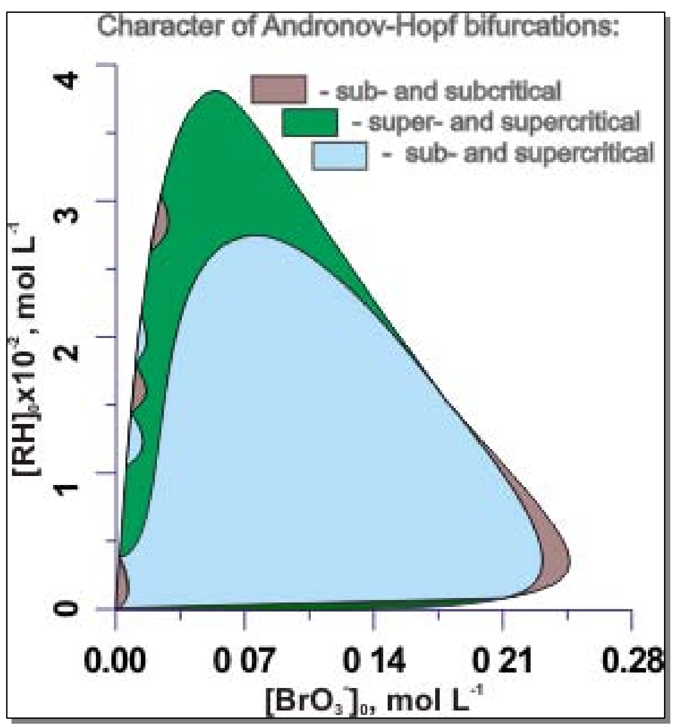
The bifurcation of limit cycle birth in 11-stage model of the Belousov-Zhabotinsky reaction

Andrew B. Ryzhkov
Institute of Organic Chemistry of
Ufa Research Centre of Russia Academy of Sciences

To clearly understand the global dynamics of a system it is necessary to know placement and character of bifurcation points of the system. Since the experimental determination in many cases is very difficult and requires a usage of precision technique the effective way to make clear the bifurcation structure of the system is modeling studies. Here arising problems is typical for modeling investigations of complex chemical systems: high dimension of systems of ordinary differential equations, which describe the reaction mechanism, its nonlinearity and high stiffness. This leads to high requirements applied to used numerical methods. One of the most interesting examples of such systems is the well-known Belousov-Zhabotinsky reaction. The correct description of this reaction is possible only for 11-stage model, which demonstrates oscillations and chaos observed in experiment. The usual methods are inapplicable for investigation of this system due to difficulties described above. Therefore, it is necessary to develop new algorithms and approaches to this problem, what we did in this work. Particularly we studied conditions of oscillations appearance in the model. The oscillations appearance in the system happens through the bifurcation of limit cycle birth – Andronov-Hopf bifurcation. The condition of this bifurcation is transition of pair of complex-conjugate eigenvalues of linearization matrix of the system in equilibrium through zero. To search the bifurcation points we developed a program – NoFad. Equilibrium states are found by solution of system of nonlinear equations corresponding right parts of the system using Newton-Kantorovich-Fadeev method [1]. To estimate the initial approximation the solution of Cauchy problem by (*m*,*k*)-method of of order three is used [2]. Further, the roots of



characteristic equation are calculated using *QR*-algorithm of Kublanovskaya-Francis [3,4].Obtained in such way eigenvalues of Jacobian are used in searching procedure of zero value by combined method of dichotomy and Newton-Raphson [5]. Similarly, the maximum value of the roots is calculated in specified interval by Brent method [5]. Then character of found bifurcations point is determined either sub- or supercritical (accordingly hard and soft birth of cycle). In addition, boundaries of oscillation existence field were determined in space of parameter of used model.

---

1. V.L. Dyatlov, V.V. Konjashkin, B.S. Potapov, S.I. Fadeev, Film Electromechanics. Novosibirsk, Nauka, 1991. 248 pp.

2. E.A. Novikov, M.I. Golushko, Yu.A. Shitov. Approximation of Jacobi Matrix in the (*m*,*k*)-method of order three, Advanses in Modeling & Analysis, A, AMSE Press, 1995, V. 28, **3**, p. 19-40.

3. V. N. Kublanovskaya, On some algorithms for the solution of the complete eigenvalue problem, USSR Comput. Math. and Math. Phys., 3 (1961), pp. 637-657.

4. J. G. F. Francis, The QR transformation, parts I and II, Computer J., 4 (1961), pp. 265-272, 332-345

5. Numerical Recipes in Fortran. Second Edition. Cambridge University Press, 963 p.

БИФУРКАЦИИ РОЖДЕНИЯ ЦИКЛА В 11-СТАДИЙНОЙ МОДЕЛИ РЕАКЦИИ БЕЛОУСОВА-ЖАБОТИНСКОГО.

А.Б. Рыжков

Для понимания глобальной динамики системы необходимо знать положение и характер точек бифуркации системы. Поскольку их экспериментальное определение во многих случаях чрезвычайно трудоемко и требует использования прецизионной техники, эффективным средством, позволяющим прояснить бифуркационную структуру системы, являются модельные исследования. Отметим, что возникающие здесь проблемы, типичны для модельных исследований сложных химических систем. Это - большая размерность описывающей реакционный механизм системы ОДУ, их нелинейность и высокая жесткость, что предъявляет высокие требования к используемым численным методам. Одним из наиболее интересным примером здесь является известная реакция Белоусова-Жаботинского. Корректное описание данной реакции возможно лишь при использовании 11-стадийной модели позволяющей получить колебания и хаос наблюдаемые в эксперименте. Для исследования данной модели неприменимы обычные методы из-за её особенностей описанных выше. Поэтому необходимо разрабатывать новые алгоритмы и подходы к данной задаче, что и было сделано нами в данной работе. В частности было проведено исследование условий возникновения простейших колебаний для этой модели.

Возникновение колебаний в системе происходит при прохождении её через бифуркацию рождения предельного цикла - бифуркацию Андронова-Хопфа. Условием такой бифуркации является переход пары комплексно-сопряженных собственных значений матрицы линеаризации системы в состоянии равновесия через ноль. Поиск точек бифуркаций производился разработанной нами программой NoFad. Состояния равновесия находятся решением системы нелинейных уравнений соответствующим правым частям системы ОДУ методом Ньютона-Канторовича-Фадеева [1]. Оценка начального приближения для него производится решением задачи Коши (m,k)-методом 3-го порядка [2]. Далее находятся корни характеристического уравнения при помощи *QR*-алгоритма Кублановской-Фрэнсиса. Полученные таким образом собственные значения Якобиана участвуют в процедуре отыскания нулевого значения комбинированным методом половинного деления и Ньютона-Рафсона [3]. Подобным же образом вычисляется и максимальное значение корней на заданном интервале методом Брента [3]. Затем у найденных таким образом точек бифуркации определяется её характер: суб- или суперкритический (жёсткое и мягкое рождение цикла). Также при помощи программы было проведено определение границ области существования колебательных режимов в пространстве параметров используемой модели.

---

1. В.Л. Дятлов, В.В. Коняшкин, Б.С. Потапов, С.И. Фадеев. Пленочная электромеханика.-Новосибирск, Наука, 1991.

2 E.A. Novikov, M.I. Golushko, Yu.A. Shitov. Approximation of Jacobi Matrix in the (m,k)-method of order three, Advanses in Modeling & Analysis, A, AMSE Press, 1995, V. 28, **3**, p. 19-40.

3. Numerical Recipes in Fortran. Second Edition. Cambridge University Press, 963 p.