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.

Motiváció

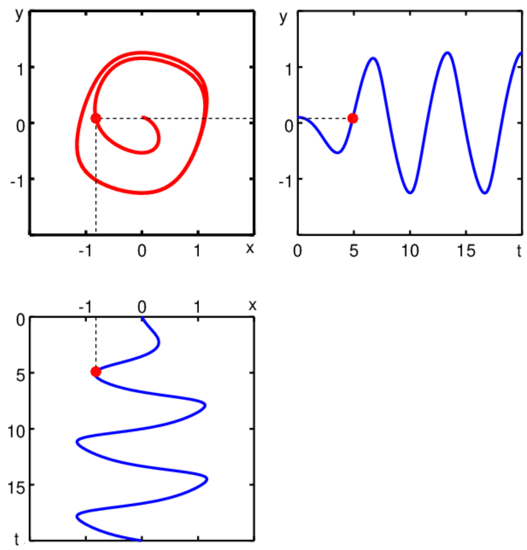
A dinamikai rendszerek (más néven nemlineáris dinamika) tudománya sok különböző tudományterületen segítségünkre lehet, ahol időben változó rendszerekkel foglalkozunk. Ennek oka, hogy a determinisztikus rendszerek változását leíró szabályokat (tipikusan közönséges differenciálegyenlet-rendszereket) vizsgálja általánosan, függetlenül attól, hogy annak változói éppen kémiai koncentrációk, populációk létszámai, helyek és sebességek, vagy termodinamikai változók. Gyakori, hogy különböző tudományterületeken alkotott matematikai modellek ugyanolyanok vagy nagyon hasonló típusúak, így ha az egyiket részletesen megvizsgáltuk, az eredmények egyből átvihetőek a többire. Például ugyanolyan alakú rendszer képes leírni egy oszcillációs reakció (pl.: Belouszov-Zsabotyinszkij reakció) komponens-koncentrációinak, a cirkadián ritmus élettani változóinak (biokémiai reakciók), vagy egy tranzisztoros áramkör feszültségének időbeli változását. A második példa kicsit bonyolultabb, mivel itt parciális differenciál-egyenletekről van szó: ugyanaz a modell használható a préritűz, a kémiai hullámok, az idegsejtek kalcium hullámai vagy a középkori pestisjárvány terjedésére.

A dinamikai rendszerek tudományának kialakulása

A dinamikai rendszerek tudománya a közönséges differenciálegyenlet-rendszerek kvalitatív analíziséből alakult ki. Mit is értünk ez alatt?
Egy mérnök vagy természettudós számára nem önmagában a differenciálegyenlet és annak megoldása, mint matematikai probléma az érdekes, hanem valamilyen természeti jelenség vagy gép működésének megértése. A differenciálegyenlet csak egy eszköz, amit ehhez használunk. Egy adott rendszer vizsgálata tipikusan a következő lépésekben történik:
1.) Felírjuk a rendszert modellező differenciálegyenlet-rendszert.
2.) Megkeressük ennek a megoldásait.
3.) A különböző kiindulási értékekhez, különböző paraméterértékekhez tartozó megoldások elemzésével megkapjuk a rendszerünk viselkedését, tulajdonságait.
Komoly probléma, hogy ha kicsit is bonyolult nemlineáris tagok vannak a differenciálegyenletben, akkor a legtöbb esetben nincs analitikus megoldása – azaz a fenti séma elakad a 2. lépésben.
Ezt a problémát kerüli meg a kvalitatív analízis. Rájöttek ugyanis, hogy a differenciálegyenlet-rendszer jobb oldala (ami leírja, hogy a deriváltak mitől és hogyan függenek) önmagában, a megoldás nélkül is hordoz információt a rendszerről. Nyilván kevesebbet, mint a megoldások összessége, de például azt a gyakorlati szempontból fontos kérdést, hogy mit csinál a rendszer hosszú idő után, többnyire meg lehet válaszolni a jobb oldal vizsgálatával.

Alapfogalmak

Rendszer: A rendszer a minket körülvevő világ egy kisebb-nagyobb része, ami valamiért számunkra éppen érdekes. Lehet ez egy cseppnyi reakcióelegy, vagy akár egy galaxis-rendszer is.
Állapotváltozók: Amikor a rendszert modellezzük, akkor az állapotát valamilyen változókkal írjuk le, például a reakcióelegy esetén koncentrációkkal, a galaxis-rendszer esetén a galaxisok koordinátáival és sebességeivel. Ezeket a változókat nevezzük a rendszert meghatározó független állapotváltozóknak. Elsőrendű differenciálegyenlet-rendszer esetén ezek azok a változók, amelyek deriváltjaira felírjuk az egyenleteket, és amelyek időbeli változását megkapjuk megoldásként. Magasabb rendű differenciálegyenleteket elsőrendű rendszerré alakíthatunk át, ezután lehet azokat is dinamikai rendszerként vizsgálni.
A **fázistér** alatt az állapotváltozók által kifeszített teret értjük (ill. két változó egy **fázissík**ot feszít ki). A fázisteret csak az állapotváltozók alkotják, az idő nem jelenik meg külön változóként! Tehát pl. a kémiában a számunkra érdekes koncentrációk vannak a tengelyeken, a mechanikában pedig a hely- és sebességkoordináták. A fázistérben a rendszer egy adott időpontbeli állapota egyetlen ponttal jellemezhető. Ezt az állapotváltozók adott időpontban felvett értéke adja meg.
Trajektória: Ahogy telik az idő, a rendszer és az ezt modellező állapotváltozók értéke megváltozik, ilyenkor a fázistérben a rendszer állapotát megadó pont is arrébb kerül. Ez a pont egy görbét rajzol ki a fázistérben, ez a trajektória (1. ábra).



1. ábra: a változók időfüggését megadó $x - t$ és $y - t$ függvények, és a belőlük származtatható trajektória az $x - y$ fázissíkon.

Dinamikai rendszer: Egy adott rendszer változóinak viselkedését valamilyen szabályok írják le. Dinamikai rendszer esetén ezek a szabályok olyanok, hogy a változók időbeli megváltozására vonatkoznak, és csak a változók adott időpontbeli értékétől függenek (emiatt mondjuk azt, hogy determinisztikus a rendszer). A legismertebb típusuk a differenciálegyenlet-rendszer: a változók időbeli deriváltja adott a változók pillanatnyi értékének függvényeként. Fontos, hogy a deriváltakat leíró függvények nem függhetnek expliciten az időtől: ezeket nevezik autonóm differenciálegyenlet-rendszereknek.
A **determinisztikus rendszer**ben tehát ha ismert a rendszer állapota egy tetszőleges időpontban, akkor ebből (elvileg) kiszámolható a teljes múltja és jövője is, azaz egyetlen pontból a teljes trajektória. (A gyakorlatban persze ez a differenciálegyenlet-rendszer integrálását jelenti, ami többnyire nem végezhető el analitikusan.) A determinizmusból következik, hogy két trajektória nem metszheti egymást: a metszéspontban ugyanis nem lenne egyértelműen eldönthető, hogy melyik trajektórián menjünk tovább.

Stabilitásvizsgálat: A kvalitatív analízis gyakorlati szempontból legfontosabb része az ún. stabilitásvizsgálat, amikor megkeressük a dinamikai rendszer egyensúlyi, ill. stacionárius állapotait, és megvizsgáljuk azok stabilitását.
Stacionárius pontok: Ezek a fázistérnek azok a speciális pontjai, amelyekben az időbeli megváltozás (a deriváltak) értéke nulla. Ha a rendszer kezdeti állapota egy stacionárius pontnak felel meg, elméletileg az idők végezetéig ott marad.
Stabilitás: A gyakorlatban persze mindig van egy kis hiba a kezdeti állapotban, vagy később valamilyen zavar, perturbáció, ami a rendszer állapotát egy kicsit megváltoztatja, azaz a fázistérben egy kicsit kitéríti a stacionárius pontból. Ha ilyenkor a rendszer visszatér a stacionárius pontba, azaz a fázistérben az attól mért távolsága tart a nullához, akkor a stacionárius pontot **aszimptotikusan stabil**nak nevezzük. Ha a kitérítés után a rendszer távolodik a stacionárius ponttól, akkor azt **instabil**nak nevezzük. Ha egyik sem történik, vagyis a stacionárius ponttól ugyanolyan távol marad, mint a kezdeti zavar, akkor **marginálisan stabil**nak nevezzük.
Fáziskép, fázisportré: Az adott dinamikai rendszer viselkedésének grafikus szemléltetésére szolgál a fáziskép, vagy más néven a fázisportré: a fázistér minket érdeklő részét ábrázoljuk, és ebbe trajektóriákat rajzolunk, kellően sűrűn ahhoz, hogy minden pontban legyen elképzelésünk az ottani trajektóriáról. A trajektóriák mellé többnyire **iránymezőt** is rajzolunk, azaz a fázistérben bizonyos sűrűséggel felvett pontokba a deriváltakkal megadott kis vektorokat rajzolunk. Ezek a vektorok a trajektóriáknak érintői; mutatják, hogy az adott pontból merre fejlődik tovább a rendszer (3. ábra).

A fázisportré jellege alapján a rendszerek három típusba sorolhatóak.
Konzervatív rendszer esetén a trajektóriák legtöbbje zárt görbe, ilyenkor 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. Például egy csillapítatlan rezgés mindig ugyanakkora amplitúdóval rezeg, vagy egy bolygó mindig ugyanolyan pályán kering.
Explozív rendszer fázisterében minden vagy majdnem minden trajektória "elmegy a végtelenbe". A rendszer viselkedését az állapotváltozók értékének folyamatos növekedése jellemzi. 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.
Disszipatív rendszer fázisterében van egy vagy több halmaz (tipikus esetben pont vagy zárt görbe), amihez a trajektóriák tartanak. Ezeket **attraktor**nak nevezzük. A rendszer viselkedése ilyenkor egy átmeneti (tranziens) szakasz után állandósult viselkedést mutat. Legegyszerűbb esetben ez egy egyensúlyi állapot, de lehet állandósult oszcilláció vagy még bonyolultabb viselkedés (determinisztikus káosz) is. A lényeg, hogy tetszőleges kezdeti állapotból indulva ugyanaz az állandósult viselkedés alakul ki; illetve előfordulhat az is, hogy több attraktor is van, ilyenkor mindegyiknek megvan a vonzási tartománya (medencéje), amelyeket éles határvonalak (szeparatrixok) választanak el egymástól. Ha az egyik attraktorban levő rendszert csak kicsit zavarjuk meg (vagyis a vonzási medencén belül marad), akkor visszatér az attraktorba, hiszen az stabil. Ha a zavar olyan nagy, hogy a rendszer kikerül az attraktor vonzási medencéjéből, akkor viszont egy másik attraktorhoz fog tartani.

A gyakorlat során kétdimenziós rendszereket fogunk vizsgálni, ezek fázissíkján kétféle attraktor fordulhat elő.
A **pontattraktor** a fázistérnek olyan pontja, amelyet elérve a fázispont tovább már nem mozog, a változók értékei állandósulnak (**egyensúlyi pont**, **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**).

Paraméterek: A differenciálegyenlet-rendszerekben vannak paraméterek is, olyan mennyiségek, amelyek értéke a rendszerre jellemző, időben állandó, ugyanakkor két különböző rendszer vagy kísérlet esetén értékük eltérő lehet. Gondoljunk például a külső hőmérsékletre, az inga hosszára, vagy az oldat pH-jára.
Bifurkáció: Mint fentebb láttuk, a változók kiindulási értékei a megoldásokat (a változók időbeli lefutását) befolyásolják, de az állandósult viselkedést nem. A paraméterek értékeinek módosulása azonban az állandósult viselkedést (az attraktort) is megváltoztatja. Ez a változás általában nem túl drasztikus, a paraméter értékét kissé változtatva kissé megváltoznak a változók egyensúlyi értékei, vagy az állandósult periodikus viselkedés periódusideje és amplitúdója, de a rendszer viselkedésének jellege megmarad. A paraméterek bizonyos értékeinél azonban az állandósult viselkedés drasztikusan megváltozik: például megjelenhet egy újabb stacionárius állapot, vagy a stacionárius állapot helyett megjelenik egy periodikus viselkedés, azaz ilyenkor a rendszer hosszú távú állandósult viselkedésének jellege megváltozik. A fázistérben ez azt jelenti, hogy az attraktorok száma és/vagy típusa megváltozik. Ezt a jelenséget nevezik **bifurkáció**nak. A gyakorlat során periodikus attraktorokkal nem fogunk foglalkozni, úgyhogy elegendő lesz a stacionárius pontok számát és típusát vizsgálni.

Differenciálegyenlet-rendszerek stabilitásvizsgálata

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).

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.
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 <u>kétdimenziós eset</u>et:
(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 $\quad a_{11}x_1 + a_{12}x_2 = 0\ , \quad a_{21}x_1 + a_{22}x_2 = 0$ (2)

algebrai egyenletrendszer megoldásával kapjuk, hogy stacionárius pontja (mint minden lineáris rendszeré) az origó ($x_1 = 0$, $x_2 = 0$).

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:

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

<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)

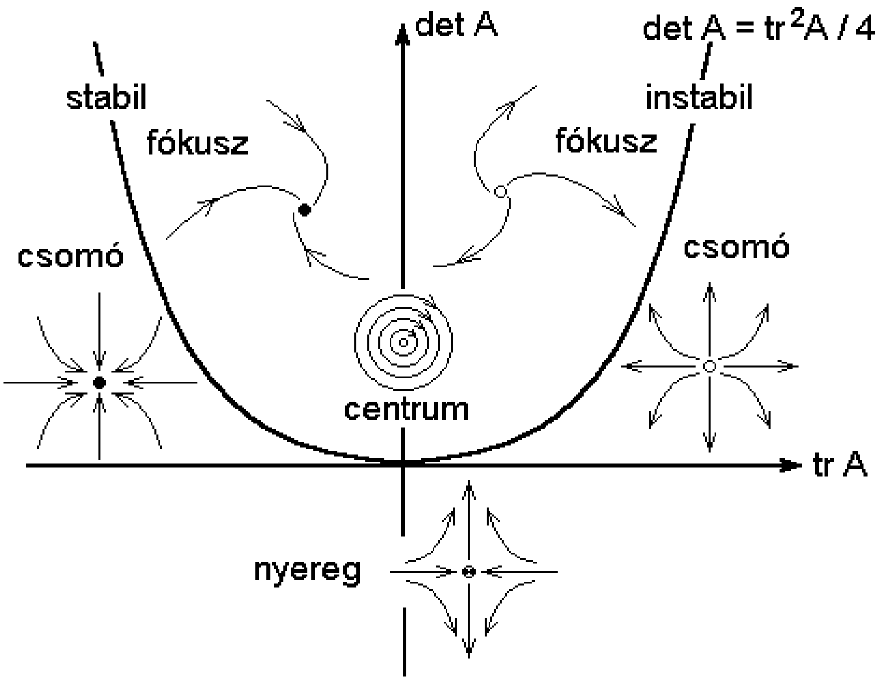
Ezzel a karakterisztikus polinom:

$$\lambda^2 - \mathrm{tr}\mathbf{A} \cdot \lambda + \det\mathbf{A} = 0\ , \tag{6}$$

és a sajátértékek:

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

Ha kiszámoljuk az **A** mátrix determinánsát és nyomát, akkor a sajátértékek kiszámolása nélkül is megállapíthatjuk, hogy milyen típusú a stacionárius pont az alábbi tr**A** – det**A** sík (2. ábra), ill. a lehetséges eseteket összegző I. táblázat segítségével:



2. ábra: a tr**A** – det**A** sík felosztása a stacionárius pont stabilitása szerint

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**

I. táblázat: lineáris rendszer stacionárius pontjának stabilitása
a Jacobi mátrix determinánsa és nyoma alapján

1. 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 $\mathbf{A}$ = p–2;	tr $\mathbf{A}$ = 0, ha	$p_1 = 2$
det $\mathbf{A}$ = –2p+9;	det $\mathbf{A}$ = 0, ha	$p_2 = 4{,}5$
	$(\mathrm{tr}\,\mathbf{A})^2 = 4\,\det \mathbf{A}$, 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 $\underline{\dot{x}} = \underline{f}(\underline{x})$ 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: $\underline{\dot{\xi}} = \underline{f}(\underline{\xi})$ (mivel $\underline{\dot{x}}_0 = 0$, és ezért $\underline{\dot{\xi}} = \underline{\dot{x}}$), és megegyezik a stacionárius pontjuk körüli Taylor-soruk is:

$\underline{\dot{x}} = \underline{f}(\underline{x}) \approx \underline{f}(\underline{x}_0) + \partial\underline{f}/\partial\underline{x} \cdot (\underline{x}-\underline{x}_0) + \ldots$ ill.

$\underline{\dot{\xi}} = \underline{f}(\underline{\xi}) \approx \underline{f}(\underline{0}) + \partial\underline{f}/\partial\underline{\xi} \cdot \underline{\xi} + \ldots$

(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 $\underline{\dot{\xi}} = \partial\underline{f}/\partial\underline{\xi} \cdot \underline{\xi}$ differenciálegyenlet-rendszer pedig a fentiekben vizsgált $\underline{\dot{x}} = \mathbf{A}\underline{x}$ 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.)

2. 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: $x_1 = 0$, $y_1 = 0$
$x_2 = 1$, $y_2 = -1$
$x_3 = -1$, $y_3 = 1$

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 $\mathbf{J}_2 = 2$, tr $\mathbf{J}_2 = 3$, $(\text{tr } \mathbf{J}_2)^2 > 4 \det \mathbf{J}_2$, 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 $\mathbf{J}_3 = 2$, tr $\mathbf{J}_3 = -1$, $(\text{tr } \mathbf{J}_3)^2 < 4 \det \mathbf{J}_3$, tehát a (–1,1) pont **stabilis fókusz**.

Kinetikai differenciálegyenlet-rendszer felírása a reakciómechanizmus alapján
Tekintsük a következő reakciót:

$$\alpha A + \beta B + \cdots \xrightarrow{k} \alpha' A + \beta' B + \cdots \tag{9}$$

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:

$$v = k \cdot [A]^{\alpha} \cdot [B]^{\beta} \ldots \tag{10}$$

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:

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

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

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

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 (4),
vagy pedig a mátrixok determinánsát és nyomát (5).

6. A sajátértékek, illetve a determináns és nyom alapján (a 6. 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, az egyes paramétertartományokban milyen típusúak az egyes stacionárius pontok.

3. példa: az órai feladathoz hasonló 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

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

ill. $k_1 = k_2 = k_3 = 1$ esetén

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

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 2. ábra alapján **nyeregpont**.

Vagy: a karakterisztikus polinom $-(a^2-\lambda)(1+\lambda) = \lambda^2 + (1-a^2)\lambda - a^2 = 0$
$\rightarrow$ a sajátértékek $\lambda_{1,1} = a^2 > 0$ és $\lambda_{1,2} = -1 < 0$ $\rightarrow$ **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 $\mathbf{J}_{2,3} = 2a^2 > 0$, tr $\mathbf{J}_{2,3} = 1 > 0$,
tehát az (1/a; a) és (–1/a; –a) stacionárius pontok a 2. ábra alapján **instabil** pontok;

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

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

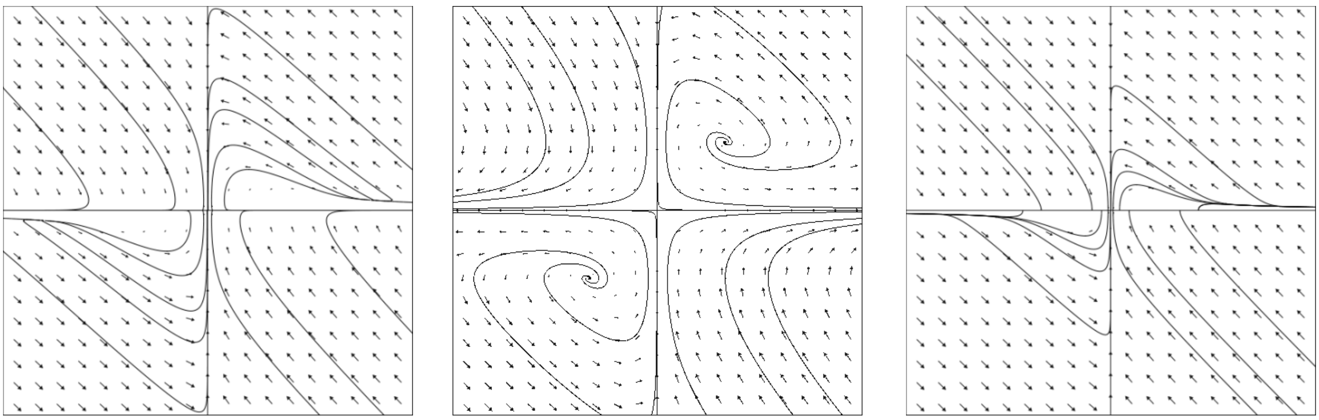
csomók, ha det$\mathbf{J}_{2,3} < (\text{tr}\,\mathbf{J}_{2,3})^2/4$, azaz $2a^2 < 1/4 \rightarrow a^2 < 1/8$

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 (det$\mathbf{J}_1 = -a^2 < 0$).
Az (1/a; a) és (–1/a; –a) stacionárius pontoknak a det$\mathbf{J}$ = (tr$\mathbf{J}$)^2/4 egyenlőségnek megfelelő ’a’ értékeknél, azaz $a = -\sqrt{1/8}$ -nál és $a = +\sqrt{1/8}$ -nál bifurkációs pontjuk van:

$a = \pm\sqrt{1/8}$ esetén egytengelyű csomók (ld. az I. táblázatot);
$a < -\sqrt{1/8}$ esetén instabil fókuszok;
$-\sqrt{1/8} < a < +\sqrt{1/8}$ esetén instabil csomópontok; ld. pl. az F1 fázissíkot a = 0,25 értékre;
$a > +\sqrt{1/8}$ esetén instabil fókuszok; ld. pl. az F2 fázissíkot a = 1 értékre.

a = 0 esetén a 3 stacionárius pont egybeesik, de az x tengely minden pontja stacionárius pont; ez elfajult eset, ld. az F3 fázissíkot.



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

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

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

3. ábra: a vizsgált rendszer fázissíkja különböző paraméterértékek esetén.
Az ábrák a PhasePictor programmal készültek.