EÖTVÖS LORÁND TUDOMÁNYEGYETEM
TERMÉSZETTUDOMÁNYI KAR

Bifurkációk kémiai dinamikai rendszerekben

Szakdolgozat

Készítette: **Rádonyi Ágnes**
alkalmazott matematikus szak

Témavezető: **Dr. Simon Péter**
Alkalmazott Analízis Tanszék

2001

Tartalomjegyzék

Bevezetés

A dinamikai rendszerek kvalitatív elmélete az utóbbi évtizedekben jelentős fejlődésen ment keresztül. Ez nagyrészt a sokféle alkalmazási lehetőségnek köszönhető. Az egyik fontos alkamazási terület a kémiában a formális reakciókinetika, amely kémiai reakciók modellezésével foglalkozik. A reakció modelljeként kapott kémiai mechanizmus egy közönséges autonóm differenciálegyenlet-rendszert határoz meg, amelyben az ismeretlen függvények a reakcióban részt vevő anyagok koncentráció-idő függvényei. Ezért a matematikai modellként kapott dinamikai rendszer fázisterének dimenzióját a reakcióban résztvevő anyagok száma adja. A legtöbb reakció esetében ez igen nagy, ezért a matematikai kezelhetőség kedvéért egyszerűsítéseket kell a modellalkotásnál alkalmazni.

Az ötvenes évekig nem volt jelentős a dinamikai rendszerek elméletének alkalmazása a kémiában, ugyanis az volt a széleskörben elterjedt vélemény, hogy egy kémiai mechanizmus által meghatározott dinamikai rendszerben a megoldások egy globálisan stabilis stacionárius ponthoz tartanak, azaz a reakcióban résztvevő anyagok mennyisége egy adott értékhez tart bármely kezdeti koncentrációból kiindulva. Ez bizonyos rendszerekre igaz is, viszont 1951-ben Belouszov felfedezte a később Belouszov-Zsabotyinszkij-reakciónak (röviden BZ-reakciónak) nevezett reakciót, melyben az egyes komponensek koncentrációja időben periodikusan változik. Az ezzel kapcsolatos eredményét sokáig nem közölhette, mert úgy gondolták, ellentmond a termodinamika második főtételének. Azonban a hatvanas évek végétől kezdve a BZ-reakcióra több modell is született, majd felfedeztek más, hasonló viselkedést mutató reakciókat is. Az oszcilláló reakciók modellezésénél [14] a legfontosabb követelmény a periodikus megoldások létezése volt. Ettől kezdve az érdeklődés középpontjába kerültek azon reakciók modelljei, amelyek a szokásostól eltérő módon (egzotikusan) viselkedtek, azaz a megoldások nem egy globálisan stabilis stacionárius ponthoz tartottak.

Az ilyen reakciók modelljeként kapott dinamikai rendszerek matematikai vizsgálata nagy lendületet adott a dinamikai rendszerek kvalitatív elmélete fejlődésének. A kvalitatív vizsgálat során feltett kérdések két nagy csoportra oszthatók: 1. Milyen egy adott rendszer aszimptotikus viselkedése?
2. Hogyan függ a kvalitatív viselkedés a rendszerben szereplő paraméterektől?

Az első kérdés arra vonatkozik, hogy rögzített paraméterértékek mellett a rendszerben hosszú idő után milyen állapotok állandósulnak.

A második kérdés vizsgálatánál a legfontosabb megtalálni azokat a paraméterértékeket, amelyeknél a rendszer kvalitatív viselkedése megváltozik. Ezeket nevezik bifurkációs értékeknek. Ennek kapcsán fejlődött ki a bifurkációelmélet, melynek feladata a dinamikai rendszerekben végbemenő kvalitatív változások osztályozása.

A dolgozat fő célkitűzése egy adott, több paramétert tartalmazó, kémiai reakció modell kvalitatív vizsgálata. A stacionárius pontok számának és stabilitásának vizsgálata mellett foglalkozunk a periodikus megoldásokkal is. Mindezekhez a szokásos eszközökön kívül a parametrikus reprezentáció módszerét hívjuk segítségül, mely nagyban megkönnyíti a viselkedések osztályozását többparaméteres rendszerekben.

A dolgozat négy részből áll. Az első részben röviden bemutatjuk a kémiai reakciók modellezésének technikáját, a másodikban pedig összefoglaljuk a későbbiekhez szükséges dinamikai rendszerekhez kapcsolódó főbb tudnivalókat és bifurkációelméleti alapokat. A harmadik részben bevezetjük a parametrikus reprezentáció módszerét (röviden PRM), és ismertetjük a témakör általános eredményeit.

Az utolsó részben megadjuk a vizsgálandó többparaméteres kémiai modellt. Főként a parametrikus reprezentáció módszerét alkalmazva, de mellette felhasználva a dinamikai rendszerek vizsgálatánál használatos szokásos eljárásokat is, osztályozzuk a modell viselkedését a paraméterek függvényében. Megmutatjuk, milyen paraméterértékeknél következik be nyeregcsomó-, illetve Hopf-bifurkáció és mikor tudjuk periodikus pálya létezését garantálni illetve kizárni.

Ezúton szeretnék köszönetet mondani témavezetőmnek, Simon Péternek, aki megismertetett ezzel a területtel, és rendkívül sok segítséget nyújtott a szakdolgozatom elkészítésében.

1. Kémiai reakciók matematikai modellezése

Először bemutatjuk az összetett kémiai reakció modelljét.

Jelölje $X_1, X_2, \ldots, X_n$ a reakcióban résztvevő *anyagfajtákat*, és jelölje r a *reakciólépések* számát. A j-edik reakciólépés a következő általános alakban írható fel:

$$\sum_{i=1}^{n} \alpha(j,i) X_i \to \sum_{i=1}^{n} \beta(j,i) X_i \tag{1}$$

ahol az $\alpha(j,i), \beta(j,i)$ nemnegatív egész számokat sztöchiometriai együtthatóknak nevezik.

Egy egyszerű példa a következő, melyben három kémiai anyagfajta és egy reakciólépés van

$$2X_1 + X_2 \to 2X_3.$$

A sztöchiometriai együtthatók: $\alpha(1,1) = 2, \quad \alpha(1,2) = 1, \quad \beta(1,3) = 2$ a többi együttható értéke 0.

A reakció során a kémiai anyagfajták mennyiségének időbeli változását vizsgáljuk. Jelölje $x_i(t)$ az X_i anyagfajta mennyiségét (koncentrációját) a t időpontban. A jelölés bevezetése akkor jogos, ha feltételezzük, hogy az egyes komponensek térbeli eloszlása homogén, azaz koncentrációjuk térben változatlan. Ekkor az x_i függvényekről azt szokás feltenni, hogy eleget tesznek egy közönséges differenciálegyenlet-rendszernek. Amennyiben az anyagok mennyisége térben is változik, akkor az x_i függvények az időn kívül a helytől is függenek, és változásukat leggyakrabban egy parciális differenciálegyenlet-rendszer írja le. Az ilyen modelleket reakció-diffúzió rendszereknek nevezik.

A továbbiakban csak homogén reakciókkal foglalkozunk. A koncentráció–idő függvény meghatározásához szükség van az elemi reakciók sebességének megadására, ezt nevezik kinetikának. Leggyakrabban a tömeghatás típusú kinetikát használják. Eszerint az (1) elemi reakció sebessége a t időpontban

$$v_j(t) = k_j \prod_{i=1}^{n} x_i(t)^{\alpha(j,i)},$$

ahol a k_j pozitív valós számot a j-edik reakciólépéshez tartozó sebességi állandónak nevezik. A tömeghatás típusú kinetika szemléletesen azt fejezi ki, hogy a reakció sebessége egyrészt függ a részecskék találkozásának valószínűségétől, másrészt attól, hogy a találkozás után milyen valószínűséggel lépnek reakcióba. Például az

$$X + Y \to Z$$

reakció sebessége: $v(t) = kx(t)y(t)$.

Összefoglalva, egy kémiai mechanizmus a következő általános alakban írható fel:

$$\sum_{i=1}^{n} \alpha(j,i)X_i \to \sum_{i=1}^{n} \beta(j,i)X_i \qquad (j = 1,2,\ldots,r) \tag{2}$$

Ez a mechanizmus tömeghatás típusú kinetikát feltételezve az $x_i(t)$ $(i = 1, 2, \ldots, n)$ koncentráció-idő függvényekre az alábbi differenciálegyenlet-rendszert határozza meg:

$$\dot{x}_i(t) = \sum_{j=1}^{r} [\beta(j,i) - \alpha(j,i)] v_j(t) \qquad (i = 1,2,\ldots,n)$$

Például a

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

mechanizmus az

$$\dot{x} = -2k_1x^2y + k_2xy$$
$$\dot{y} = k_1x^2y - k_2xy$$

differenciálegyenlet-rendszert határozza meg; k_1, k_2 jelöli a sebességi állandókat.

Fontos megjegyezni, hogy a (2) mechanizmus nemcsak egy összetett kémiai reakció modelljéül szolgálhat, hanem populációdinamikai, neurobiológiai, közgazdasági jelenségek leírására is alkalmazható.

Példaként említhetjük a Lotka-Volterra féle ragadozó-zsákmány modellt [18]. Ez a modell egy területen élő két faj, egy ragadozó és egy zsákmány (pl. róka és nyúl) egyedszámának időbeli változását írja le. A nyulakat X-szel a rókákat Y-nal jelölve a Lotka-Volterra modell a következő:

$$X \to 2X$$

$$X + Y \to 2Y$$
$$Y \to .$$

Az első reakció a nyulak szaporodását, az utolsó a rókák pusztulását fejezi ki, a második pedig azt, hogy a rókák a nyulakkal táplálkozva szaporodnak. A mechanizmus által meghatározott kinetikai differenciálegyenleteket Volterra sikerrel alkalmazta a Földközi-tengerben élő két halfaj egyedszámváltozásának meghatározására. Ugyanez a mechanizmus az oszcillációs reakciók modellezésénél is kiindulópontul szolgált, például az Explodátor modellnél [15].

A fentiekben tehát azt láttuk, hogy a (2) mechanizmus egy

$$\dot{x} = f \circ x \tag{3}$$

differenciálegyenletet határoz meg, ahol $x: \mathbb{R} \to \mathbb{R}^n$ és $f: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ folytonosan differenciálható függvény. A (3) egyenlet $p \in \mathbb{R}^n$ pontból induló megoldásának t időpontbeli értékét jelölje $\phi(t,p)$. Ezzel kaptunk egy $\phi: \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ dinamikai rendszert (feltéve, hogy a megoldások az egész számegyenesen értelmezettek). A dinamikai rendszer fázistere lehet az egész $\mathbb{R}^n$ tér, bár a kémiai alkalmazás szempontjából elegendő az $\mathbb{R}^n_+$ ortánsra szorítkozni (a koncentrációk értéke nem lehet negatív).

A (3) egyenlet általában nemlineáris, explicit megoldása ritkán adható meg, így kétféle módon vizsgálhatók a megoldások: numerikusan, vagy a differenciálegyenletek kvalitatív elméletét alkalmazva. Konkrét kémiai reakciók esetében a kvalitatív vizsgálat azért is előnyös, mert a paraméterek (különösen a sebességi állandók) kísérleti meghatározása igen nehéz, de a kvalitatív vizsgálat segítségével az egyenletben szereplő paraméterek széles tartományában információt nyerhetünk a megoldások viselkedéséről, míg a numerikus megoldás egy adott paraméterértéknél állítja elő a közelítő megoldást.

2. Dinamikai rendszerek, bifurkációk

2.1. Bevezetés

A dinamikai rendszer fogalma folyamatok leírására szolgál (pl: fizika, kémia, biológia, közgazdaságtan területén). Jelölje a rendszer lehetséges állapotainak halmazát M. Ez jelenthet helyet és sebességet, (kémiai) koncentrációt, állatfaj egyedszámot, stb. Amennyiben a rendszerben bekövetkező változásokat determinisztikus modellel akarjuk leírni, akkor ez azt jelenti, hogy minden $p \in M$ állapothoz és minden $t \in \mathbb{R}$ időhöz meg tudjuk adni, hogy a p állapotból kiindulva t idő múlva melyik állapotban lesz a rendszer. Tehát megadható egy olyan $\phi : \mathbb{R} \times M \to M$ függvény, amely megadja a rendszer állapotát t idő múlva a kezdeti állapot függvényében.

Tekintsünk egy folyamatot, melyet olyan, időben autonóm közönséges differenciálegyenlettel modelleznek, amelynek minden kezdeti értékre létezik egyértelmű megoldása. A p pontból (állapotból) induló megoldás t időpontbeli értékét jelölje $\phi(t,p)$. Ez a ϕ függvény egy dinamikai rendszert határoz meg. A fázistér lehet az $\mathbb{R}^n$ egy nyílt részhalmaza, vagy valamely n dimenziós differenciálható sokaság.

Ezután megadjuk a dinamikai rendszer matematikai definícióját.

2.1. Definíció. *Legyen M egy differenciálható sokaság, $\phi : \mathbb{R} \times M \to M$ pedig egy olyan folytonosan differenciálható leképezés, amely rendelkezik az alábbi két tulajdonsággal:*

1. *$\phi(0,x) = x$ minden $x \in M$ esetén*

2. *$\phi(t, \phi(s,x)) = \phi(t+s,x)$ minden $x \in M$ és $t,s \in \mathbb{R}$ esetén.*

Ekkor az (M,ϕ) párt ***dinamikai rendszernek*** *nevezzük.*

A bevezetésben már láthattuk, hogy a dinamikai rendszerek gyakran differenciálegyenletekből származnak. A továbbiakban megmutatjuk, hogy egy dinamikai rendszer megadása lényegében egyenértékű egy közönséges autonóm differenciálegyenlet-rendszer felírásával.

Tekintsük az

$$\dot{x} = f \circ x \tag{4}$$

differenciálegyenletet. Ennek megoldása az $x : \mathbb{R} \to M$ függvény. Jelölje a $p \in M$ pontból induló megoldás t időpontbeli értékét $\phi(t,p)$. Ha a megoldás minden $p \in M$ esetén az egész $\mathbb{R}$ halmazon értelmezett, akkor $\phi : \mathbb{R} \times M \to M$ egy dinamikai rendszer. Ha M kompakt, akkor a megoldások az egész számegyenesen értelmezettek [4]. Ha M nem kompakt, akkor előfordulhat, hogy a megoldások véges idő alatt a "végtelenbe" távoznak. Azonban ekkor is megadható olyan F vektormező, amely már dinamikai rendszert határoz meg (a megoldások az egész $\mathbb{R}$-en értelmezettek), és pályái (trajektóriái) az M sokaságon ugyanazok, mint az f vektormező pályái. Például $M = \mathbb{R}^n$ esetén a (4) egyenlet pályái megegyeznek az

$$\dot{x} = \frac{f \circ x}{1 + |f \circ x|}$$

egyenlet pályáival, csak az időparaméterezésben térnek el, és az utóbbi megoldásai az egész $\mathbb{R}$ halmazon értelmezettek.

Tehát láttuk, hogy egy vektormező meghatároz egy dinamikai rendszert. Ez fordítva is fennáll. Legyen ugyanis (M, ϕ) egy dinamikai rendszer, és legyen $f(p) = \partial_2\phi(0,p)$. Az f vektormező éppen a ϕ függvényt határozza meg.

Ezután röviden ismertetjük a dinamikai rendszerekkel kapcsolatos alapvető fogalmakat.

Legyen $I \subset \mathbb{R}$ egy tetszőleges intervallum, és $U \subset M$ egy halmaz. Legyen

$$\phi(I,p) = \{\phi(t,p) \in M : t \in I\}$$

$$\phi(t,U) = \{\phi(t,p) \in M : p \in U\}.$$

A $\phi(\mathbb{R},p)$ halmaz a p pont *trajektóriája* (vagy pályája). Egy $p \in M$ pontot *egyensúlyi pontnak*, vagy *stacionárius pontnak* nevezünk, ha $\phi(\mathbb{R},p) = \{p\}$. Egy $\phi(\mathbb{R},p)$ trajektóriát *periodikusnak* nevezünk, ha létezik $\tau > 0$ szám, melyre $\phi(t+\tau,p) = \phi(t,p)$ minden $t \in \mathbb{R}$ esetén.

2.2. Stacionárius pontok stabilitása és periodikus megoldások létezése

Az egyik leggyakrabban használt stabilitás fogalom a Ljapunov–féle stabilitás, ezt fogjuk röviden stabilitásnak nevezni.

2.2. Definíció. *Egy (M,ϕ) dinamikai rendszer $\phi(.,p)$ megoldását stabilisnak nevezzük, ha minden $\epsilon > 0$ számhoz van olyan $\delta > 0$ szám, hogy $\rho(p,q)$ és $t \geq 0$ esetén $\rho(\phi(t,p),\phi(t,q)) < \epsilon$, ahol ρ egy metrika az $M \subset \mathbb{R}^n$ halmazon. A nem stabilis megoldást instabilisnak nevezzük. Egy stabilis $\phi(.,p)$ megoldás aszimptotikusan stabilis, ha $t \to +\infty$ esetén $\rho(\phi(t,p),\phi(t,q)) \to 0$.*

Egy stacionárius pontot konstans megoldásnak tekintve, a fenti definíció értelmében nevezünk stabilisnak, illetve instabilisnak.

A stabilitásvizsgálat legegyszerűbb módja a linearizálás, viszont nem minden esetben célravezető (csak hiperbolikus stacionárius pontoknál működik jól). Ennél finomabb módszer Ljapunov módszere.

Tekintsük a (4) egyenletet, legyen $p \in M$ stacionárius pont ($M \subset \mathbb{R}^n$ nyílt ezután), U pedig p egy környezete. Ljapunov módszerének geometriai jelentése a következő: Keresünk egy olyan $V: U \to \mathbb{R}$ folytonosan differenciálható függvényt, amelynek szigorú minimuma van a p pontban, és szintvonalain a (4) egyenlet trajektóriái csökkenő irányban haladnak át. Ha megadható ilyen függvény, akkor a p pont aszimptotikusan stabilis, a vonzási tartomány tartalmazza az U halmazt. Ez a geometriai kép végtelen dimenziós fázistér esetén is alkalmazható. A véges dimenziós állítások megfogalmazásához bevezetjük a rendszer szerinti derivált fogalmát. Jelölje $\dot{V}: U \to \mathbb{R}$ a következő függvényt:

$$\dot{V}(q) = \langle V'(q), f(q) \rangle \qquad q \in U,$$

ahol $< \cdot, \cdot >$ jelöli az $\mathbb{R}^n$-beli skalárszorzatot. Ez a függvény mutatja meg, hogy a szintvonalak normálvektora $V'(q)$ milyen szöget zár be a trajektória irányvektorával $f(q)$.

2.1. Tétel. *Tegyük fel, hogy létezik olyan $V: U \to \mathbb{R}$ folytonosan differenciálható függvény, melyre*

1. $V(p) = 0$ *és* $V(q) > 0$, *ha* $q \in U \setminus \{p\}$
2. $\dot{V}(q) \leq 0$, *ha* $q \in U \setminus \{p\}$.

   Ekkor p stabilis stacionárius pont. Ha ezenkívül

3. $V(q) < 0$ *minden* $q \in U \setminus \{p\}$ *esetén,*

   akkor p aszimptotikusan stabilis, és az U halmaz része a p pont vonzási tartományának.

A fenti tétel elsősorban a nem hiperbolikus stacionárius pontok stabilitásvizsgálatánál játszik szerepet, ugyanis a hiperbolikus stacionárius pontok stabilitási tulajdonságai megegyeznek a linearizálással nyert rendszer tulajdonságaival. Ennek az az oka, hogy az $\dot{x} = Ax$ lineáris rendszerhez előállítható $V(q) = \langle Aq, q \rangle$ Ljapunov függvény a nemlineáris rendszernek is Ljapunov függvénye. Ezt foglalja össze az alábbi

2.2. Tétel. *Legyen $p \in M$ a (4) rendszer stacionárius pontja. Tegyük fel, hogy f kétszer differenciálható.*

1. *Ha $f'(p)$ minden sajátértéke negatív valós részű, akkor p aszimptotikusan stabilis.*

2. *Ha az $f'(p)$ mátrixnak van pozitív valós részű sajátértéke, akkor a p pont instabilis.*

Ha a rendszer nemlineáris, és p nem hiperbolikus, akkor a linearizált rendszer stacionárius pontjának stabilitásából (instabilitásából) nem következik az eredeti rendszer p pontjának stabilitása (instabilitása).

A dinamikai rendszerek vizsgálatakor nem csak a stacionárius pontok, hanem a periodikus pályák is fontos szerepet játszanak, hiszen ezek is egyfajta állandósult állapotok.

Általában nehéz eldönteni, hogy egy adott rendszernek létezik-e periodikus megoldása. Kétdimenziós esetben zárt pályák létezésének kizárására jól használható a **Dulac-kritérium**. Ekkor a (4) egyenlet az alábbi alakot ölti:

$$\dot{x} = X(x, y)$$

$$\dot{y} = Y(x, y)$$

2.3. Tétel. *Tegyük fel, hogy létezik egy $G \subset \mathbb{R}^2$ egyszeresen összefüggő tartomány, és azon egy olyan $B\colon G \to \mathbb{R}$ folytonosan differenciálható függvény, hogy $\partial_1(BX) + \partial_2(BY)$ a G tartományban nem vált előjelet. Ekkor ebben a tartományban nincs zárt pálya.*

2.3. Stacionárius pontok bifurkációi

Bifurkációnak nevezik azt a jelenséget, amikor egy rendszer kvalitatív viselkedése, a rendszer paramétereit folytonosan változtatva ugrásszerűen megváltozik. Például stacionárius pont, vagy periodikus pálya keletkezik, tűnik el, stabilissá, illetve instabilissá változik. A bifurkációelmélet feladata meghatározni, hogy milyen tipikus bifurkációk (minőségi változások) következnek be a rendszerben egy vagy több paramétert változtatva. Azt a minőségi változást, amely k számú paraméter változtatásával tipikusan előfordul, k kodimenziós bifurkációnak nevezik.

A bifurkációkat három csoportra osztjuk:

- stacionárius pontok lokális bifurkációi,
- periodikus pályák lokális bifurkációi,
- globális bifurkációk.

Nézzünk először a stacionárius pont bifurkációjára három egyszerű példát.

1. PÉLDA: Nyereg-csomó bifurkáció. Tekintsük az

$$\dot{x} = x^2 - u$$

egyenletet, ahol $x: \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, $u \in \mathbb{R}$ paraméter. Az $u = 0$ paraméterértéknél az $x = 0$ stacionárius pontban bifurkáció van. Ugyanis, ha $u < 0$, akkor a rendszernek nincs stacionárius pontja, ha pedig $u > 0$, akkor két stacionárius pont van, az $x = \pm\sqrt{u}$ értéknél.

2. PÉLDA: Vasvilla (pitchfork) bifurkáció. Tekintsük az

$$\dot{x} = ux - x^3$$

egyenletet, ahol $x: \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, $u \in \mathbb{R}$ paraméter. Az $u = 0$ paraméterértéknél az $x = 0$ stacionárius pontban bifurkáció van. Ugyanis, ha $u < 0$ akkor a rendszernek csak $x = 0$ a stacionárius pontja, ez stabilis, ha pedig $u > 0$, akkor az $x = 0$ stacionárius pont elveszti stabilitását és két stabilis stacionárius pont születik az $x = \pm\sqrt{u}$ értéknél.

3. PÉLDA: Andronov-Hopf-féle bifurkáció. Tekintsük az

$$\dot{x} = ux - \omega y + (ax - by)(x^2 + y^2)$$

$$\dot{y} = \omega x + uy + (bx + ay)(x^2 + y^2)$$

egyenletet, ahol $x, y: \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, $u \in \mathbb{R}$ paraméter, $\omega, a, b \in \mathbb{R}$ állandó. Az $u = 0$ paraméterértéknél az $(x, y) = (0, 0)$ stacionárius pontban bifurkáció van. A rendszert polárkoordinátákban egyszerű vizsgálni:

$$\dot{r} = r(u + ar^2)$$

$$\dot{\theta} = \omega + br^2$$

Nézzük először az $a < 0$ esetet. Ekkor $u < 0$ esetén az origó aszimptotikusan stabilis, $u > 0$ esetén elveszti a stabilitását és egy $r = \sqrt{\frac{-u}{a}}$ sugarú stabilis határciklus jelenik meg. Ezt nevezik szuperkritikus Andronov-Hopf bifurkációnak. Az $a > 0$ esetben a bifurkációt szubkritikusnak nevezik. Ekkor $u < 0$ esetén az aszimptotikusan stabilis origó körül van egy $r = \sqrt{\frac{-u}{a}}$ sugarú instabilis határciklus, amely $u > 0$ esetén eltűnik és az origó elveszti stabilitását.

A példák után fogalmazzuk meg általánosan a stacionárius pont bifurkációjának problémáját. Adott az

$$\dot{x}(t) = f(x(t), u) \tag{5}$$

rendszer, ahol $x:\mathbb{R} \to \mathbb{R}$, $f:\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^k \to \mathbb{R}^n$ folytonosan differenciálható függvények, $u \in \mathbb{R}^k$ paraméter. Tegyük fel, hogy $f(p_0, u_0) = 0$, azaz p_0 az $f(\cdot, u_0)$ vektormezőnek stacionárius pontja. Kérdés, hogy az u paramétert változtatva megmarad-e a stacionárius pont, és ha igen, akkor stabilitása hogyan változik? Látni fogjuk, hogy ez a vektormező (p_0, u_0) pontbeli derivált mátrixának sajátértékeitől függ. Jelölje $\partial_x f(p, u)$ a $p \mapsto f(p, u)$ függvény derivált mátrixát. Az alábbi tétel az implicitfüggvény-tétel következménye.

2.4. Tétel. *Ha a $\partial_x f(p_0, u_0)$ mátrixnak 0 nem sajátértéke, akkor van az u_0 pontnak olyan $U \subset \mathbb{R}^k$ környezete, és olyan $P \to \mathbb{R}^n$ függvény, hogy $P(u_0) = p_0$ és $f(P(u), u) = 0$ minden $u \in U$ esetén, azaz az u_0 egy környezetében minden paraméterértékhez egy stacionárius pont tartozik.*

Tehát ha a stacionárius pont hiperbolikus, akkor az u_0 paraméterhez közeli paramétereknél megmarad a stacionárius pont, és ugyanolyan típusú, mint p_0. Ezért a Hartman-Grobman tétel szerint az $f(\cdot, u_0)$ vektormező a p_0 pontban lokálisan topologikusan ekvivalens az $f(\cdot, u)$ vektormezővel a $P(u)$ pontban.

A stacionárius pontban tehát akkor következhet be minőségi változás, ha az nem hiperbolikus, azaz a derivált mátrixnak van 0 valós részű sajátértéke. Ha egy nulla sajátértéke van, akkor tipikusan nyereg-csomó bifurkáció következik be. Ha egy tiszta képzetes sajátérték párja van, akkor pedig Andronov-Hopf bifurkáció. Ezek a stacionárius pont egy kodimenziós bifurkációi.

Fogalmazzuk meg most pontosan a fent említett két bifurkáció bekövetkezésének feltételeit:

2.5. Tétel. *(nyereg-csomó bifurkáció): Legyen az (5) egyenletben $n = k = 1$. Az általánosság megszorítása nélkül feltehető, hogy $u_0 = p_0 = 0$ azaz az $f(\cdot, 0)$ vektormezőnek a 0 stacionárius pontja. Ezek után tegyük fel, hogy a 0 stacionárius pont nem hiperbolikus, azaz $\partial_x f(0,0) = 0$, valamint $\partial_u f(0,0) \neq 0$ és $\partial_x^2 f(0,0) \neq 0$. Ekkor $u > 0$ ($u < 0$) esetén nincs az $f(\cdot, u)$ vektormezőnek stacionárius pontja az origó egy környezetében, $u < 0$ ($u > 0$) esetén pedig egy stabilis és egy instabilis stacionárius pontja van.*

2.6. Tétel. *(Andronov-Hopf bifurkáció): Legyen az (5) egyenletben $n = 2$, $k = 1$. Tegyük fel, hogy*

1. *$f(p_0, u_0) = 0$*
2. *a $\partial_x f(p_0, u_0)$ mátrixnak két tisztán képzetes sajátértéke van: $\lambda(u_0) = \pm i\beta$*

3. $\frac{\partial \mathrm{Re}\lambda(u_0)}{\partial u} \neq 0$

Ekkor u_0-ban megváltozik a p_0 stacionárius pont stabilitása és születik egy határciklus.

3. A parametrikus reprezentáció módszere (PRM)

A közönséges differenciálegyenletek használata során leggyakrabban felmerülő kérdések az egyensúlyi pontok számára és típusára vonatkoznak. Ezek megválaszolása sokszor nehézségekbe ütközik, különösen akkor, ha a differenciálegyenlet–rendszer paraméterektől függ, és a fenti kérdésekre globálisan, azaz a teljes paramétertartományban szeretnénk választ kapni.

Az alábbiakban mutatunk egy módszert, mellyel a paraméterteret tartományokra lehet felosztani az egyensúlyi pontok száma és típusa szerint. Az így kapott felbontást hívjuk bifurkációs diagramnak. Ezek a diagramok akkor használhatók legjobban, ha két kontroll paraméter van, ekkor ugyanis a bifurkációs diagram (amely általában egy görbe) síkban szemléltethető.

Tekintsük a következő közönséges differenciál egyenlet–rendszert:

$$\dot{X}(t) = F(X(t), U), \tag{6}$$

ahol $F : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^k \to \mathbb{R}^n$ differenciálható függvény, $X(t) \in \mathbb{R}^n$ az állapotváltozók által alkotott vektor, $U \in \mathbb{R}^k$ pedig a paraméterek vektora.

3.1. Definíció. *Szingularitási halmaznak nevezzük azon $U \in \mathbb{R}^k$ vektorok halmazát, melyekhez létezik $X \in \mathbf{R}^n$, hogy fennálljon*

$$F(X, U) = 0 \tag{7}$$

$$\det D_X F(X, U) = 0. \tag{8}$$

A (6) egyenlet egyensúlyi pontjainak száma a szingularitási halmaz segítségével adható meg (a kijelölt tartományokon belül nem változik az egyensúlyi pontok száma). Később ezt pontosan bemutatjuk.

Az egyensúlyi pontok típusa rendszerint akkor változik, ha a Jacobi–mátrix elemeiből képzett bizonyos kifejezés (pl. a mátrix nyoma két dimenzióban) előjelet vált. Tehát tegyük fel, hogy létezik egy $G : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^k \to \mathbb{R}$ differenciálható függvény, mely segítségével a paramétertér egy olyan felosztását kapjuk, hogy egy tartományon belül nem változik az egyensúlyi pont stabilitása. A tartományok határát azok a paramétervektorok jelölik ki, melyekhez létezik $X \in \mathbf{R}^n$, hogy fennálljon

$$F(X, U) = 0 \tag{9}$$

$$G(X, U) = 0. \tag{10}$$

Tegyük fel, hogy az egyensúlyi pontokat meghatározó $F(X, U) = 0$ algebrai egyenletrendszer egyetlen egyenletre redukálható, és két kontroll paraméterünk van, $a, b \in \mathbb{R}$.

Pontosabban:

- Létezik egy C^2-beli függvény $f : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}$, hogy ($n-1$ változó eliminálása után) a (7)-(8) rendszer a következő alakra egyszerűsödik

$$f(x,a,b) = 0 \tag{11}$$
$$f'(x,a,b) = 0 \tag{12}$$

  (ahol $f' = \partial_1 f$, $x \in \mathbb{R}$)

- Létezik egy C^1-beli függvény $g : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}$, hogy a (9)-(10) rendszer a következő alakra egyszerűsödik

$$f(x,a,b) = 0 \tag{13}$$
$$g(x,a,b) = 0 \tag{14}$$

  Ekkor a szingularitási halmaz:

$$\mathcal{S} = \{(a,b) \in \mathbb{R}^2 : \exists x \in \mathbb{R} \;\; f(x,a,b) = f'(x,a,b) = 0\} \tag{15}$$

  Legyen a H-görbe:

$$\mathcal{H} = \{(a,b) \in \mathbb{R}^2 : \exists x \in \mathbb{R} \;\; f(x,a,b) = g(x,a,b) = 0\} \tag{16}$$

A könnyebb kezelhetőség érdekében feltesszük, hogy ezek a bifurkációs halmazok megadhatók x-el paraméterezett görbeként (az (a,b) paramétertérben).

Azaz a továbbiakban feltételezzük a következőket:

(S1) Minden $x \in \mathbb{R}$ esetén a (11)-(12) rendszernek létezik egyetlen $(a,b) \in \mathbb{R}^2$ megoldása. Jelölje ezt a megoldást $D(x)$.

(H1) Minden $x \in \mathbb{R}$ esetén a (13)-(14) rendszernek létezik egyetlen $(a,b) \in \mathbb{R}^2$ megoldása. Jelölje ezt a megoldást $H(x)$.

Ez azt jelenti, hogy az $\mathcal{S}$ és a $\mathcal{H}$ halmazokat az x-szel paraméterezett D és H görbe adja, azaz

$$\mathcal{S} = \{D(x) : x \in \mathbb{R}\} \qquad \mathcal{H} = \{H(x) : x \in \mathbb{R}\}$$

Itt a paraméter kifejezés már nem az eredeti kontroll paraméterekre (a,b) vonatkozik, hanem az x állapotváltozóra, mely most a görbék paramétere.

Feltesszük még azt is, hogy azok az (a,b) paraméter párok, melyekre egy adott $x \in \mathbb{R}$ szám (11) megoldása, egy görbét alkotnak a paramétertérben.

Azaz

(S2) Minden $x \in \mathbb{R}$ esetén az $m(x) = \{(a,b) \in \mathbb{R}^2 : \ f(x,a,b) = 0\}$ halmaz egy görbe $\mathbb{R}^2$-ben.

A parametrikus reprezentáció módszere akkor kecsegtet előnnyel, ha (9)-ben az F függvény a paraméterektől egyszerűbb módon függ, mint az X állapotváltozótól. Ez az eset alkalmazásokban egyáltalán nem ritka: pl. kémiai reakciórendszerekben a paraméterek reakciókonstansok, amelyek az egyenletekben lineárisan jelennek meg.

Most olyan függvényeket fogunk vizsgálni, amelyek a paraméterektől lineárisan függnek.

Tehát tegyük fel, hogy léteznek olyan C^2-beli függvények $f_0, f_1, f_2 : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, melyekre

$$f_1^2 + f_2^2 \neq 0 \tag{17}$$

és az f függvény a következő alakba írható

$$f(x,a,b) = f_0(x) + af_1(x) + bf_2(x). \tag{18}$$

Könnyen látható, hogy f kielégíti (S1)-et, ha

$$W(x) = f_1(x)f_2'(x) - f_1'(x)f_2(x) \neq 0 \qquad \text{minden } x \in \mathbb{R} \tag{19}$$

Ekkor a D-görbe a következőképpen paraméterezhető

$$\begin{aligned} a = D_1(x) &:= \frac{f_2(x)f_0'(x) - f_0(x)f_2'(x)}{W(x)} \\ b = D_2(x) &:= \frac{f_0(x)f_1'(x) - f_1(x)f_0'(x)}{W(x)} \end{aligned} \tag{20}$$

Továbbá, (17) biztosítja, hogy (S2) fennáll és $m(x)$ egy egyenest alkot az (a,b) paramétertérben. Vezessük be a következő függvényt:

$$B(x) = f_0''(x) + f_1''(x)D_1(x) + f_2''(x)D_2(x). \tag{21}$$

Egyszerűen kiszámolható, hogy

$$D'(x) = \frac{B(x)}{W(x)}(f_2(x), -f_1(x)). \tag{22}$$

Annak érdekében, hogy definiálni tudjuk a D-görbe érintőit, feltesszük, hogy

$$B \text{ gyökei (ha léteznek) izoláltak.} \tag{23}$$

Ekkor (22) szerint $|D'(x)|$ nullahelyei izoláltak, tehát a D-görbe érintő egységvektora

$$e(x) = \frac{D'(x)}{|D'(x)|} \tag{24}$$

izolált pontok kivételével az egész $\mathbb{R}$-en definiált. Bizonyított [22], hogy minden $x_0 \in \mathbb{R}$ esetén léteznek a jobb és baloldali határértékek:

$$\lim_{x \to x_0^-} e(x)\ , \qquad \lim_{x \to x_0^+} e(x)$$

és párhuzamosak. Azon x_0 pontban, ahol $|D'(x_0)| = 0$, definiáljuk $e(x)$-et a következőképpen

$$e(x_0) = \lim_{x \to x_0^-} e(x). \tag{25}$$

Ezek után definiálhatjuk a D-görbe érintőjét bármely $x \in \mathbb{R}$ pontban

$$t(x) = \{D(x) + te(x) : t \in \mathbb{R}\}. \tag{26}$$

Az *érintő tulajdonság* azt jelenti, hogy bármely $x \in \mathbb{R}$ esetén

$$m(x) = t(x) \tag{27}$$

Kimondhatjuk a következő tételt

3.1. Tétel. *(Érintő tulajdonság) Tegyük fel, hogy f (18) által adott és kielégíti (17)-t, (19)-t és (23)-t. Ekkor (11) adott (a, b) paraméterpárhoz tartozó megoldásainak a száma megegyezik (a, b)-ből a D-görbéhez húzható érintők számával, a megoldások értékei pedig a D-görbén az érintési pontokhoz tartozó x értékek.*

Bizonyítás: A tétel következő átfogalmazását fogjuk bizonyítani:

$$f(x, a, b) = 0 \quad \Longleftrightarrow \quad \exists t \in \mathbb{R} \quad (a, b) = (D_1(x), D_2(x)) + t(D_1'(x), D_2'(x)).$$

Nézzük először a jobbról balra irányt.

Mivel nekünk az érintőnek csak az iránya kell, így a deriváltakban szereplő közös tényezőket nem kell figyelembe vennünk (ezek t-be beolvaszthatóak). Ekkor a következő formulákat kapjuk deriválás és egyszerűsítés után:

$$\begin{aligned} a &= D_1(x) + t(f_2(x) f_0''(x) - f_0(x) f_2''(x) - W'(x) D_1(x)) \\ b &= D_2(x) + t(f_0(x) f_1''(x) - f_1(x) f_0''(x) - W'(x) D_2(x)) \end{aligned}$$

Írjuk be ezeket az értékeket f definíciójába (18):

$$\begin{aligned} f(x,a,b) &= f_0(x) + af_1(x) + bf_2(x) = \\ &= (1 - W'(x))(f_0(x) + D_1(x)f_1(x) + D_2(x)f_2(x)) + \\ &+ f_0(x)W'(x) + f_1(f_2(x)f_0''(x) - f_0(x)f_2''(x)) + \\ &+ f_2(f_0(x)f_1''(x) - f_1(x)f_0''(x)) \end{aligned}$$

A D-görbe definíciója miatt

$$f_0(x) + D_1(x)f_1(x) + D_2(x)f_2(x) = 0.$$

Tehát

$$\begin{aligned} f(x,a,b) &= f_0(x)(f_1(x)f_2''(x) - f_1''(x)f_2(x)) + \\ &+ f_1(f_2(x)f_0''(x) - f_0(x)f_2''(x)) + \\ &+ f_2(f_0(x)f_1''(x) - f_1(x)f_0''(x)) = 0. \end{aligned}$$

A fenti lépések visszafelé is elvégezhetőek, így adódik a bizonyítás másik fele. Ezzel a tételt beláttuk. ■

A PRM egyik fő előnye, hogy egy adott (a,b) paraméterpárhoz tartozó megoldások száma leolvasható a D-görbe ábrájáról, csak meg kell számolni, hány érintőt lehet húzni (a,b)-ből a D-görbéhez (érintő tulajdonság).

Az érintők számának meghatározását megkönnyíti a *konvexitási tulajdonság*: a D-görbe a csúcspontokban összekapcsolódó konvex ívekből áll, a csúcspontokat a B függvény nullahelyei adják. A különálló ívek konvexitása azt jelenti, hogy bármely pontjukhoz húzott érintő egyenes lokálisan az ív ugyanazon oldalán helyezkedik el. A konvexitási tulajdonság azt is mutatja, hogy a D-görbén áthaladva egy x_0 pontban nyereg-csomó bifurkáció történik. Azaz (11) megoldásainak a száma x_0 környezetében kettővel megváltozik, mivel az érintők száma kettővel változik.

A konvexitási tulajdonság pontosabb megfogalmazása a következő tétel. (Bizonyításhoz ld.[22])

3.2. Tétel. *Tegyük fel, hogy f (18) által adott és kielégíti (17)-t, (19)-t és (23)-t.*

1. *Ha B előjelet vált x_0-ban, akkor a D-görbének csúcspontja van x_0-ban, azaz*

$$\lim_{x \to x_0^-} e(x) = - \lim_{x \to x_0^+} e(x) \ . \tag{28}$$

2. *Tegyük fel, hogy B nem vált előjelet x_0-ban. Ha $W(x_0)$ pozitív (negatív), akkor a D-görbe lokálisan az x_0-hoz tartozó érintő bal (jobb) oldalán van.*

Abban az esetben, ha a rendszer lineárisan függ a paraméterektől, például amikor f (18) által adott, az érintő tulajdonságból következik, hogy

$$H(x) \in t(x), \tag{29}$$

Ez az összefüggés szemléletesen azt jelenti, hogy a H-görbe $H(x)$ pontja rajta van a D-görbéhez a $D(x)$ ponton át húzott érintőn. Ez jelentősen meghatározza a D és a H-görbe viszonyát. Például:

- Ha a két görbének van azonos x paraméterhez tartozó közös pontja, akkor ebben a pontban az érintő egyenesek egybeesnek, azaz a két görbe érinti egymást.
- Bizonyos feltételek teljesülése esetén a H-görbe által alkotott hurkon belül mindig megtalálható a D-görbe egyik csúcsa.
- Tegyük fel, hogy a H-görbét leíró rendszer függ még egy extra paramétertől, ez legyen például λ és vezessük be H helyett a H_λ jelölést. Nem-elfajult esetben a D és a H_λ-görbe közös pontja megmarad λ változtatásakor is. Azaz a közös pont csúszik a D-görbén, ahogy λ változik.

(Bővebben ld. [20])

A stacionárius pontok kvalitatív vizsgálatához visszakanyarodva , kis kitérőként nézzük a következőket.

Legyen a vizsgált differenciálegyenlet-rendszer két dimenziós és vezessük be az alábbi jelöléseket:

$$P(x,y) := \dot{x} \qquad Q(x,y) := \dot{y} \tag{30}$$

A stacionárius pontokat meghatározó rendszer tehát a következő:

$$P(x,y) = 0 \tag{31}$$

$$Q(x,y) = 0 \tag{32}$$

A stacionárius pont típusáról ad információt a Jacobi-mátrix determinánsának előjele az adott pontban. Legyen tehát

$$J(x,y) := \begin{pmatrix} \partial_x P(x,y) & \partial_y P(x,y) \\ \partial_x Q(x,y) & \partial_y Q(x,y) \end{pmatrix}$$

3.3. Tétel. *Tegyük fel, hogy y kifejezhető x függvényeként a (32) egyenletből, azaz $y = g(x)$. Ekkor a (30) rendszer Jacobi-mátrixának determinánsa az $(x, g(x))$ pontban:*

$$detJ = f'(x)\partial_y Q(x, g(x)) \tag{33}$$

ahol

$$f(x) = P(x, g(x)) \tag{34}$$

Bizonyítás: A (32) egyenletből következik, hogy $Q(x, g(x)) = 0$. Deriváljuk ezt az egyenletet,

$$\partial_x Q(x, g(x)) + \partial_y Q(x, g(x))g'(x) = 0 \tag{35}$$

Deriváljuk (34)-et, használjuk (35)-öt és szorozzuk be az egyenletet $\partial_y Q(x, g(x))$-el

$$\begin{aligned} f'(x)\partial_y Q(x, g(x)) &= \\ = \partial_x P(x, g(x))\partial_y Q(x, g(x)) &+ \partial_y P(x, g(x))g'(x)\partial_y Q(x, g(x)) = \\ = \partial_x P(x, g(x))\partial_y Q(x, g(x)) &- \partial_y P(x, g(x))\partial_x Q(x, g(x)) = \\ &= detJ \end{aligned}$$

■

Mindezekre azért volt szükség, mert a Jacobi-mátrix determinánsának előjele mondja meg, hogy az egyensúlyi pont nyereg típusú-e (akkor negatív) vagy nem (akkor pozitív).

4. A parametrikus reprezentáció alkalmazása

4.1. Bevezetés

Ebben a szakaszban az előzőekben ismertetett általános eredményeket alkalmazzuk egy konkrét modellben.

Tekintsük a következő általános kémiai reakció-egyenletet:

$$pA + qB \to C,$$

mely az alábbi felszíni reakció lépéseken keresztül megy végbe

$$A + nX \leftrightarrow AX_n$$

$$B + mX \leftrightarrow BX_m$$

$$pAX_n + qBX_m \to C + (np + qm)X,$$

ahol A és B a reakcióban résztvevő anyagok, X a felszín, melyen a reakció végbemegy, AX_n és BX_m a felszínre kerülő A és B anyagok, p, q, n és m pedig sztöchiometriai együtthatók. Ez többek közt két konkrét kémiai modell általánosítása. Az egyik reakció a szén-monoxid oxidációja platina felületen, melyről bővebben olvashatunk Eigenberger ([5]), illetve Lynch és Wanke ([19]) munkáiban. A másik reakció a metanol oxidációja platina felületen ([13]).

A megfelelő kiegészítő és egyszerűsítő lépések után ([21]) egy viszonylag egyszerű alakú, de bonyolult viselkedésű matematikai modell adódik, ezt fogjuk ezután vizsgálni.

Tekintsük tehát a következő algebrai differenciálegyenlet rendszert:

$$\dot{x} = az - bx - cx^n z^2$$

$$\dot{y} = dz - y$$

$$z = 1 - x - y$$

ahol x, y és z három anyag mennyiségét jelöli a, b, c és d pedig pozitív konstansok. Mivel z kifejezhető x és y segítségével, így a feladat valójában kétdimenziós.

$$\dot{x} = a(1 - x - y) - bx - cx^n(1 - x - y)^2 \tag{36}$$

$$\dot{y} = d(1 - x - y) - y \tag{37}$$

Minket igazából az $x, y, z \geq 0$ esetben érdekel a rendszer viselkedése, azaz a fázistér most az $x, y \geq 0$ és az $1 \geq x + y$ által megadott háromszög. Könnyen belátható, hogy az

$$M = \{(x, y) \colon x \geq 0, y \geq 0, x + y \geq 0\}$$

háromszög alakú tartomány pozitívan invariáns, hiszen

$$\begin{aligned} x = 0 \quad &\Rightarrow \quad \dot{x} > 0 \\ y = 0 \quad &\Rightarrow \quad \dot{y} > 0 \\ x + y = 1 \quad &\Rightarrow \quad \dot{x} < 0, \quad \dot{y} < 0, \end{aligned}$$

ami szemléletesen azt jelenti, hogy a tartományt határoló egyeneseket a megoldások pályái csak befelé léphetik át.

A rendszer stacionárius pontjait az $\dot{x} = 0$ és az $\dot{y} = 0$ megoldásai adják.

$$a(1 - x - y) - bx - cx^n(1 - x - y)^2 = 0 \tag{38}$$

$$d(1 - x - y) - y = 0 \tag{39}$$

(39) alapján

$$y = \frac{d(1 - x)}{d + 1} \tag{40}$$

(40)-t (38)-be helyettesítve a következő egyszerű algebrai egyenlet adódik:

$$f(x) = \frac{a}{d + 1} - x(b + \frac{a}{d + 1}) - \frac{c}{(d + 1)^2} x^n (1 - x)^2 = 0 \tag{41}$$

melynek gyökei közül minket a $(0, 1)$ intervallumba esők érdekelnek. Számoljuk ki f deriváltját is, később szükségünk lesz rá.

$$f'(x) = -b - \frac{a}{1 + d} - \frac{cx^{n-1} n\, (1 - x)^2}{(1 + d)^2} + 2\, \frac{cx^n\, (1 - x)}{(1 + d)^2} \tag{42}$$

Vegyük most c-t, d-t és n-et rögzítettnek és keressük a megoldásokat az a és b kontroll paraméterek függvényében.

Az előző fejezetben láthattunk egy elméleti összefoglalót a parametrikus reprezentáció módszeréről. Most erről a konkrét modellről igyekszünk minél több információt összegyűjteni a PRM segítségével. Megadjuk a D és a H-görbét, vizsgálni fogjuk magukat a görbéket és azt is, hogy mit mondanak mindezek nekünk a megoldások viselkedéséről, azaz a stacionárius pontok számáról, stabilitásáról és a periodikus pályákról.

4.2. A D-görbe vizsgálata

A D-görbe f valós gyökeiről nyújt információt. Ezek száma megváltozik a D-görbén áthaladva, tehát ez a görbe a síkot olyan tartományokra osztja, ahol a stacionárius pontok száma állandó (3.1). A D-görbe egymáshoz csúcspontokban kapcsolódó ívekből áll, itt az ívekhez húzott érintő egyenesek egybeesnek, ezen kívül egy íven az érintő egyenes az ív ugyanazon oldalán halad (3.2. Tétel szerint).

Esetünkben az f függvény olyan alakú, mint (18):

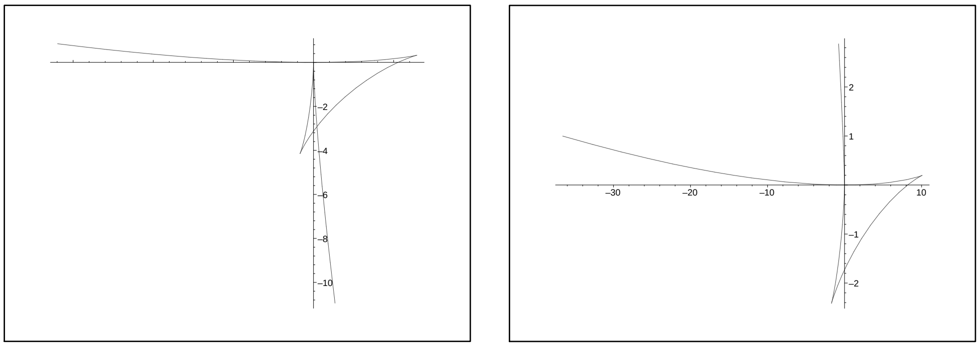
$$f(x,a,b) = -\frac{c}{(d+1)^2}x^n(1-x)^2 + a\left(\frac{1-x}{d+1}\right) - bx \tag{43}$$

Így (20) alapján a D-görbe a következő módon paraméterezhető ($D(x) = (a(x), b(x)) \quad x \in [0,1]$):

$$a(x) = -\frac{cx^n\left(x-1\right)\left(x\left(n+1\right)+1-n\right)}{1+d}$$

$$b(x) = \frac{c\left(x\left(n+1\right)-n\right)\left(x-1\right)^2 x^{n-1}}{\left(1+d\right)^2}$$

Ha $n = 1$, akkor $b(x)$-ben x kitevője 0, ezért ezek után tegyük fel, hogy $n > 1$. Mivel $D(0) = D(1) = (0,0)$, így a D-görbe metszi saját magát az (a,b) sík origójában.



$n = 2k+1$ $\qquad$ $n = 2k$

1. ábra.

A D-görbe képe $d = 1, c = 200, x \in [-0.2, 1.1], n = 2k+1, k = 1$ illetve $n = 2k, k = 2$ esetén. Más k értékekre a görbe jellege nem változik

Nézzük meg, hogyan is néz ki a görbe. Legyen $n = 2k$ illetve $n = 2k+1$ a paritástól függően. A $k \geq 1$ esetben kapottakat mutatja az 1. ábra.

Az $x \in [0,1]$ esetén az origóból induló és oda érkező görbét kapunk, viszont a hosszabb intervallum esetén jobban látszik a görbe alakja.

Az ábrák arra engednek következtetni, hogy a csúcsok száma csak n paritásától függ, és a görbe jellegét nem befolyásolja c és d értéke. Lássuk be most az elsőt analitikusan. Tudjuk (3.2. Tétel alapján), hogy a D görbének egy x_0 pontban pontosan akkor van csúcsa, ha:

$$\lim_{x \to x_0+0} \frac{D'(x)}{|D'(x)|} = - \lim_{x \to x_0-0} \frac{D'(x)}{|D'(x)|}$$

Vezessük be a

$$h(x) = (n\,x - n + x)\,(x + n\,x + 1 - n) + x\,(x-1)\,(n+1)$$

kifejezést, ezzel a görbe deriváltja, (22)-t felhasználva a következő egyszerű alakba írható:

$$D'(x) = h(x)\frac{cx^{n-2}}{d+1}\left(-x, \frac{x-1}{d+1}\right).$$

Ebből pedig:

$$\frac{D'(x)}{|D'(x)|} = \operatorname{sgn}\left(h(x)\frac{cx^{n-2}}{d+1}\right)\frac{1}{\sqrt{x^2 + \frac{(x-1)^2}{(d+1)^2}}}\left(-x, \frac{x-1}{d+1}\right)$$

Így $x \mapsto h(x)x^{n-2}$ előjelváltásait kell vizsgálni. Ha n páratlan, akkor x^{n-2} a 0-ban előjelet vált, és látható, hogy $n > 1$ esetén h-nak nincs gyöke 0-ban. Tehát ekkor eggyel több csúcs van, mint ha n páros. Alakítsuk át $h(x)$-et és keressük meg a gyökeit:

$$h(x) = x^2(n^2 + 3n + 2) - x(2n^2 + 2n) + n^2 - n$$

$$x_{1,2} = \frac{2n^2 + 2n \pm \sqrt{8n^2 + 8n}}{2(n^2 + 3n + 2)}$$

A gyökök egy kicsit szebb alakban:

$$x_{1,2} = \frac{n(n+1) \pm \sqrt{2n(n+1)}}{(n+1)(n+2)}$$

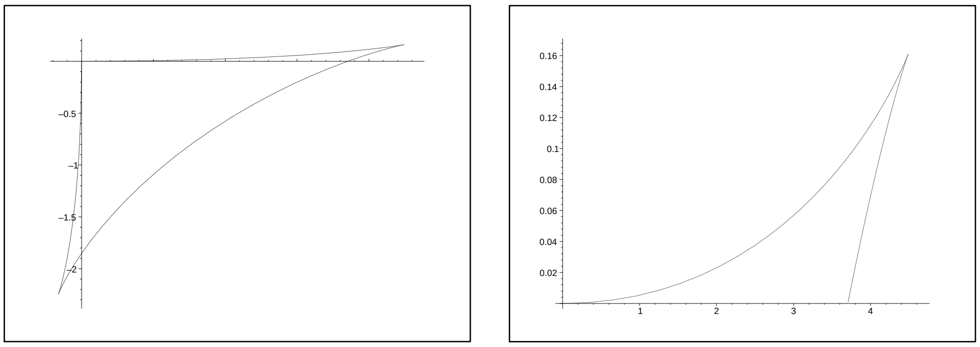
Könnyen ellenőrizhető, hogy $n > 1$-re mindkét gyök pozitív és mindig különbözőek és $x_{1,2} < 1$. Ezekből már adódik, hogy az előjelváltások és így a csúcsok száma is kettő, ha n páros és három, ha n páratlan.

Ezek után megfogalmazhatjuk a következő tételt:

4.1. Tétel. *Ha a D-görbe által határolt véges tartományból vesszük az (a, b) értékeket, akkor három, egyébként pedig egy stacionárius pontja van a (36)-(37) által megadott rendszernek.*

Bizonyítás: Rögtön következik a 3.1. és a 3.2. Tétel felhasználásával, a D-görbe fenti jellemzéséből. ■

Gyakorlati szempontból minket a pozitív (a, b) értékekhez tartozó stacionárius pontok viselkedése érdekel $x \in [0, 1]$ esetén. Így tulajdonképpen elegendő a D-görbe pozitív kvadránsba eső részét vizsgálni.



2. ábra. A D-görbe $x \in [0, 1]$ esetén, illetve a pozitív kvadránsba eső része

Látható, hogy a belső részből három, a külsőből pedig egy érintőt lehet húzni, bár már csak a görbe egyik csúcsa esik ebbe a részbe (2. ábra).

4.3. Nyereg-csomó bifurkáció

Térjünk át az egyensúlyi pontok kvalitatív vizsgálatára. Vezessük be a következő jelöléseket:

$$\begin{aligned} P(x, y) &:= \dot{x} = a(1 - x - y) - bx - cx^n(1 - x - y)^2 \\ Q(x, y) &:= \dot{y} = d(1 - x - y) - y \end{aligned}$$

A Jacobi-mátrix determinánsának előjelére lesz szükségünk ahhoz, hogy megállapítsuk: a stacionárius pont nyereg típusú-e, ugyanis, ha nyereg típusú, akkor negatív az előjel, ha nem, akkor pedig pozitív. Számoljuk ki J-t:

$$J(x,y,a,b) = \begin{pmatrix} -a-b-cnx^{n-1}(1-x-y)^2+2cx^n(1-x-y) & -a+2cx^n(1-x-y) \\ -d & -d-1 \end{pmatrix} \tag{44}$$

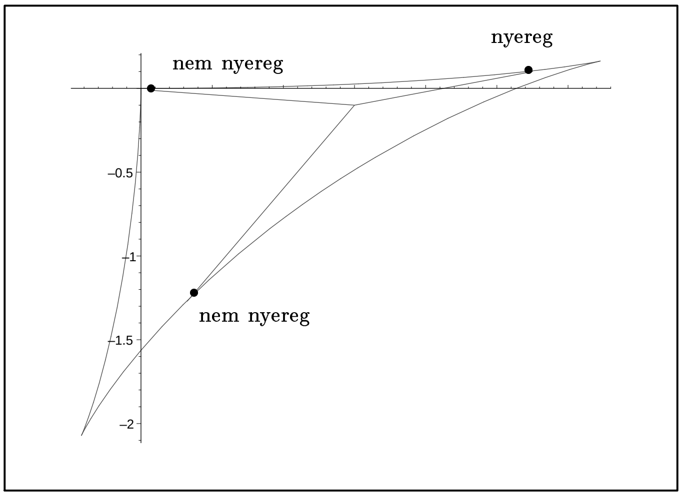
Mivel itt teljesülnek a 3.3. Tétel feltételei, így a determinánst nem kell közvetlenül kiszámolni, hanem a (33) egyenletből megadható. Vegyük észre, hogy a 3.3. Tételben definiált $f(x)$ pontosan megfelel az általunk (41)-ben megadott $f(x)$ függvénynek.

Ezek alapján

$$\det J(x) = -(d+1)f'(x),$$

így elég $f'(x)$ előjelét vizsgálni. Mivel $f'(x)$ folytonos függvény, csak úgy válthat előjelet, hogy közben felveszi a nulla értéket. Ha valamely (a,b) paraméterértékek mellett x stacionárius pont, azaz $f(x) = 0$ és $f'(x) = 0$, akkor az (a,b) pont rajta van a D-görbén. Ez azt jelenti, hogy a D görbe által határolt tartományokon a determináns előjele nem változik.

A görbén kívül egyetlen stacionárius pont található. A $(0,1)$ paraméterpárhoz tartozó egyetlen stacionárius pont a $(0, d/(d+1))$, ahol $\det J = 1+d$, ha $n > 1$, és $\det J = 1 + d + c/(d+1)$, ha $n = 1$. Tehát $\det J$ mindig pozitív a külső tartományban, így az itt lévő stacionárius pont nem nyereg típusú.

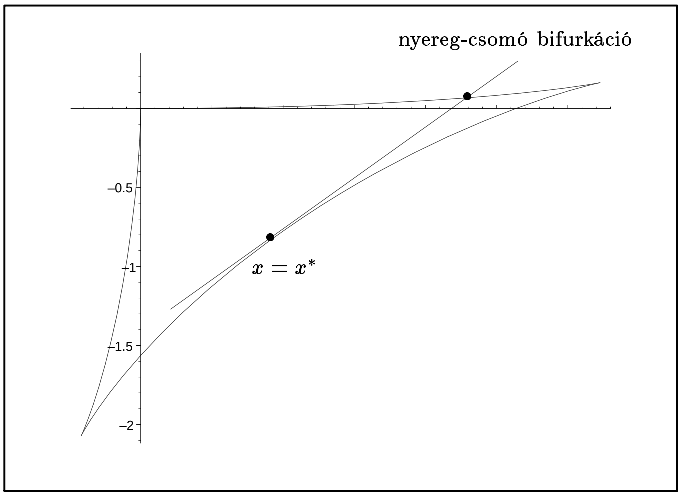


3. ábra.

A D-görbén belüli paraméterekhez három stacionárius pont tartozik, ezek közül a középső nyereg típusú, a másik kettő nem.

Nézzük a belső tartományt. Válasszunk egy tetszőleges $x \in [0,1]$ értéket. A D-görbéhez az x ponton át húzott érintőt az érintési pont $(a(x), b(x))$ két részre osztja. Az $f'(x,a,b)$ előjele különböző ezen a két részen, $\det J > 0$ azon a félegyenesen, mely kimegy a külső tartományba. Tehát amikor három stacionárius pont van, akkor a középső nyereg típusú a másik kettő pedig nem. Ezt szemlélteti a 3. ábra.

Az x-hez tartozó érintő egyenesen mozogva bifurkáció lép fel, ahogy átmegyünk az érintési ponton $(a(x), b(x))$. Az érintési pont közelében a belső tartományban vagyunk, ahol három stacionárius pont van $x, x^*(a,b), x^{**}(a,b)$ bármely adott (a,b) paraméterpár esetén. Az x pont nyereg típusú az egyik félegyenesen a másikon pedig nem az. Ezalatt egy másik stacionárius pont, mondjuk x^* pont fordítva viselkedik. A találkozási pontban ez a két megoldás összeolvad, azaz $x = x^*$. A harmadik stacionárius pont nem játszik szerepet ebben a bifurkációban. Továbbhaladva a külső tartomány felé, az érintő egyenes átmetszi a D-görbét és ebben a pontban x és x^* mint stacionárius pont eltűnik (ezt hívjuk nyereg-csomó bifurkációnak). A fenti folyamatot mutatja be a 4. ábra.



4. ábra.

Bifurkációk az érintőn haladva. Először két stacionárius pont összeolvad, majd nyereg-csomó bifurkáció következik be.

4.4. A H-görbe vizsgálata

A (36)-(37) rendszer stacionárius pontjainak stabilitását a Jacobi-mátrix nyomának előjele adja meg. Az előbbiekben bevezetett $J(x,y,a,b)$ kifejezésbe (44) helyettesítsük be (40)-t, így ez már nem függ y-tól. Jelölje a kapott mennyiséget $J(a,b,x)$. Vizsgáljuk ezek után a következő görbét:

$$H = \{(a,b) \in \mathbb{R}^2 : \exists x \in \mathbb{R}, f(x) = \mathrm{tr}J(a,b,x) = 0\}.$$

Számoljuk ki J nyomát és az előzőekhez hasonlóan fejezzük ki a-t és b-t x függvényében az $f(a,b,x) = 0$ és a $trJ(a,b,x) = 0$ egyenlet, illetve (40) segítségével:

$$\mathrm{tr}J(a,b,x) = \partial_x P(x,y) + \partial_y Q(x,y) =$$

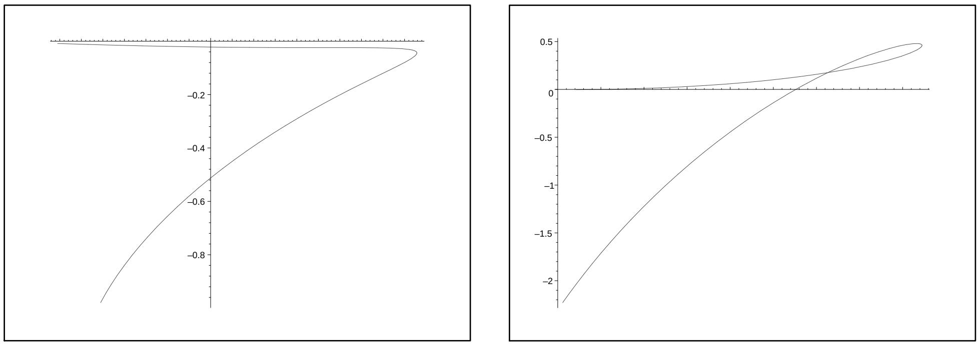
$$= -a - b - cx^{n-1}n\left(1 - x - \tfrac{d(1-x)}{1+d}\right)^2 + 2\,cx^n\left(1 - x - \tfrac{d(1-x)}{1+d}\right) - 1 - d$$

$$B(x) = \frac{cx^n\left((x-1)^2(1+d+n)+n(2-x)\right)+d(x-1)\left(d^2+3\,d+3\right)-1-cx^{n-1}n+x}{(1+d)^2(xd+1)}$$

$$A(x) = -\frac{cx^n\,(x-1)\,(x+1+n\,(x-1)+2\,xd)+x\,(1+d)^3}{(1+d)\,(xd+1)} \tag{45}$$

Ezen paraméterezéssel adott görbét fogjuk a korábbi jelölésekkel összhangban H-görbének hívni.

Nézzük meg, milyen jellegű görbét kapunk c különböző értékeire (5. ábra):

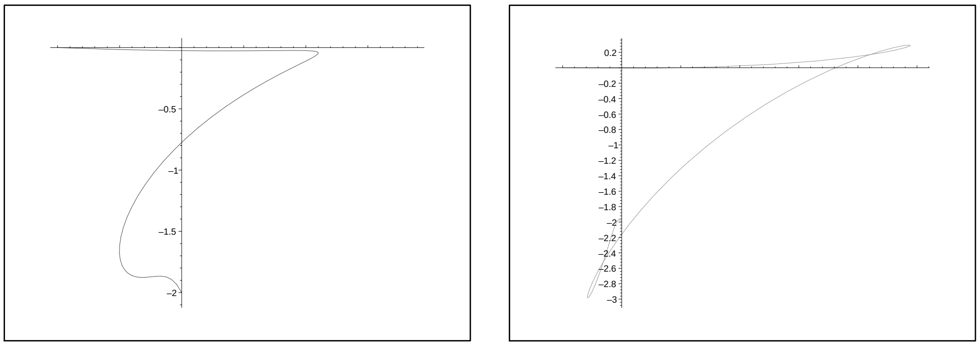


$c = 60$ $\qquad$ $c = 280$

5. ábra.

A H-görbe képe, miközben c értékét változtatjuk. Látható, hogy a c növelésével a görbén egy hurok keletkezik. A konkrét értékek: $d = 1, n = 4, x \in [0.5, 0.99]$, $c = 60$ illetve $c = 280$.

Az $x \in [0,1]$ esetben a görbe méginkább tekervényes képet mutat (6. ábra):

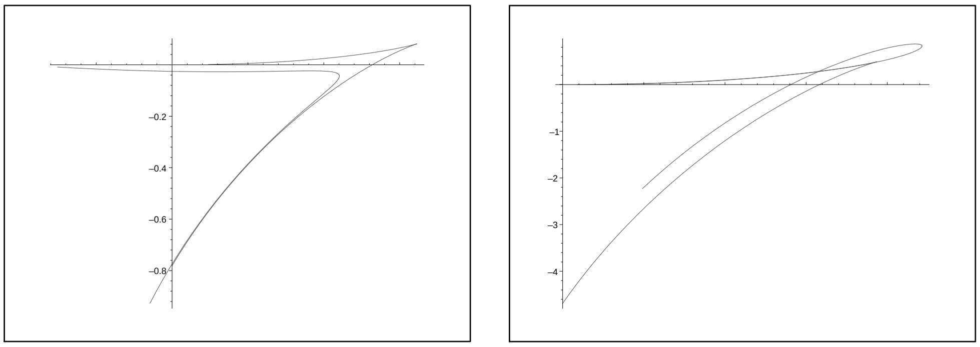


$c = 50$ $\qquad$ $c = 145$

6. ábra.

A H-görbe hosszabb intervallumon megrajzolva ($x \in [0,1]$), $c = 50$ és $c = 145$ esetén, a többi érték azonos az előző ábrán használtakkal.

Érdekes jelenségnek lehetünk szemtanúi, ha a D és a H-görbét együtt ábrázoljuk és így változtatjuk például c értékeit (7. ábra).



$c = 50$ $\qquad$ $c = 300$

7. ábra.

A D és a H-görbe közös koordináta rendszerben ábrázolva ($d = 1, n = 3, x \in [0.5, 0.99]$), $c = 50$ illetve $c = 300$ értékekkel. Látható, ahogy a H-görbe által alkotott hurokban megtalálható a D-görbe egy csúcsa.

A H-görbe jelentősége a következő. Válasszunk ki egy pontot a görbén (P), amely x-hez tartozik. Innen érintőt húzva a D-görbéhez, az érintési ponthoz tartozó paraméterérték éppen x lesz. Ugyanis a H-görbén kiválasztott pont (a,b) koordinátái definíció szerint olyanok, hogy $f(x,a,b) = 0$, azaz x stacionárius pont. Viszont az x stacionárius ponthoz tartozó (a,b) értékek pont a D-görbe megfelelő érintőjén helyezkednek el az érintő tulajdonság értelmében (3.1. Tétel).

A P pont két félegyenesre osztja az érintőt, ezeken a Jacobi-mátrix nyomának az előjele különböző. Ha a Jacobi-mátrix determinánsának előjele pozitív x-ben, akkor Hopf-bifurkáció léphet fel a H-görbén áthaladva. Ha P a D-görbe külső tartományában helyezkedik el, akkor ez teljesül, hiszen itt a determináns mindig pozitív. (Ezt az előző szakaszban beláttuk.)

4.5. Hopf-bifurkáció

Vizsgáljuk meg, hogy a H görbe mentén mikor lesz az adott paraméterekhez tartozó x pontban a Jacobi mátrixnak két tisztán képzetes sajátértéke. Ez ugyanis szükséges ahhoz, hogy a görbén áthaladva Hopf-bifurkáció lépjen fel (ekkor $\det J > 0$).

4.2. Tétel. *Legyen $cdx^n(n+1)(1-x)^2 > (d+1)^3$. Ekkor pozitív x értékek esetén a (36)-(37) rendszer Jacobi-mátrixának, az x-hez tartozó stacionárius pontban, mindig két tisztán képzetes sajátértéke van, ha a paraméterértékek a H-görbe x-hez tartozó pontjának koordinátái.*

Bizonyítás: Számoljuk ki J sajátértékeit:

$$(\partial_x P(x,y) - \lambda)(\partial_y Q(x,y) - \lambda) - \partial_x Q(x,y)\partial_y P(x,y) = 0$$

Ebből:

$$\lambda^2 - \lambda(\partial_x P(x,y) + \partial_y Q(x,y)) - \partial_x Q(x,y)\partial_y P(x,y) + \partial_x P(x,y)\partial_y Q(x,y) = 0$$

Mivel $\partial_x P(x,y) + \partial_y Q(x,y)$ nem más, mint a nyom, ami a H-görbe mentén nulla, így

$$\lambda^2 = \partial_x Q(x,y)\partial_y P(x,y) - \partial_x P(x,y)\partial_y Q(x,y) = -\det J < 0$$

azaz

$$\det J > 0$$

lesz a feltétel. Felhasználva, hogy

$$\partial_x P(x,y) + \partial_y Q(x,y) = 0 \Rightarrow \det J = -(\partial_y Q(x,y))^2 - \partial_x Q(x,y)\partial_y P(x,y)$$

kapjuk a következő feltételt:

$$- (d+1)^2 + d\left(2cx^n\left(\frac{1-x}{d+1}\right) - a\right) > 0. \qquad (46)$$

Esetünkben $a = A(x)$. Helyettesítsük be ide (45)-t, és hozzuk egyszerűbb alakra a kifejezést:

$$\frac{cdx^n(n+1)(1-x)^2 - (d+1)^3}{xd+1} > 0$$

Mivel $xd+1 > 0$, így elgendő, ha

$$cdx^n(n+1)(1-x)^2 > (d+1)^3,$$

ami a tétel feltételei miatt fennáll. ■

Tehát a vizsgált tartományban, ha teljesül az adott egyenlőtlenség, a H-görbe mentén fennáll a Hopf-bifurkáció szükséges feltétele (2.6. Tétel).

Jelenleg a paraméterterünk két dimenziós, mi viszont egy paraméter változtatásával szeretnénk vizsgálni, hogy mikor lép fel Hopf-bifurkáció (ez felel meg annak, hogy a H-görbén áthaladva vizsgáljuk a rendszert, hiszen ilyenkor valamilyen görbe mentén haladunk, ugyanis a paraméterértéket folytonosan kell változtatni). Azaz keresünk egy például t-vel paraméterezett görbét (egyenest), legyen ez $(a^*(t), b^*(t))$, mely mentén szeretnénk haladni. Ekkor t lesz a bifurkációs paraméter, és így most már tudjuk egy dimenzióban vizsgálni a problémát.

Mi legyen az $(a^*(t), b^*(t))$ görbe?

A Hopf-bifurkációnál a paramétert változtatjuk, azonban végig ugyanazt a stacionárius pontot tekintjük. Rögzítsük most x-et. Az érintőtulajdonságból következik, hogy egy x stacionárius ponthoz tartozó (a, b) paraméterértékek, a D-görbéhez az $(a(x), b(x))$ ponton át húzott érintő egyenesen helyezkednek el. Tehát legyen

$$(a^*(t), b^*(t)) := D(x) + tD'(x) \qquad t \in \mathbb{R} \qquad (47)$$

Innentől kezdve tegyük fel, hogy x nem gyöke $|D'(x)|$-nek és x-ben nincs közös pontja a két görbének, azaz az x ponthoz tartozó érintőik nem esnek egybe. Mivel nekünk csak az érintő meredeksége kell, leegyszerűsíthetjük a képletet. Pontosabban

$$D'(x) = h(x)\frac{cx^{n-2}}{d+1}\left(-x, \frac{x-1}{d+1}\right)$$

helyett elegendő

$$\left(-x, \frac{x-1}{d+1}\right).$$

Tehát az új forma

$$(a^*(t), b^*(t)) := D(x) + \left(-tx, t\frac{x-1}{d+1}\right) \qquad t \in \mathbb{R} \tag{48}$$

Legyen (a', b') az a pont, amely a H-görbén az x értékhez tartozik, itt az $(a^*(t), b^*(t))$ egyenes átmetszi a H-görbét (ezért kellett feltenni, hogy nem esnek egybe az érintők). Az egyszerűség kedvéért ne $D(x)$ tartozzon $t = 0$-hoz, hanem toljuk el a paraméterezést úgy, hogy ez (a', b') legyen. Így

$$(a^*(t), b^*(t)) := (a', b') + \left(-tx, t\frac{x-1}{d+1}\right) \qquad t \in \mathbb{R}. \tag{49}$$

Ez természetesen ugyanazt az egyenest határozza meg.

Kérdés az, hogy t kis pozitív, illetve negatív értékeire a Jacobi-mátrix sajátértékeinek valós része előjelet vált-e (az imént láttuk be, hogy $t = 0$ esetén ez 0 mert itt rajta van a H-görbén). Ez ugyanis elégséges feltételt adna az egyensúlyi pont stabilitásváltására.

4.3. Tétel. *Tegyük fel, hogy teljesül a 4.2. Tétel feltétele, azaz: $cdx^n(n+1)(1-x)^2 > (d+1)^3$. Tekintsük a (36)-(37) rendszer Jacobi-mátrixát az $(x, a^*(t), b^*(t))$ helyen. Ekkor a t paraméter kis pozitív (negatív) értékei esetén a Jacobi-mátrix sajátértékei valós részének előjele pozitív (negatív).*

Bizonyítás: Legyen

$$(a, b) = \left(a' - tx, b' + t\frac{x-1}{d+1}\right), \tag{50}$$

ahol $-\epsilon < t < \epsilon \quad \epsilon > 0$. Számoljuk ebben a pontban J sajátértékeit.

$$\lambda_{1,2} = \frac{(\partial_x P + \partial_y Q) \pm \sqrt{(\partial_x P + \partial_y Q)^2 - 4\left(\partial_x P \partial_y Q - \partial_x Q \partial_y P\right)}}{2}$$

$$\partial_x P + \partial_y Q = -a - b - cx^n n \left(\frac{1-x}{1+d}\right)^2 x^{-1} + 2cx^n \left(\frac{1-x}{1+d}\right) - 1 - d$$

Mivel (a', b') rajta van a Hopf-görbén, ahol nulla a nyom, így

$$-a' - b' - cx^n n \left(\frac{1-x}{1+d}\right)^2 x^{-1} + 2cx^n \left(\frac{1-x}{1+d}\right) - 1 - d = 0$$

Tehát

$$(\partial_x P + \partial_y Q)(a,b) = tx - t\frac{x-1}{d+1} = t\left(x - \frac{x-1}{d+1}\right).$$

Viszont

$$\left(x - \frac{x-1}{d+1}\right) = \frac{xd+1}{d+1} > 0 \qquad x > 0,$$

így $(\partial_x P + \partial_y Q)(a,b)$ előjele megegyezik t előjelével.
Vizsgáljuk most a gyökjel alatti mennyiségeket:

$$(\partial_x Q \partial_y P)(a,b) = -d\left(-a + 2cx^n\frac{x-1}{d+1}\right) =$$

$$= -d\left(-a' + tx + 2cx^n\frac{x-1}{d+1}\right)$$

$$(\partial_x P \partial_y Q) = (-a - b - cnx^{n-1}(1-x-y)^2 + 2cx^n(1-x-y))(-d-1)$$

Ide írjuk be (50)-t, és használjuk fel hogy a nyom nulla (a', b')-ben:

$$(\partial_x P \partial_y Q) = \left(t\left(\frac{xd+1}{d+1}\right) + d + 1\right)(-d-1)$$

Ha a gyökjel alatti részről belátjuk, hogy kisebb nullánál amikor $-\epsilon < t < \epsilon \quad \epsilon > 0$, az azt jelenti, hogy a sajátértékek valósrészének előjele megegyezik t előjelével. Ugyanis ezt $(\partial_x P(x,y) + \partial_y Q(x,y))(a,b)$-ről beláttuk és ha a gyökjel alatti mennyiség tisztán képzetes számokat ad, akkor ezek a valós részt nem változtatják meg.

A vizsgálandó képlet kicsit átalakítva

$$t^2\left(\frac{xd+1}{d+1}\right)^2 + 4t + 4\left((d+1)^2 - d\left(-a' + 2cx^n\frac{x-1}{d+1}\right)\right).$$

Mivel t^2 együtthatója pozitív, t függvényében egy parabolát kapunk, melynek minimuma van. Ha belátjuk, hogy a gyökei ellenkező előjelüek, azzal beláttuk, hogy a nulla kis környezetében ez a függvény negatív értékeket vesz fel.

$$t_{1,2} = \frac{-4 \pm \sqrt{4^2 - 4\left(\frac{xd+1}{d+1}\right)^2 4\left((d+1)^2 - d\left(-a' + 2cx^n\frac{x-1}{d+1}\right)\right)}}{2\left(\frac{xd+1}{d+1}\right)^2}. \tag{51}$$

(46) miatt

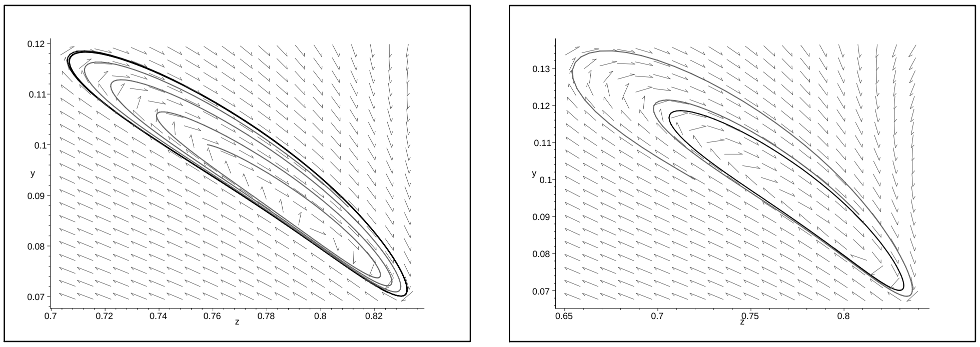
$$\left((d+1)^2 - d\left(-a' + 2cx^n\frac{x-1}{d+1}\right)\right) < 0$$

így az (51)-ben szereplő gyökjel alatt pozitív szám áll és az egész gyökös kifejezés nagyobb, mint 4. Tehát az egyik gyök pozitív, a másik pedig negatív lesz. ■

Ezzel beláttuk, hogy a H-görbén a fentiekben megadott irányban áthaladva Hopf-bifurkáció lép fel, hiszen teljesülnek a Hopf-tétel feltételei (2.6. Tétel).

A Hopf-bifurkációhoz hozzátartozik még egy stabil vagy instabil határciklus megjelenése, illetve eltűnése. Konkrét értékek esetén ez kiszámolható, de mi itt nem foglalkozunk ezzel a kérdéssel.

Nézzünk egy konkrét példát a Hopf-bifurkációra. A 8. ábrán jól kivehető egy stabil határciklus. Mind a kívülről, mind pedig a belülről induló megoldások pályái rátekerednek a határciklusra, melyen belül van egy instabil stacionárius pont. Itt a t bifurkációs paraméter negatív.



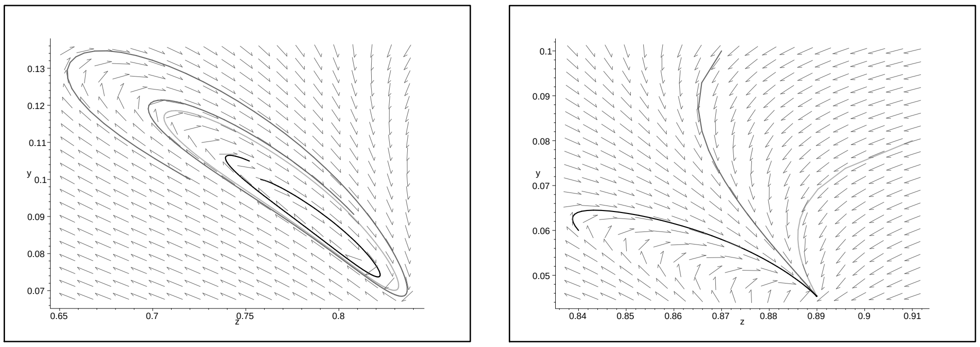
$c = 60$ $c = 280$

8. ábra.

Stabil határciklus kivülről, illetve belülről rátekeredő pályákkal

$n - 2, d = 0.5, c = 100, a = 11.9, b = 0.57, t = -0.01$ értékek esetén

A 9. ábrán együtt látható a t pozitív, illetve negatív értéke mellett kialakuló fáziskép. A bifurkáció során a stabil határciklus eltűnik, és az instabil stacionárius pont stabilissá válik.



$c = 60$ $\qquad\qquad$ $c = 280$

9. ábra.

Hopf-bifurkáció: a stabil határciklus eltűnik, az instabil stacionárius pontból stabilis lesz, ahogy t előjele megváltozik($t = -0.01, t = 1$)

4.6. Periodikus megoldások

Periodikus megoldásokról általában jóval könnyebb nem létezést, mint létezést bizonyítani.

A létezés bizonyítására egy viszonylag jól használható kritérium az alábbi, mely a Poincarré-Bendixson tétel következménye. Ha van egy korlátos, pozitívan invariáns tartomány a fázissíkon, melyen belül nincs stabil stacionárius pont, akkor ezen a tartományon belül található egy stabil határciklus.

A vizsgált esetre lefordítva: M-ről tudjuk, hogy pozitívan invariáns. Vegyünk egy D-görbén kívüli paraméterértéket. Ehhez egyetlen stacionárius pont tartozik, melyről ha belátjuk, hogy instabil, akkor garantáltan van a rendszernek periodikus megoldása a fentiek értelmében.

A nem létezés bizonyítására a korábbiakban már említett Dulac-kritériumot szeretnénk alkalmazni (2.3. Tétel), $G = M \quad B = 1$ szereposztással.

$$\partial_1(BX) + \partial_2(BY) = \partial_x P(x,y) + \partial_y Q(x,y) =$$

$$= -a - b - cx^{n-1}n\ (1-x-y)^2 + 2\,cx^n(1-x-y) - 1 - d =$$

$$= \underbrace{cx^{n-1}}_{>0}\underbrace{(1-x-y)}_{>0}[-n(1-x-y)+2x]\underbrace{-a-b-d-1}_{<0}$$

Ha teljesül, hogy

$$[-n(1-x-y)+2x]$$

előjele nem változik a tartományon, akkor nem létezik rajta periodikus pálya.

Tehát a következő feltételek valamelyikének kellene fennállnia az egész M-n:

$$x < \frac{n}{n+2}(1-y), \qquad x > \frac{n}{n+2}(1-y)$$

Ha ez teljesül, akkor az $x = \frac{n}{n+2}(1-y)$ egyenes és a koordináta tengelyek által határolt tartományon belül, vagy a kimaradó részen nincs periodikus pálya. Az első rész n növelésével ugyan közelít M határához, de nem éri el azt, így ez nem zárja ki, hogy legyen M-en belüli periodikus pálya.

Olyan feltétel kellene, amelyben csak a konstansok és a paraméterek szerepelnek. Ez ugyanis már a teljes tartományról adna információt.

4.4. Tétel. *Amennyiben teljesül, hogy*

$$0 < a+b+d+1-2c \tag{52}$$

akkor az M tartományon belül nincs periodikus pálya.

Bizonyítás: Belátjuk, hogy ezen feltétel mellett teljesülnek a Dulac-kritérium feltételei, azaz

$$\partial_x P(x,y) + \partial_y Q(x,y) =$$

$$= cx^{n-1}(1-x-y)[-n(1-x-y)+2x] - a - b - d - 1 < 0 \qquad (x,y) \in M.$$

A rendszerre vonatkozó feltételek miatt

$$c\underbrace{x^{n-1}}_{<1}\underbrace{(1-x-y)}_{<1}\underbrace{[-n(1-x-y)+2x]}_{<2} < 2c$$

A tétel feltétele miatt pedig,

$$2c < a+b+d+1$$

így

$$cx^{n-1}(1-x-y)[-n(1-x-y)+2x] < a+b+d+1.$$

Ezzel a tételt beláttuk. ∎

A tétel következményeként kapjuk azt is, hogy ha $0 < a+b+d+1-2c$ és egyetlen stacionárius pont van M-ben, akkor annak stabilisnak kell lennie.

Hivatkozások

[1] Arnold, V.I.: *A differenciálegyenletek elméletének geometriai fejezetei*, Műszaki könyvkiadó, 1988

[2] Arnold, V.I.: *Közönséges differenciálegyenletek*, Műszaki könyvkiadó, 1987

[3] Arnold, V.I., *The Theory of Singularities and its Applications*, Cambridge University Press, Cambridge, 1991.

[4] Chillingworth, D.R.J.: *Differentiable Topology with a View to Applications.* Pitman: London, 1976.

[5] Eigenberger, G. Kinetic instabilities in heterogeneously catalyzed reactions I, *Chem. Eng. Sci.* **33**, 1255-1261, 1978.

[6] Farkas, H., Simon, P.L., Use of the parametric representation method in revealing the root structure and Hopf bifurcation, *J. Math. Chem.* **9**, 323-339, 1992.

[7] Gomes, M.G.M., King, G.P., Bistable Chaos. II. Bifurcation analysis, *Phys. Rev. A* (3) **46**, 3100-3110, 1992.

[8] Gray, P., Scott, S.K., *Chemical Oscillations and Instabilities: Non-linear Chemical Kinetics*, Clarendon Press, Oxford, 1994.

[9] Guckenheimer, J., Multiple bifurcation problems for chemical reactors, *Phys. D* **20**, 1-20, 1986.

[10] Guckenheimer, J., Holmes, P., *Nonlinear Oscillations, Dynamical Systems and Bifurcations of Vector Fields*, Springer-Verlag, New York, 1983.

[11] Guckenheimer, J., Myers, M., Sturmfels, B., Computing Hopf bifurcations I. *SIAM J. Numer. Anal.* **34**, 1-21, 1997.

[12] Hale, J., Kocak, H.: *Dynamics and Bifurcations*, Springer, 1991

[13] Ionescu, N. I., Danciu, T., Overall kinetic model for oscillating catalytic oxidation of methanol, *React. Kin. Catal. Lett.* **47**, 105-110, 1992.

[14] De Kepper, P., Boissonade, J., From bistability to sustained oscillations in homogeneous chemical systems in a flow reactor mode, in *Oscillations and Traveling Waves in Chemical Systems,* eds.: R.J. Field and M. Burger, (Wiley, New York), pp. 223., 1985.

[15] Kertész, V.: Global mathematical analysis of the "Explodator" *Nonlin. Anal. TMA 8*, 941-961, 1984.

[16] Koper, M.T.M., Bifurcations of mixed-mode oscillations in a three-variable autonomous van der Pol-Duffing model with a cross-shaped phase diagram, *Phys. D* **80**, 72-94, 1995.

[17] Kuznecov, Y.A., *Elements of Applied Bifurcation Theory*, Springer-Verlag, New York, 1995.

[18] Lotka, A. J.: Undamped oscillations derived from the law of mass action. *J. Amer. Chem. Soc. 42* 1595-1599, 1920.

[19] Lynch, D.T., Wanke, S.E. *Can. J. Chem. Eng.* **59** 766, 1981

[20] Simon, P.L., Elizabeth Hild, Henrik Farkas: Relationships between the discriminant curve and other bifurcation diagrams, *to appear*, 2001.

[21] Simon, P.L., Nguyen Bich Thuy, Farkas, H., Noszticzius, Z., Application of the parametric representation method to construct bifurcation diagrams for highly non-linear chemical dynamical systems, *J. Chem. Soc., Faraday Trans.* **92**(16), 2865-2871, 1996.

[22] Simon, P.L., Farkas, H., Wittmann, M., Constructing global bifurcation diagrams by the parametric representation method, *J. Comp. Appl. Math.* **108**, 157-176, 1999.

[23] Simon L. Péter; Farkas Henrik: The investigation of the root structure of polynomials with the parametric representation method, *Alkalmazott Mat. Lapok* **17**, No.1-2, 41-56, 1993.