Сибирский математический журнал
Сентябрь—октябрь, 2005. Том 46, № 5

УДК 517.928.4 517.929.5

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ВОПРОСЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ АВТОКОЛЕБАНИЙ СКОРОСТИ ГЕТЕРОГЕННОЙ КАТАЛИТИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ. I

Г. А. Чумаков

Аннотация: Проводится качественный анализ одной конкретной системы обыкновенных дифференциальных уравнений, возникающей при математическом моделировании автоколебаний скорости гетерогенной каталитической реакции. Исследуются периодические решения автономных систем с малым параметром при старших производных. Путем анализа полной модели показана справедливость принципа квазистационарности при условии, что скорость потока реагирующих веществ через реактор велика. Это позволяет уменьшить число переменных, не меняя существенно общих свойств модели. Сформулирован принцип генерирования релаксационных колебаний в трехмерной кинетической модели с двумя быстрыми и одной медленной переменными.

Ключевые слова: нелинейные системы, обыкновенные дифференциальные уравнения, периодические решения, сингулярное возмущение, пограничный слой, кинетическая модель.

Памяти Тадея Ивановича Зеленяка

§ 1. Полная математическая модель

Математическая модель [1, 2], описывающая изменения поверхностных концентраций (адсорбированных водорода (x_1) и кислорода (x_2)), состава газовой фазы (давления водорода (z_1) и кислорода (z_2)), а также учитывающая происходящие в системе процессы растворения водорода (x_3) и кислорода (x_4) в приповерхностном слое катализатора в предположении, что градиенты растворенных веществ малы, имеет следующий вид:

$$\begin{gathered}
\dot{x}_1 = 2\big[k_1 z_1(1-x_1-x_2)^2 - k_{-1}x_1^2 - k_3(\vec{x})x_1^2 x_2\big] - \beta_1 \dot{x}_3 = f_1(\vec{x},\vec{z}),\\
\dot{x}_2 = 2\big[k_2 z_2(1-x_1-x_2)^2 - k_{-2}x_1^2\big] - k_3(\vec{x})x_1^2 x_2 - k_4(\vec{x})z_1 x_2 - \beta_2 \dot{x}_4 = f_2(\vec{x},\vec{z}),\\
\dot{x}_3 = k_5 x_1(1-x_3) - k_{-5}x_3(1-x_1-x_2) = f_3(\vec{x}),\\
\dot{x}_4 = k_6 x_2(1-x_4) - k_{-6}x_4(1-x_1-x_2) = f_4(\vec{x}),\\
\varepsilon \dot{z}_1 = -\varepsilon\beta\big[k_1 z_1(1-x_1-x_2)^2 - k_{-1}x_1^2 + k_4(\vec{x})z_1 x_2\big] + z_{10} - z_1 = g_1(\vec{x},\vec{z},\varepsilon),\\
\varepsilon \dot{z}_2 = -\varepsilon\beta\big[k_2 z_2(1-x_1-x_2)^2 - k_{-2}x_2^2\big] + z_{20} - z_2 = g_2(\vec{x},\vec{z},\varepsilon),
\end{gathered} \tag{1.1}$$

где $\varepsilon = 1/q$, q — скорость потока реагирующих веществ через реактор,

$$k_3(\vec{x}) = k_{30}\exp(-\mu_{32}x_2 - \mu_{33}x_3 - \mu_{34}x_4),$$

$$k_4(\vec{x}) = k_{40}\exp(-\mu_{42}x_2 - \mu_{43}x_3 - \mu_{44}x_4),$$

$$k_i > 0 \ (i = \pm 1, \pm 2, \pm 5, \pm 6), \quad (\mu_{3j}, \mu_{4j}) \in \mathbb{R}^2 \ (j = 2, 3, 4);$$
$$k_{30} > 0, \quad k_{40} > 0, \quad \beta > 0, \quad \beta_1 > 0, \quad \beta_2 > 0, \quad z_{i0} > 0 \quad (i = 1, 2),$$
$$\varepsilon > 0; \quad \vec{x} = (x_1, x_2, x_3, x_4), \quad \vec{z} = (z_1, z_2).$$

Мы будем пользоваться следующими сокращенными обозначениями:

$$\vec{f} = (f_1, f_2, f_3, f_4), \quad \vec{z}_0 = (z_{10}, z_{20}),$$
$$\vec{g} = (g_1, g_2), \quad |\vec{z}| = \max(|z_1|, |z_2|).$$

Поскольку x_i, концентрации реагирующих веществ, удовлетворяют неравенствам $x_i \geq 0$ $(i = 1, \dots, 4)$, $x_1 + x_2 \leq 1$, $x_3 \leq 1$, $x_4 \leq 1$, рассмотрим множества

$$G = \{(x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2_+ : x_1 + x_2 \leq 1\},$$
$$D = \{\vec{x} \in G \times \mathbb{R}^2_+ : x_3 \leq 1, x_4 \leq 1\},$$
$$Q_c = \{(\vec{x}, \vec{z}) \in D \times \mathbb{R}^2_+ : |\vec{z} - \vec{z}_0| \leq c\},$$

где символом $\mathbb{R}^2$ обозначается двумерное евклидово пространство, $\mathbb{R}^2_+$ — его подмножество, состоящее из всех точек $\xi = (\xi_1, \xi_2)$ таких, что $\xi_i \geq 0$, $i = 1, 2$.

§ 2. Общие свойства полной модели

Исследуя общие свойства системы (1.1), мы докажем существование решений для всех $t > 0$ с начальными данными из $D \times \mathbb{R}^2_+$, их положительность и ограниченность. В частности, докажем, что имеется ограниченная область Q_c (при некотором $c > 0$) такая, что каждая траектория с начальными данными из $D \times \mathbb{R}^2_+$ попадает в эту область и никогда не покидает ее. Для этого нам удобно ввести несколько определений (см. [3]).

Определение. Обозначим через ∂Q_c границу множества Q_c. Пусть $Q_c^0 = Q_c \backslash \partial Q_c$ и $(\vec{x}^0, \vec{z}^0) \in \partial Q_c$. Тогда точка $(\vec{x}^0, \vec{z}^0)$ называется *точкой выхода* (или *входа*) для множества Q_c^0 по отношению к системе (1.1), если для решения $(\vec{x}, \vec{z})(t)$ этой системы, удовлетворяющего начальному условию $(\vec{x}, \vec{z})(0) = (\vec{x}^0, \vec{z}^0)$, существует такое $\delta > 0$, что $(\vec{x}, \vec{z})(t) \in Q_c^0$ для $-\delta < t < 0$ (или при $0 < t < \delta$). Если, кроме того, $(\vec{x}, \vec{z})(t) \notin Q_c$ при достаточно малом δ и $0 < t < \delta$ (или при $-\delta < t < 0$), то точка $(\vec{x}^0, \vec{z}^0)$ называется *точкой строгого выхода* (или *строго входа*). Точку $(\vec{x}^0, \vec{z}^0) \in \partial Q_c$, не являющуюся точкой выхода, будем называть *точкой невыхода*.

Через $\rho(\varepsilon)$ обозначим функцию

$$\rho(\varepsilon) = (1 + M)\varepsilon,$$

где

$$M = \beta \max\{z_{10}(k_1 + k_4^*), k_{-1}, k_2 z_{20}, k_{-2}\}, \quad k_4^* = \max_{\vec{x} \in D} k_4(\vec{x}).$$

Лемма 1. *Для любого $\varepsilon > 0$ и для всех $c > \rho(\varepsilon)$ множество ∂Q_c состоит из точек невыхода для множества Q_c^0 по отношению к системе* (1.1).

Доказательство. Пусть $\varepsilon > 0$ — любое положительное число. Положим

$$\Omega = \{(\vec{x}, \vec{z}) \in D \times \mathbb{R}^2_+ : |\vec{z} - \vec{z}_0| \geq \rho(\varepsilon)\}.$$

Рассмотрим функции

$$V_i(z_i) = (z_i - z_{i0})^2, \quad i = 1, 2.$$

Производная по t от V_i в силу системы (1.1) есть

$$\frac{dV_i}{dt} = 2(z_i - z_{i0})\frac{g_i(\vec{x}, \vec{z}, \varepsilon)}{\varepsilon} \equiv 2W_i(\vec{x}, z_i), \quad i = 1, 2,$$

где

$$W_1(\vec{x}, z_1) = -\beta[k_1(1 - x_1 - x_2)^2 + k_4(\vec{x})x_2]z_1(z_1 - z_{10}) + \beta k_{-1}x_1^2(z_1 - z_{10}) - \frac{(z_1 - z_{10})^2}{\varepsilon}, \quad (2.1)$$

$$W_2(\vec{x}, z_2) = -\beta k_2(1 - x_1 - x_2)^2 z_2(z_2 - z_{20}) + \beta k_{-2}(z_2 - z_{20})x_2^2 - \frac{(z_2 - z_{20})^2}{\varepsilon}. \quad (2.2)$$

Докажем, что для $(\vec{x}, \vec{z}) \in \Omega$ имеет место неравенство

$$\frac{dV_i}{dt} < 0, \quad i = 1, 2.$$

Это условие достаточно для того, чтобы точки $(\vec{x}, \vec{z}) \in \partial Q_c$, для которых $|\vec{z} - \vec{z}_0| = c$, были точками невыхода для множества Q_c^0.

Рассмотрим функцию $W_1(\vec{x}, z_1)$ сначала на интервале $0 \le z_1 \le z_{10} - \rho(\varepsilon)$. Из (2.1) видно, что в этом случае если предположить, что выполнено неравенство

$$-\beta[k_1(1 - x_1 - x_2)^2 + k_4(\vec{x})x_2]z_1(z_1 - z_{10}) < \frac{(z_1 - z_{10})^2}{\varepsilon} \quad (2.3)$$

для всех $\vec{x} \in D$, то

$$W_1(\vec{x}, z_1) < 0. \quad (2.4)$$

Поскольку при рассматриваемых z_1 и для всех $\vec{x} \in D$ в силу выбора $\rho(\varepsilon)$ имеем цепочку неравенств

$$\varepsilon < \frac{\rho(\varepsilon)}{\beta(k_1 + k_4^*)z_{10}} < \frac{z_{10} - z_1}{\beta[k_1(1 - x_1 - x_2)^2 + k_4(\vec{x})x_2]z_1}, \quad (2.5)$$

условие (2.3) действительно имеет место и (2.4) справедливо. Пусть теперь z_1 удовлетворяет неравенству $z_1 \ge z_{10} + \rho(\varepsilon)$. В этом случае если предположить, что

$$\beta k_1 x_1^2(z_1 - z_{10}) < \frac{(z_1 - z_{10})^2}{\varepsilon} \quad (2.6)$$

для всех $x \in [0, 1]$, то соотношение (2.4) будет выполнено. Поскольку при рассматриваемых z_1 и для всех $x_1 \in [0, 1]$ в силу выбора $\rho(\varepsilon)$ мы имеем цепочку неравенств

$$\varepsilon < \frac{\rho(\varepsilon)}{\beta k_{-1}} < \frac{z_1 - z_{10}}{\beta k_{-1}x_1^2}, \quad (2.7)$$

условие (2.6) выполняется и, следовательно, (2.4) справедливо.

Рассмотрим функцию $W_2(\vec{x}, z_2)$, определенную равенством (2.2), сначала на интервале $0 \le z_2 \le z_{20} - \rho(\varepsilon)$. Если предположить, что выполнено неравенство

$$-\beta k_2 z_2(1 - x_1 - x_2)^2(z_2 - z_{20}) < \frac{(z_2 - z_{20})^2}{\varepsilon} \quad (2.8)$$

для всех $\vec{x} \in D$, то

$$W_2(\vec{x}, z_2) < 0. \quad (2.9)$$

Поскольку при рассматриваемых z_2 и для всех $\vec{x} \in D$ в силу выбора $\rho(\varepsilon)$ имеем цепочку неравенств

$$\varepsilon < \frac{\rho(\varepsilon)}{\beta k_2 z_{20}} < \frac{z_{20} - z_2}{\beta k_2 z_2 (1 - x_1 - x_2)^2}, \tag{2.10}$$

условие (2.8) действительно имеет место и неравенство (2.9) справедливо. Пусть теперь $z_2 \geq z_{20} + \rho(\varepsilon)$. В этом случае если предположить, что

$$\beta k_{-2} x_2^2 (z_2 - z_{20}) < \frac{(z_2 - z_{20})^2}{\varepsilon} \tag{2.11}$$

для всех $x_2 \in [0,1]$, то соотношение (2.9) будет выполнено. Поскольку при рассматриваемых z_2 для всех $x_2 \in [0,1]$ в силу выбора $\rho(\varepsilon)$ имеем цепочку неравенств

$$\varepsilon < \frac{\rho(\varepsilon)}{\beta k_{-2}} < \frac{z_2 - z_{20}}{\beta k_{-2} x_2^2}, \tag{2.12}$$

условие (2.11) выполняется и, следовательно, (2.9) справедливо.

Таким образом, для любого $\varepsilon > 0$ функции $V_i(z_i)$ $(i = 1, 2)$ убывают, пока решение $(\vec{x}, \vec{z})(t)$, удовлетворяющее условию $(\vec{x}, \vec{z})(0) \in \Omega$, остается в Ω. Кроме того, из (2.5), (2.7), (2.10) и (2.12) следует, что для $(\vec{x}, \vec{z}) \in \Omega$ имеет место неравенство

$$\frac{dV_i(z_i)}{dt} \leq -\alpha V_i(z_i), \ i = 1, 2, \quad \alpha = \frac{2}{(1 + M)\varepsilon}, \tag{2.13}$$

завершающее доказательство того, что точки $(\vec{x}, \vec{z}) \in \partial Q_c$, в которых $|z - z_0| = c$, являются точками невыхода.

В остальных точках границы ∂Q_c векторное поле, определяемое системой (1.1), всюду направлено внутрь области Q_c, кроме точек границы ∂Q_c, для которых либо $\{x_1 = 0, x_2 = 1\}$, либо $\{x_1 = 1, x_2 = 0\}$, либо $\{x_1 + x_2 = 1, x_3 = 1\}$, либо $\{x_1 + x_2 = 1, x_4 = 1\}$. В этих точках векторное поле касается ∂Q_c. Покажем, что эти точки также являются точками невыхода. Для этого рассмотрим, например, одну из точек ∂Q_c, для которой $\{x_1 = 1, x_2 = 0\}$. Поскольку в этой точке $f_1 = -2k_{-1} < 0$, то для решения $(\vec{x}, \vec{z})(t)$, удовлетворяющего выделенному начальному условию, существует $\delta > 0$ такое, что $(\vec{x}, \vec{z})(t) \notin Q_c$ для $-\delta < t < 0$. Следовательно, точки границы ∂Q_c, для которых $\{x_1 = 1, x_2 = 0\}$, не являются точками выхода. Аналогично доказывается, что остальные выделенные точки ∂Q_c являются точками невыхода. Лемма 1 доказана.

Из доказательства леммы 1 следует более сильное

Следствие 1. *Пусть $(\vec{x}^0, \vec{z}^0) \in \partial Q_c$. Тогда для решения, удовлетворяющего начальному условию $(\vec{x}, \vec{z})(0) = (\vec{x}^0, \vec{z}^0)$, существует $\delta > 0$ такое, что $(\vec{x}, \vec{z})(t) \notin Q_c$ для $-\delta < t < 0$.*

Теорема 1. *Пусть $(\vec{x}, \vec{z})(t)$ — решение системы* (1.1), *удовлетворяющее при $t = 0$ условию $(\vec{x}, \vec{z})(0) \in Q_c$, где c — произвольное фиксированное число, большее $\rho(\varepsilon)$. Тогда $(\vec{x}, \vec{z})(t) \in Q_c^0$ для всех $t > 0$.*

Доказательство. Пусть $(\vec{x}, \vec{z})(t)$ — решение системы (1.1), удовлетворяющее условию $(\vec{x}, \vec{z})(0) \in Q_c^0$. Тогда $(\vec{x}, \vec{z})(t) \in Q_c^0$ для всех $t > 0$. Действительно, если это утверждение неверно, то существует наименьшее $t = t_0 > 0$, для которого $(\vec{x}, \vec{z})(t_0) \in \partial Q_c$. Но в таком случае $(\vec{x}, \vec{z})(t_0)$ будет точкой выхода, что противоречит лемме 1. Пусть теперь $(\vec{x}, \vec{z})(0) \in \partial Q_c$. Тогда $(\vec{x}, \vec{z})(t) \in Q_c^0$ для всех

$t > 0$. Действительно, если это не так, то существует значение $t = t_0 > 0$, для которого $(\vec{x}, \vec{z})(t_0) \notin Q_c^0$. Но тогда либо $(\vec{x}, \vec{z})(t_0) \in \partial Q_c$, либо $(\vec{x}, \vec{z})(t_0) \notin \partial Q_c$. Пусть $(\vec{x}_\delta, \vec{z}_\delta)(t)$ — решение системы (1.1) с начальным условием из Q_c^0, принадлежащим δ-окрестности точки $(\vec{x}, \vec{z})(0)$. По теореме о непрерывной зависимости от начального условия для решения $(\vec{x}, \vec{z})(t)$ имеет место соотношение

$$(\vec{x}, \vec{z})(t) = \lim_{\delta \to 0} (\vec{x}_\delta, \vec{z}_\delta)(t) \quad \text{для } 0 \le t \le t_0,$$

а поскольку каждое из решений $(\vec{x}_\delta, \vec{z}_\delta)(t)$ для $0 \le t \le t_0$ принадлежит Q_c^0, то $(\vec{x}, \vec{z})(t_0) \in \partial Q_c$ и $(\vec{x}, \vec{z})(t) \in Q_c$ для $0 \le t \le t_0$. Однако из следствия 1 вытекает, что если $(\vec{x}, \vec{z})(t_0) \in \partial Q_c$, то существует $\delta_1 > 0$ такое, что $(\vec{x}, \vec{z})(t) \notin \partial Q_c$ для $t_0 - \delta_1 < t < t_0$. Это противоречит тому, что $(\vec{x}, \vec{z})(t) \in Q_c$ для $0 \le t \le t_0$. Теорема 1 доказана.

§ 3. Зависимость решений полной системы от малого параметра при производных

Целью этого параграфа является исследование системы (1.1) в предположении, что ε является малым параметром. В этом случае мы убедимся в справедливости допущения о квазистационарности газовой фазы (переменные z_1 и z_2) и можем уменьшить число переменных, не меняя существенно общих свойств модели. Для этого используем технику, развитую в работах А. Н. Тихонова [4] и А. Б. Васильевой, В. Ф. Бутузова [5].

Наряду с системой (1.1), которую будем называть *полной системой*, рассмотрим еще две системы дифференциальных уравнений: *систему быстрых движений*

$$\dot{\vec{z}} = \vec{g}(\vec{x}, \vec{z}, 0) = \vec{z}_0 - \vec{z} \tag{3.1}$$

и *вырожденную систему*

$$\dot{\vec{x}} = \vec{f}(\vec{x}, \vec{z}_0). \tag{3.2}$$

Поскольку особая точка $\vec{z} = \vec{z}_0$ системы быстрых движений (3.1) асимптотически устойчива в целом, областью влияния является $\mathbb{R}^2_+$.

Выясним, при каких условиях интегральная кривая $\vec{x} = \vec{x}(t, \varepsilon)$, $\vec{z} = \vec{z}(t, \varepsilon)$ полной системы приближается и в дальнейшем остается вблизи плоскости $\vec{z} = \vec{z}_0$.

Лемма 2. *Для любого* $\varepsilon > 0$ *решения системы* (1.1) *с произвольными начальными данными* $(\vec{x}^0, \vec{z}^0) \in D \times \mathbb{R}^2_+$ *попадают за время* T*, не большее* t^**, где*

$$t^* = \rho(\varepsilon) \left| \ln \frac{\rho(\varepsilon)}{\sqrt{V}} \right| \equiv t^*(\vec{z}^0), \quad V = \max_{i=1,2} \{ V_i(z_i^0) \}, \tag{3.3}$$

внутрь области $Q_{\rho(\varepsilon)}$, *т. е. компонента* $\vec{z}(t, \varepsilon)$ *попадает внутрь поверхности*

$$|\vec{z} - \vec{z}_0| = \rho(\varepsilon). \tag{3.4}$$

Кроме того,

$$\lim_{\varepsilon \to 0} \vec{z}(t, \varepsilon) = \vec{z}_0 \quad \text{при } t > 0. \tag{3.5}$$

Замечание. Предельный переход в (3.5) равномерным по t не является. Вблизи $t = 0$ появляется пограничный слой, в котором, как бы мало ни было ε, решение $\vec{z}(t, \varepsilon)$ полной системы (1.1) сильно отличается от $\vec{z}_0$, если $|\vec{z}^0 - \vec{z}_0| \gg \rho(\varepsilon)$.

Доказательство леммы 2. Оценим время, за которое решение системы (1.1) с начальными данными $(\vec{x}^0, \vec{z}^0)$ попадает на поверхность (3.4). Из (2.13) следует, что $V_i(z_i)$ убывает не медленнее, чем $V_i(z_i^0)e^{-\alpha t}$, $i = 1, 2$. Поэтому если

$$V e^{-\alpha t^*} = \rho^2, \tag{3.6}$$

то траектория окажется на поверхности (3.4) за время, не большее t^*. Разрешая уравнение (3.6) относительно t^*, получим (3.3). Поскольку $\rho(\varepsilon) \to 0$ и $t^*(\vec{x}^0) \to 0$ при $\varepsilon \to 0$, то

$$\lim_{\varepsilon \to 0} \vec{z}(t, \varepsilon) = \vec{z}_0$$

для любого $t > 0$. Лемма 2 доказана.

Выясним теперь, будет ли при малом ε функция $\vec{x}(t, \varepsilon)$, определяемая полной системой (1.1), близка на интервале $0 \le t \le T$ к функции $\vec{x}(t)$, определяемой вырожденной системой (3.2).

Лемма 3. *Пусть $\vec{x}(t, \varepsilon)$ — компонента решения полной системы с начальными данными $(\vec{x}^0, \vec{z}^0) \in D \times \mathbb{R}_+^2$, а $\vec{x}(t)$ — решение вырожденной системы с начальными данными $\vec{x}^0$. Тогда*

$$\lim_{\varepsilon \to 0} \vec{x}(t, \varepsilon) = \vec{x}(t) \quad \text{при } 0 \le t \le T. \tag{3.7}$$

Доказательство. Из леммы 2 вытекает, что при $t \ge t^*(\vec{z}^0)$ функция $\vec{x}(t, \varepsilon)$ будет удовлетворять системе

$$\dot{\vec{x}} = \vec{f}(\vec{x}, \vec{z}^0 + \vec{\mu}(t, \varepsilon)), \quad \vec{x}(t^*(\vec{z}^0)) = \vec{x}^0 + \vec{\eta}, \tag{3.8}$$

где $|\vec{\mu}(t, \varepsilon)| \le \rho(\varepsilon)$. Кроме того, из (3.3) следует, что при малых ε компонента $\vec{x}$ решения системы (1.1) за время $t^*(\vec{z}^0)$ изменится на величину порядка $\varepsilon \ln \varepsilon$. Поэтому величина $|\vec{\eta}|$ будет стремиться к нулю при $\varepsilon \to 0$. Сравнивая системы (3.2) и (3.8) и начальные значения $\vec{x}(t)$ и $\vec{x}(t, \varepsilon)$, на основании теоремы о непрерывной зависимости решений от параметров и начальных данных получим, что $\vec{x}(t, \varepsilon) \to \vec{x}(t)$ при $\varepsilon \to 0$ для $t \in [0, T]$, т. е. имеет место предельный переход (3.7). Лемма 3 доказана.

Покажем теперь, что в системе (1.1) будет существовать периодическое решение при малых ε, если вырожденная система имеет периодическое решение. Удобно ввести несколько определений.

Определение. Квадратная матрица A называется *грубой*, если у нее нет собственных значений, лежащих на мнимой оси. Если $f(x)$ — вектор,

$$f(x) = (f_1(x_1, \dots, x_n), \dots, f_n(x_1, \dots, x_n)),$$

то через f_x обозначается матрица первых производных $\left(\frac{\partial f_i}{\partial x_j}\right)$, $i, j = 1, \dots, n$. Положение равновесия x_0 системы автономных дифференциальных уравнений $\dot{x} = f(x)$ называется *грубым*, если матрица $f_x(x_0)$ грубая.

Под матрицей монодромии системы линейных дифференциальных уравнений с периодическими коэффициентами понимается матрица, определяемая следующим образом. Пусть линейная система в матричном виде записывается так:

$$\dot{X} = A(t)X, \quad A(t) = A(t + T).$$

Возьмем решение этой системы $X(t)$ с начальным значением $X(0) = I$ (I — единичная матрица). *Матрица монодромии* есть $X(T)$. Ее собственные значения называются *мультипликаторами* системы. Периодическое решение $x(t) = x(t+T)$ системы $\dot{x} = f(x)$ называется *грубым предельным циклом*, если уравнение в вариациях $\dot{(\delta x)} = f_x(x(t)) \cdot (\delta x)$ не имеет мультипликаторов, равных единице по модулю, кроме одного.

Теорема 2. *Пусть вырожденная система* (3.2) *имеет в области D грубый устойчивый предельный цикл l с периодом T и областью притяжения $U(l)$. Пусть U_1 — произвольная подобласть области $U(l)$ такая, что замыкание $\overline{U}_1$ содержится в $U(l)$. Пусть*

$$W = \left\{\vec{z} \in \mathbb{R}^2_+ : |\vec{z} - \vec{z}_0| < r,\ 0 < r < +\infty\right\}, \quad P = \overline{U}_1 \times \overline{W}.$$

Тогда существует $\varepsilon_0 > 0$ такое, что для всех $0 < \varepsilon < \varepsilon_0$

1) *полная система* (1.1) *имеет грубый устойчивый предельный цикл L с периодом $T(\varepsilon)$, стремящимся при $\varepsilon \to 0$ к периоду T периодического решения l;*

2) *все решения полной системы с начальными данными из множества P будут притягиваться к предельному циклу L.*

Доказательство. Первая часть теоремы непосредственно следует из [6]. Действительно, поскольку положение равновесия системы быстрых движений $\vec{z} = \vec{z}_0$ является грубым и устойчивым и предельный цикл l также грубый и устойчивый, то все условия теоремы 5 из [6] выполняются. Следовательно, при малых ε полная система (1.1) имеет единственный грубый устойчивый предельный цикл L, который целиком лежит в некоторой окрестности предельного цикла l, с периодом $T(\varepsilon)$, стремящимся при $\varepsilon \to 0$ к периоду T периодического решения l. Кроме того, существуют $\varepsilon_0 > 0$ и $\omega > 0$ такие, что для всех $\varepsilon < \varepsilon_0$ все траектории системы (1.1) из ω-окрестности периодического решения l в пространстве $(\vec{x}, \vec{z})$ притягиваются к предельному циклу L.

Для доказательства второй части теоремы возьмем произвольную точку $(\vec{x}^0, \vec{z}^0) \in P$ и рассмотрим решение $\vec{x}(t)$ вырожденной системы с начальными данными $\vec{x}(0) = \vec{x}^0$. Поскольку $\vec{x}^0 \in U(l)$, существует T_1 такое, что точка $\vec{x}(T_1)$ с некоторой своей δ-окрестностью содержится в ω-окрестности предельного цикла l. Кроме того, выберем ε_0 столь малым, чтобы, во-первых, цилиндр Q с основанием, являющимся δ-окрестностью точки $\vec{x}(T_1)$, и высотой $\rho(\varepsilon_0)$ по переменным z_1, z_2 полностью лежал в ω-окрестности предельного цикла l пространства $(\vec{x}, \vec{z})$ и, во-вторых, величина $t^*(\vec{z}^0)$ в (3.3) была меньше T_1.

Пусть теперь $(\vec{x}(t,\varepsilon), \vec{z}(t,\varepsilon))$ — решение полной системы с начальными данными $(\vec{x}^0, \vec{z}^0)$. По лемме 3 существует $\varepsilon_1 < \varepsilon_0$ такое, что для всех $\varepsilon < \varepsilon_1$

$$|\vec{x}(t,\varepsilon) - x(t)| < \delta \quad \text{при } 0 \le t \le T_1. \tag{3.9}$$

В свою очередь, из леммы 2 следует, что для всех $\varepsilon < \varepsilon_1$

$$|\vec{z}(T,\varepsilon) - \vec{z}^0| < \rho(\varepsilon). \tag{3.10}$$

Таким образом, из (3.9) и (3.10) получим, что траектория полной системы с начальными данными $(\vec{x}^0, \vec{z}^0)$ при $t = T_1$ попадает в цилиндр D, т. е. в область притяжения предельного цикла L. В силу непрерывной зависимости решений от начальных данных существует некоторая окрестность G_1 точки $(\vec{x}^0, \vec{z}^0)$ такая, что все решения системы (1.1) с начальными данными из этой окрестности будут также протягиваться к предельному циклу L.

Аналогично можно показать что существуют система $\{G_\alpha\}$ открытых множеств, являющаяся покрытием множества P, и последовательности $\{\varepsilon_\alpha\}$, $\{T_\alpha\}$ положительных чисел таких, что при фиксированном α для всех $\varepsilon < \varepsilon_\alpha$ все решения системы (1.1) с начальными данными из G_α попадают в ω-окрестность предельного цикла L за время T_α. Поскольку множество P компактно, из системы открытых множеств $\{G_\alpha\}$ можно выделить конечное покрытие $G_{\alpha_1}, \dots, G_{\alpha_n}$. Обозначим $\varepsilon^0 = \min\{\varepsilon_{\alpha_1}, \dots, \varepsilon_{\alpha_n}\}$, $T^0 = \max\{T_{\alpha_1}, \dots, T_{\alpha_n}\}$. Тогда для всех $\varepsilon < \varepsilon^0$ решения системы (1.1) с произвольными начальными данными из P попадают в ω-окрестность предельного цикла L за время T^0, следовательно, при $t \to +\infty$ притягиваются к L. Теорема доказана.

Таким образом, путем анализа полной системы (1.1) мы убедились в справедливости допущения о квазистационарности состава газовой фазы при условии, что скорость q потока реагирующих веществ через реактор велика и $\varepsilon = 1/q$ является малым параметром. В этом случае мы можем уменьшить число переменных, не меняя существенно общих свойств модели, и рассматривать вместо полной системы (1.1) вырожденную систему (3.2), полагая тем самым давления водорода z_1 и кислорода z_2 в реакторе постоянными и равными давлениям z_{10}, z_{20} на входе в реактор.

§ 4. Релаксационные автоколебания

Анализ вырожденной системы (3.2) будем проводить в предположении, что $k_6 = k_{-6} = 0$, $\mu_{33} = \mu_{34} = \mu_{44} = 0$, $\beta_1 = \beta_2 = 0$, k_5 и k_{-5} малы по сравнению с k_1, k_2, k_{30}, k_{40}, т. е. $\dot{x}_4 = 0$ и переменная x_3 является медленной переменной по сравнению с x_1 и x_2. В дальнейшем нам удобно обозначить медленную переменную x_3 через y. Тогда система (3.2) примет вид

$$\dot{x}_1 = K_1(1 - x_1 - x_2)^2 - K_{-1}x_1^2 - 2K_3(x_2)x_1^2x_2 \equiv F_1(x_1, x_2),$$

$$\dot{x}_2 = K_2(1 - x_1 - x_2)^2 - K_{-2}x_2^2 - K_3(x_2)x_1^2x_2 - K_4(x_2, y)x_2 \equiv F_2(x_1, x_2, y),$$

$$\dot{y} = \mu[x_2(1 - y) - \alpha y(1 - x_1 - x_2)] \equiv \mu\ h(x_1, x_2, y),$$

где $K_3(x_2) = k_{30}\exp(-\mu_3 x_2)$, $K_4(x_2, y) = k_{40}\exp(-\mu_4 x_2 - \mu_5 y)$, $K_1 = 2k_1 z_{10}$, $K_{-1} = 2k_{-1}$, $K_2 = 2k_2 z_{20}$, $K_{-2} = 2k_{-2}$, $\mu = k_5$, $\alpha = k_{-5}/k_5$, $y = x_3$, $\mu_3 = \mu_{32}$, $\mu_4 = \mu_{42}$, $\mu_5 = \mu_{43}$. Поскольку эта система имеет вид

$$\dot{\vec{x}} = \vec{F}(\vec{x}, y), \quad \dot{y} = \mu \cdot h(\vec{x}, y), \tag{4.1}$$

где $F = (F_1, F_2)$, $\vec{x} = (x_1, x_2) \in G$ — быстрые переменные, $y \in [0, 1]$ — медленная переменная, $0 < \mu \ll 1$, наряду с системой (4.1) рассмотрим систему быстрых движений

$$\frac{d\vec{x}}{d\tau} = \vec{F}(\vec{x}, y) \tag{4.2}$$

с параметром y, $0 \le y \le 1$. Пусть $\varphi(t, p, y)$ — решение $(x_1(t), x_2(t))$ системы (4.2) с начальными данными $p = (x_1(0), x_2(0))$ и $\varphi(0, p, y) = p$. Будем говорить, что векторное поле $\vec{F}$ *порождает поток* $\varphi_t : G \to G$, где $\varphi_t(\vec{x}, y) = \varphi(t, \vec{x}, y)$. Для систем типа (4.1) можно сформулировать некоторые признаки возможности существования релаксационных автоколебаний.

Теорема 3. *Пусть система (4.2) при $y_1 < y < y_2$ имеет три стационарных состояния: два асимптотически устойчивых узла или фокуса и одно неустойчивое (седло), а при $0 < y < y_1$ и $y_2 < y < 1$ — единственное асимптотически устойчивое в целом стационарное состояние. Пусть как при y_1, так и при y_2 в системе (4.2) происходит бифуркация стационарных состояний в окрестности негрубого элемента — седло-узла. Кроме того, пусть фазовый портрет при $y_1 < y < y_2$ устроен так, что входящие сепаратрисы седла, разделяющие области притяжения устойчивых стационарных точек, приходят с границы области G. Для грубых седловых точек предположим, что собственные значения матрицы линеаризованной системы удовлетворяют соотношениям $\lambda_1 < 0 < \lambda_2$ и $|\lambda_1| > |\lambda_2|$. Далее, пусть система (4.1) имеет единственное состояние равновесия $(\vec{x}_0, y_0)$, лежащее на кривой, состоящей из стационарных точек системы (4.2) типа седла, причем y_0 хорошо отделено от y_1 и y_2.*

Тогда при $\mu \to 0$ в системе (4.1) существует хотя бы одно периодическое решение, отличное от положения равновесия.

Доказательство. Рассмотрим в пространстве $(\vec{x}, y)$ дважды гладкую кривую стационарных состояний $ABCD$ системы (4.2), где точка A соответствует стационарному состоянию при $y = 1$, точка D — стационарному состоянию при $y = 0$, а точки локального минимума и максимума B и C — седло-узлам при y_1 и y_2. Обозначим через M и N устойчивые положения равновесия системы (4.2) при бифуркационных значениях параметра $y = y_1$ и $y = y_2$ соответственно. В силу свойств системы (4.1) в окрестности ветви AB выполняется неравенство $h(\vec{x}, y) < 0$, а в окрестности ветви CD, наоборот, $h(\vec{x}, y) > 0$.

Определим для $y_1 < y < y_2$ на плоскости притягивающее множество Λ_y, состоящее из трех стационарных точек и выходящих сепаратрис седла. В этом случае для данного $\varepsilon > 0$ в ε-окрестности множества Λ_y существует окрестность U_y такая, что граница области U_y состоит из точек строгого входа и $\Lambda_y = \bigcap\limits_{t \geq 0} \varphi_t(U_y, y)$. В силу непрерывной зависимости Λ_y от параметра y граница области $U_{y'}$ при фиксированном y' также состоит их точек строгого входа по отношению к системе (4.2) для y из некоторой окрестности точки y'. Используя области U_y, построим область U в ε-окрестности множества $\Lambda = \bigcup\limits_{y_1 \leq y \leq y_2} \Lambda_y$ такую, что при малых μ граница ∂U состоит из точек строгого входа по отношению к системе (4.1) и $U \supset \Lambda$.

Заметим, что сумма индексов особых точек в области $G \times [0, 1]$ равна -1 и, следовательно, стационарное состояние $(\vec{x}_0, y_0)$ при достаточно малом μ будет седлом $(1, 2)$ с одномерным устойчивым многообразием W^s и двумерным неустойчивым многообразием W^u. Две траектории из W^s в области $G \times [0, 1]$ будут близки к входящим сепаратрисам седла системы (4.2) при $y = y_0$ и поэтому будут приходить в седло $(\vec{x}_0, y_0)$ с границы области $G \times [0, 1]$. Одна из траекторий W^u, соответствующая положительному собственному значению седла $(1, 2)$, будет иметь касательную в стационарной точке, близкую к касательной к выходящей сепаратрисе седла системы (4.2). Вторая траектория W^u, соответствующая другому положительному собственному значению седла $(1, 2)$ при $\mu \to 0$, будет иметь касательную в стационарной точке, близкую к касательному направлению к ветви BC в рассматриваемой седловой точке при $y = y_0$.

Определим торообразную область T, удаляя из U устойчивое многообразие W^s вместе с малой окрестностью так, что внутри T нет точек покоя и граница ∂T состоит из точек строгого выхода по отношению к системе (4.1).

Рассмотрим локальную площадку Пуанкаре π диаметра δ в окрестности ветви AB, которая задается уравнением $y = y_0$, такую, что для всех $\vec{x} \in \pi$ выполнено неравенство $h(\vec{x}, y_0) < 0$. Поскольку при достаточно малых ε и μ все решения попадают в U и траектории устойчивого многообразия W^s седла $(\vec{x}_0, y_0)$ приходят с границы области $G \times [0, 1]$, то все траектории с локальной площадки π будут попадать в тор T, обходить его и возвращаться на π.

Действительно, движение по произвольной фазовой траектории системы (4.1) с начальными данными $(\vec{x}^0, y^0)$ на площадке Пуанкаре π будут происходить следующим образом. Если начальная точка движения находится на конечном расстоянии от AB, то вектор скорости $v(\vec{x}, y) = (F(\vec{x}, y), \mu h(\vec{x}, y))$ при конечной первой компоненте имеет бесконечно малую вторую компоненту. Следовательно, произойдет изменение координаты $\vec{x}$ при почти неизменном значении координаты y, т. е. движение по траектории системы (4.1) будет близким к движению по траектории системы (4.2). Характер этого движения не изменится до тех пор, пока компоненты вектора фазовой скорости не станут сравнимыми, т. е. пока фазовая точка системы (4.1) не попадет в тор T, а именно не приблизится к кривой AB на расстояние порядка μ или, что все равно, точка $\vec{x}$, перемещающаяся по закону (4.2), не приблизится к устойчивому положению равновесия.

После этого движение по траектории системы (4.1) будет происходить в торе T вблизи устойчивого участка AB, как бы сопровождая устойчивое положение равновесия системы (4.2), движущееся по кривой AB при убывании y-координаты. Изменение y происходит медленно в силу системы $\dot{y} = \mu h(\vec{x}, y)$. Поскольку на рассматриваемом участке кривой AB нет положений равновесия системы (4.1), величина y за конечное время достигнет бифуркационного значения y_1. При этом значении сопровождаемое устойчивое положение равновесия исчезает и фазовая точка устремится почти по траектории системы (4.2) в окрестность другого устойчивого положения равновесия системы (4.2) при $y = y_1$, т. е. в окрестность точки M. После этого движение будет происходить вблизи устойчивого участка MC с увеличением y-координаты, и при достижении бифуркационного значения y_2 фазовая точка устремится в окрестность устойчивого положения равновесия системы (4.2), которое мы обозначили через N, и т. д., пока траектория не возвратится на π.

Таким образом, мы можем задать непрерывное отображение Пуанкаре $\pi \to \pi$, которое при $\mu \to 0$ в силу теоремы Брауэра будет иметь неподвижные точки на π. В результате последовательного чередования медленных и быстрых движений в торе T возникает замкнутая траектория и соответствующее периодическое решение будет генерировать *релаксационные колебания*.

Для того чтобы точнее определить положение находящейся внутри кольцевой области периодической траектории при $\mu \to 0$, тор T можно сузить так, что он будет содержаться в ε-окрестности кривой $MCNB$. Тогда из теоремы Брауэра следует, что в системе (4.1) существует хотя бы одно периодическое решение, которое будет стремиться к замкнутой кривой $MCNB$. Теорема 3 доказана.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Чумаков Г. А., Слинько М. Г., Беляев В. Д.* Сложные изменения скорости гетерогенной каталитической реакции // Докл. АН СССР. 1980. Т. 253, № 3. С. 653–658.
2. *Чумаков Г. А., Слинько М. Г.* Кинетическая турбулентность (хаос) скорости реакции взаимодействия водорода с кислородом на металлических катализаторах // Докл. АН

СССР. 1982. Т. 266, № 5. С. 1194–1198.
3. *Хартман Ф.* Обыкновенные дифференциальные уравнения. М.: Мир, 1970.
4. *Тихонов А. Н.* Системы дифференциальных уравнений, содержащие малые параметры при производных // Мат. сб. 1952. Т. 31, № 3. С. 575–586.
5. *Васильева А. Б., Бутузов В. Ф.* Асимптотические разложения решений сингулярно возмущенных уравнений. М.: Наука, 1973.
6. *Аносов Д. В.* О предельных циклах систем дифференциальных уравнений с малым параметром при старших производных // Мат. сб. 1960. Т. 50, № 3. С. 299–334.

Статья поступила 10 февраля 2004 г.

Чумаков Геннадий Александрович
Институт математики им. С. Л. Соболева СО РАН,
пр. Академика Коптюга, 4, Новосибирск 630090
chumakov@math.nsc.ru