több reakcióban is részt vesz, akkor az egyes reakciókra vonatkozó tagokat összegezni kell:

$$\frac{d[A]}{dt} = \sum_{i=1}^{r}(\alpha' - \alpha)\cdot v_i\,, \quad \text{ahol r a reakciók száma.} \qquad (12)$$

Példaként ld. a megoldott mintafeladatot az elvégzendő feladat leírása után.

A gyakorlaton és a jegyzőkönyvben elvégzendő feladat:
Egy egyszerű, kétváltozós reakciókinetikai rendszer stacionárius pontjainak meghatározása és azok stabilitásának vizsgálata (a lentebb kidolgozott 3. példához hasonló módon), továbbá a fáziskép rekonstruálása a *PhasePictor* nevű differenciálegyenlet-rendszer megoldó program segítségével.

1. A kapott reakciómechanizmus alapján írjuk fel a kinetikai differenciálegyenlet-rendszert (9-12):

$$\dot{x} = f(x,y), \quad \dot{y} = g(x,y)$$

A differenciálegyenlet-rendszer egy paramétert tartalmaz, melynek értékét tekintsük most először rögzítettnek (a gyakorlatvezető megadja az értékét).

2. Keressük meg a stacionárius pontokat az

$$f(x,y) = 0, \quad g(x,y) = 0$$

algebrai egyenletrendszer megoldásával.

3. Állítsuk elő a rendszer Jacobi-mátrixát (8).

4. Sorra helyettesítsük be a stacionárius pontok koordinátáit a Jacobi-mátrixba.

5. Számoljuk ki az így kapott mátrixok sajátértékeit,
vagy pedig a mátrixok determinánsát és nyomát (5).

6. A sajátértékek, illetve a determináns és nyom alapján (a 4.-5. oldalon található táblázat vagy az ábra segítségével) határozzuk meg sorra az egyes stacionárius pontok típusát!

7. Írjuk be a differenciálegyenlet-rendszerünket a *PhasePictor* nevű programba.

8. Rajzoljuk meg a differenciálegyenlet-rendszerünk fázisportréját:
- a stacionárius pontok koordinátáinak ismeretében válasszunk megfelelő méretű ablakot;
- rajzoltassunk iránymezőt;
- különböző kezdeti feltételeket megadva rajzoltassunk meg jellemző trajektóriákat.

(A programhoz tartozó használati útmutató letölthető a honlapunkról.)
Keressük meg a fázissíkon a stacionárius pontokat, és vessük össze stabilitásukat a lineáris stabilitásvizsgálat alapján meghatározott típusukkal.

9. Otthoni feladat:
Végezzük el a fenti vizsgálatokat a paraméter egy másik értékére is! (A gyakorlatvezető adja meg a másik értéket.)

10. Szorgalmi feladat:
Vizsgáljuk meg, hogyan változik a stacionárius pontok jellege, ha a rendszerben levő paramétert bifurkációs paraméternek tekintjük! Azaz: milyen paraméterértékeknél változik egy-egy stacionárius pont jellege, milyen paramétertartományokban milyen típusúak az egyes stacionárius pontok.

Megoldott mintafeladat:

Írjuk fel a reakciósémának megfelelő kinetikai egyenleteket, keressük meg a stacionárius pontokat és határozzuk meg azok típusát!

$$2\,A + X \xrightarrow{k_1} 2\,X$$
$$X + 2\,Y \xrightarrow{k_2} 3\,Y$$
$$Y \xrightarrow{k_3}$$

A sebességi állandók egységnyiek; az 'A' komponens koncentrációja paraméternek tekintendő.

Megoldás:

A kinetikai differenciálegyenlet-rendszer felírása:
$[X] = x$, $[Y] = y$, $[A] = a$ jelöléssel a reakciósebességek

$v_1 = k_1\,a^2x$; $v_2 = k_2\,xy^2$; $v_3 = k_3\,y$;

ill. $k_1 = k_2 = k_3 = 1$ esetén

$v_1 = a^2x$; $v_2 = xy^2$; $v_3 = y$.

A koncentrációváltozási sebességek

$\dot{x} = (2–1)\,v_1 + (0–1)\,v_2$
$\dot{y} = (3–2)\,v_2 + (0–1)\,v_3$

tehát

$\dot{x} = a^2x - xy^2 = x\,(a^2 - y^2) = x\,(a + y)\,(a - y) = f(x,y)$
$\dot{y} = xy^2 - y = y\,(xy - 1) = g(x,y)$

A stacionárius pontok meghatározása az

$f(xy,) = x\,(a + y)\,(a - y) = 0$
$g(x,y) = y\,(xy - 1) = 0$

algebrai egyenletrendszer megoldásával:
$f(x,y)=0$ -ból vagy $x_1 = 0$, vagy $y_{2,3} = \pm\,a$;
ezeket sorra behelyettesítve $g(x,y)=0$ -ba megkapjuk a hozzájuk tartozó y_1 ill. $x_{2,3}$ értékeket:

$x_1 = 0$, $y_1 = 0$
$x_2 = 1/a$, $y_2 = a$
$x_3 = -1/a$, $y_3 = -a$

A Jacobi-mátrix:

$$\mathbf{J} = \begin{bmatrix} a^2 - y^2 & -2xy \\ y^2 & 2xy - 1 \end{bmatrix}$$

Az $(x_1, y_1) = (0,0)$ pontban:

$$\mathbf{J}_1 = \begin{bmatrix} a^2 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

det $\mathbf{J}_1 = -a^2 < 0$, tehát a (0,0) stacionárius pont a tr**A** – det**A** alapján **nyeregpont**.

Vagy: a karakterisztikus polinom $-(a^2-\lambda)(1+\lambda) = \lambda^2 + (1-a^2)\lambda - a^2 = 0$
→ a sajátértékek $\lambda_{1,1} = a^2 > 0$ és $\lambda_{1,2} = -1 < 0$ → **nyeregpont**.

Az $(x_2,y_2) = (1/a,a)$ és az $(x_3,y_3) = (-1/a,-a)$ pontokban:

$$\mathbf{J}_{2,3} = \begin{bmatrix} 0 & -2 \\ a^2 & 1 \end{bmatrix}$$

$\det \mathbf{J}_{2,3} = 2a^2 > 0$, $\operatorname{tr} \mathbf{J}_{2,3} = 1 > 0$,
tehát az $(1/a, a)$ és $(-1/a, -a)$ stacionárius pontok a tr**A** – det**A** alapján **instabil** pontok;

$(\operatorname{tr} \mathbf{J}_{2,3})^2/4 = 1/4 \quad \rightarrow$

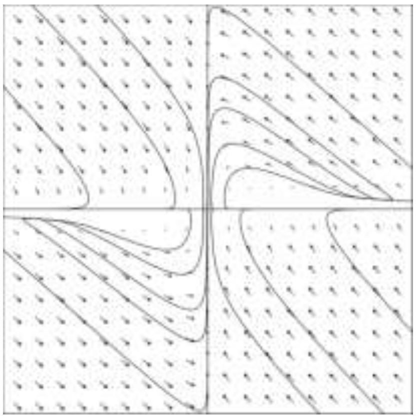
fókuszok, ha $\det\mathbf{J}_{2,3} > (\operatorname{tr} \mathbf{J}_{2,3})^2/4$, azaz $2a^2 > 1/4 \rightarrow a^2 > 1/8$

csomók, ha $\det\mathbf{J}_{2,3} < (\operatorname{tr} \mathbf{J}_{2,3})^2/4$, azaz $2a^2 < 1/4 \rightarrow a^2 < 1/8$

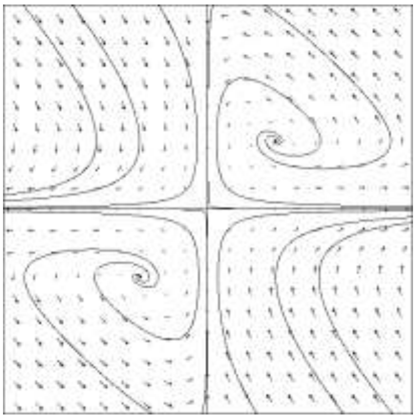
Vagy: a karakterisztikus polinom $-\lambda(1-\lambda) + 2a^2 = \lambda^2 - \lambda + 2a^2 = 0$
→ a sajátértékek $\lambda_{2,3} = \frac{1 \pm \sqrt{1-8a^2}}{2}$,
$a^2 > 1/8$ esetén komplexek pozitív valós résszel → **instabil fókuszok**,
$a^2 < 1/8$ esetén valósak és pozitívak → **instabil csomók**.

Bifurkáció-vizsgálat:
A (0,0) stacionárius pont az ’a’ paraméter értékétől függetlenül mindig nyeregpont.
Az $(1/a, a)$ és $(-1/a, -a)$ stacionárius pontoknak $a = -\sqrt{1/8}$ -nál és $a = +\sqrt{1/8}$ -nál bifurkációs pontjuk van:

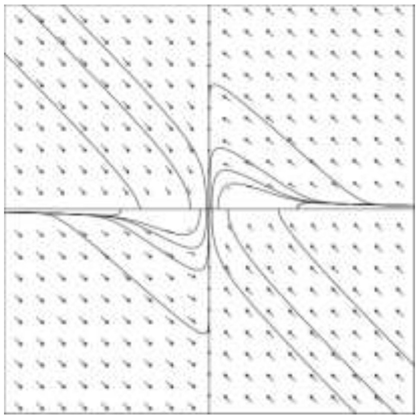
- $a < -\sqrt{1/8}$ esetén instabil fókuszok;
- $-\sqrt{1/8} < a < +\sqrt{1/8}$ esetén instabil csomópontok; ld. az F1 fázissíkot a = 0,25 értékre;
- $a > +\sqrt{1/8}$ esetén instabil fókuszok; ld. az F2 fázissíkot a = 1 értékre;
- $a = \pm\sqrt{1/8}$ esetén egytengelyű csomók;
- a = 0 esetén a fenti 3 stacionárius pont egybeesik, de az x tengely minden pontja stacionárius pont; ez elfajult eset, ld. az F3 fázissíkot.



F1: a = 0,25
stacionárius pontok:
(0 ; 0), (4 ; 0,25), (–4 ; –0,25)
$x_{min} = y_{min} = -5$, $x_{max} = y_{max} = 5$



F2: a = 1
stacionárius pontok:
(0 ; 0), (1 ; 1), (–1 ; –1)
$x_{min} = y_{min} = -3$, $x_{max} = y_{max} = 3$



F3: a = 0
elfajult eset
$x_{min} = y_{min} = -8$, $x_{max} = y_{max} = 8$

Az ábrák a PhasePictor programmal készültek.