

В.Г. Моношкина, О.Б. Родимова

КАЧЕСТВЕННЫЙ АНАЛИЗ УРАВНЕНИЙ ОЗОННОГО ЦИКЛА В ОТСУТСТВИЕ ИЗЛУЧЕНИЯ

Проведен качественный анализ простейшей системы уравнений озонного цикла в случае отсутствия излучения. Получены полные фазовые портреты систем с фиксированной и произвольной концентрацией молекулярного кислорода. Отмечены особенности поведения концентраций со временем при различных начальных условиях.

1. Введение

Реакции озонного цикла в атмосфере стали в последнее время объектом пристального внимания, так как ответ на вопрос о необратимости происходящих в озонном слое изменений приобрел неожиданную актуальность. Численное решение обширных систем уравнений для концентраций участвующих в реакциях веществ дает, однако, лишь ограниченную информацию о возможной эволюции процесса, оставая без ответа упомянутый выше вопрос. Ответ на него и другие вопросы такого типа для систем, описываемых нелинейными дифференциальными уравнениями, часто может быть получен с помощью качественной теории дифференциальных уравнений или, что то же, теории динамических систем, см., например, [1]. Итогом качественного анализа является фазовый портрет рассматриваемой системы, который содержит все типы возможных для нее решений и их зависимости от начальных условий. Поэтому обращение к теории динамических систем с целью рассмотрения озонного цикла представляется своевременным и оправданным. Было бы логично получить фазовый портрет прежде всего для простейшего цикла реакций, обеспечивающего наличие озона в атмосфере, т. е. озонного цикла Чепмена [2]:



Оказалось, что не существует достаточно полного его обсуждения с точки зрения качественного анализа, хотя отдельные его аспекты и рассматривались в [3–5]. Полный же фазовый портрет даже простейшей системы так и не был получен. В этой ситуации в рамках реализации программы качественных исследований климатических процессов в [6, 7] было предпринято повторное обращение к качественному исследованию системы трех уравнений, описывающих цикл (1). Были найдены состояния равновесия системы в конечной части плоскости и на бесконечности, определен характер поведения траекторий в их окрестностях. Качественная структура системы оказалась достаточно богатой, что дает основания предполагать возможность нетривиального поведения траекторий в физически достижимой области.

Предполагая в дальнейшем найти поведение сепаратрис во всей плоскости, что необходимо для получения полного фазового портрета, мы в настоящей статье рассмотрим один из частных случаев системы (1), отвечающий отсутствию излучения. Для этого случая достаточно просто получается фазовый портрет, на примере которого могут быть прослежены те преимущества, которые обеспечивает качественный анализ. Кроме того, он может представлять и самостоятельный интерес, например, для изучения динамики озона в ночное время.

Случай отсутствия излучения отвечает наличию двух последних реакций в (1). Если рассматривать кислородную атмосферу как закрытый гомогенный изотермический реактор идеального смешения, то система нелинейных дифференциальных уравнений для концентраций ($[\text{O}_2] = \tilde{x}$, $[\text{O}] = \tilde{y}$, $[\text{O}_3] = \tilde{z}$) будет иметь вид

$$\begin{aligned} \dot{\tilde{x}} &= \kappa_2 \tilde{x}^2 \tilde{y} + 2\kappa_3 \tilde{y} \tilde{z}; \\ \dot{\tilde{y}} &= -\kappa_2 \tilde{x}^2 \tilde{y} - \kappa_3 \tilde{y} \tilde{z}; \end{aligned}$$

$$\dot{z} = \kappa_2 \tilde{x}^2 \tilde{y} - \kappa_3 \tilde{y} z. \quad (2)$$

Для удобства исследования система (2) с помощью замены переменных

$$t = \alpha \tilde{t}, \quad x = \beta \tilde{x}, \quad y = \gamma \tilde{y}, \quad z = \delta \tilde{z}, \quad (3)$$

где

$$\alpha = \kappa_3^2 / \kappa_2, \quad \beta = \gamma = \delta = \kappa_2 / \kappa_3,$$

может быть приведена к безразмерному виду:

$$\begin{aligned} \dot{x} &= -x^2 y + 2 y z, \\ \dot{y} &= -x^2 y - y z, \\ \dot{z} &= x^2 y - y z. \end{aligned} \quad (4)$$

Обычно концентрация O_2 на несколько порядков больше, чем концентрации O и O_3 . Это дает основания считать ее неизменной в процессе реакции. Такое приближение часто используется в литературе и, если следовать его логике в случае отсутствия излучения, система (4) должна быть при этом заменена на систему

$$\begin{aligned} \dot{y} &= -y(a+z), \\ \dot{z} &= y(a-z). \end{aligned} \quad (5)$$

Далее системы (4) и (5) будут рассмотрены по отдельности.

2. Случай постоянной концентрации O_2 .

Система (5) является динамической системой на плоскости, и приемы ее качественного анализа хорошо известны, см., например, [1, 8]. Краткое описание необходимых элементов качественного анализа дано (по просьбе редакционной коллегии журнала) в Приложении. Особенность системы (5) заключается в том, что правые части уравнений содержат общий множитель y . Рассмотрим систему

$$\begin{aligned} \dot{y} &= -(a+z), \\ \dot{z} &= a-z, \end{aligned} \quad (6)$$

отличающуюся от (5) отсутствием общего множителя. Очевидно, что стационарные состояния системы (6) будут таковыми и для системы (5). Система (6) не имеет стационарных состояний в конечной части плоскости. Исследование бесконечно удаленных точек, проводимое с помощью преобразований Пуанкаре ($y, z \rightarrow u, v$) дает две особые точки на бесконечности, одна из которых (B) является вырожденным узлом, другая (C) — седлоузлом с устойчивым узловым сектором. Расположение траекторий в окрестностях этих точек изображено на рис. 1. Этой информации оказывается достаточно, чтобы изобразить фазовый портрет системы. Он показан на рис. 2, а.

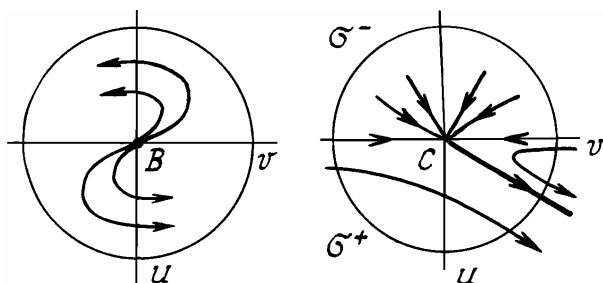


Рис. 1. Поведение траекторий в окрестностях особых точек на бесконечности для системы (6)

Напомним, что фазовый портрет рисуется в круге, на внутренность которого отображена вся плоскость (y, z) , причем бесконечно удаленные точки отображаются в точки окружности. Окрестности особых точек на ∞ , будучи разделены пополам «экватором» $u = 0$, отображаются на окрестности диаметрально противоположных точек окружности (см., например, σ^+ - и σ^- -окрестности точки C на

рис. 1 и рис. 2, а). Стрелки обозначают направление движения на траекториях. Такое отображение сохраняет характер поведения траекторий и приводит к приятной наглядности. Наиболее характерной чертой фазового портрета является наличие сепаратрисы ($C'aC''$), делящей фазовое пространство на две части. Уравнение сепаратрисы $ua = v$ в координатах (u, v) имеет вид $a = z$ в координатах (y, z) . Переход траекторий из одной части в другую недопустим. Появление траекторий в какой-либо из этих частей определяется начальными условиями. Для абстрактной системы, описываемой уравнениями (6), все траектории уходят на бесконечность. В случае, когда переменные имеют физический смысл концентраций, доступным для системы является лишь первый квадрант. В нем также присутствуют две области, разделенные сепаратрисой. Траектории же заканчиваются на границе квадранта, когда исчерпывается концентрация вещества y , т. е. атомарного кислорода.

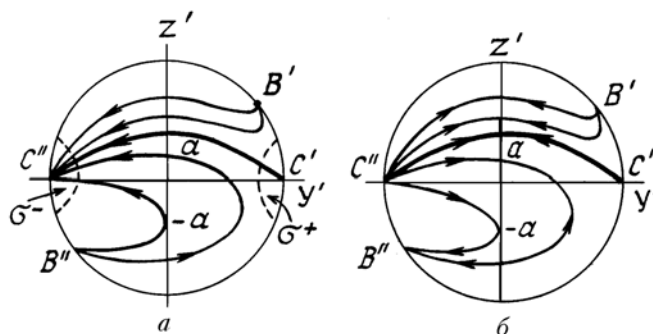


Рис. 2. Фазовый портрет системы (6) — а; системы (5), отличающейся от (6) наличием множителя y , — б

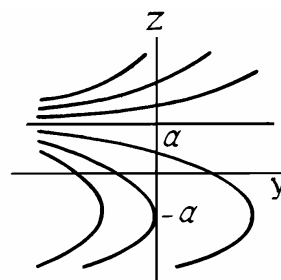


Рис. 3. Точное решение систем (5), (6) в плоскости (y, z)

Фазовый портрет системы (5) можно получить, используя уже имеющиеся для (6) результаты. К стационарным точкам системы (6) добавляются при этом точки, возникающие из равенства нулю общего для уравнений (5) множителя, $y = 0$, т. е. в данном случае это точки оси z . Таким образом, мы получим фазовый портрет системы (5) из такового для (6), обозначив в качестве особой линии ось z и изменив должным образом направления движения на траекториях (см. рис. 2, б). Поведение системы в первом квадранте на рис. 2, а и 2, б различается временной зависимостью. Если на рис. 2, б точки оси z — устойчивые стационарные состояния, так что в них $\dot{y} = 0$, $\dot{z} = 0$, то на рис. 2, а система подходит к точкам оси z с ненулевыми скоростями.

Системы (5), (6) могут быть проинтегрированы точно. Переменные y, z для них удовлетворяют уравнению

$$\frac{dz}{dy} = \frac{z - a}{z + a},$$

решением которого при начальных условиях $t = t_0, z = z_0, y = y_0$ является функция

$$y = y_0 + (z_0 - a) + 2a \ln \left(\frac{z - a}{z_0 - a} \right).$$

Это решение иллюстрирует рис. 3. Прямая $z = a$ является асимптотой для интегральных кривых. Сопоставление точного решения (рис. 3) и фазового портрета системы (рис. 2) лишний раз убеждает в том, что фазовый портрет дает полную информацию о системе за исключением несущественных для качественного анализа количественных деталей.

3. Случай произвольной концентрации O_2

При решении системы (4) необходимо учитывать ограничения на концентрации, накладываемые сохранением числа атомов в процессе реакции. В рассматриваемом случае имеется единственный закон сохранения

$$2x + y + 3z = A. \tag{7}$$

Использование (7) позволяет получить из (4) систему двух дифференциальных уравнений для двух выбранных переменных. Так, система, описывающая эволюцию O, O_3 , имеет следующий вид:

$$\left. \begin{aligned} \dot{y} &= (y/4) (-A^2 + 2Ay + (6A - 4)z - y^2 - 9z^2 - 6yz) \\ \dot{z} &= (y/4) (A^2 - 2Ay - (6A + 4)z + y^2 + 9z^2 + 6yz) \end{aligned} \right\}, \tag{8}$$

а системы, описывающие эволюцию O_2 , O_3 и O_2 , O , соответственно, приводятся к виду

$$\begin{cases} \dot{x} = (-A + 2x + 3z)(-2z + x^2) \\ \dot{z} = (-A + 2x + 3z)(z - x^2) \end{cases}, \quad (9)$$

$$\begin{cases} \dot{x} = (y/3)(2A - 4x - 2y - 3x^2) \\ \dot{y} = (y/3)(-A + 2x + y - 3x^2) \end{cases}^* \quad (10)$$

Фрагменты их фазовых портретов, отвечающие квадрантам с положительными концентрациями, приведены на рис. 4 и позволяют увидеть особенности поведения концентраций при различных начальных условиях. Прежде всего, появляется возможность выяснить, каким образом предположение о постоянстве концентрации O_2 влияет на качественное поведение системы. Сравним для этого рис. 2, б и рис. 4, а.

Число и характер особых точек остались без изменения, однако существенно иным стало их расположение. Седло-узел переместился из бесконечности в конечную часть плоскости, а узловые точки на ∞ находятся теперь в других квадрантах. Если при постоянной концентрации O_2 в первом квадранте были две области, разделенные сепаратрисой, при произвольной $[O_2]$ имеются три области, обозначенные на рис. 4, а цифрами 1, 2, 3. Наличие закона сохранения при произвольной $[O_2]$ накладывает ограничения на область изменения концентраций. Допустимой оказывается часть фазового пространства, например, на рис. 4, а, ограниченная сверху прямой $3z_0 + y_0 = A - 2x_0 = B \leq A$. Таким образом, вновь возникшая область 3 недоступна для данной системы. Для случая с постоянной $[O_2]$ аналогичных ограничений не существует. Рис. 5 иллюстрирует поведение $[O_3]$ и $[O]$ в зависимости от времени для систем (5) и (8) с $A = 1$ и с различными начальными условиями. На графиках представлены результаты численного решения этих систем, но качественное их поведение следует непосредственно из фазовых портретов, и выбор начальных условий для иллюстрирующих примеров производился на основе этой качественной картины. Рис. 6 еще раз показывает, что информация, содержащаяся в фазовом портрете, достаточна для выделения разных типов поведения траекторий. На нем представлены варианты поведения траекторий в зависимости от времени из различных районов физически допустимой области (см. рис. 4, б, где начальные условия для них отмечены крестиками).

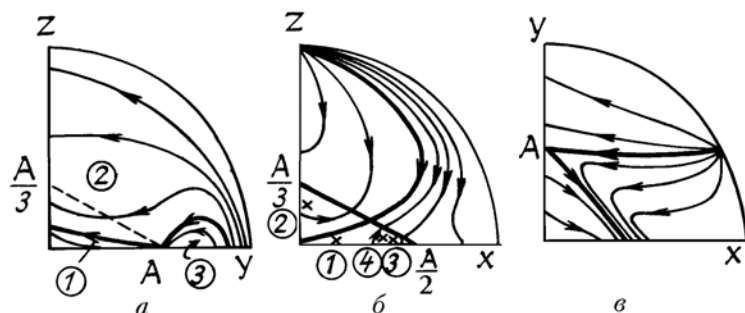


Рис. 4. Фрагменты фазовых портретов систем; а—(8), б—(9), в—(10)

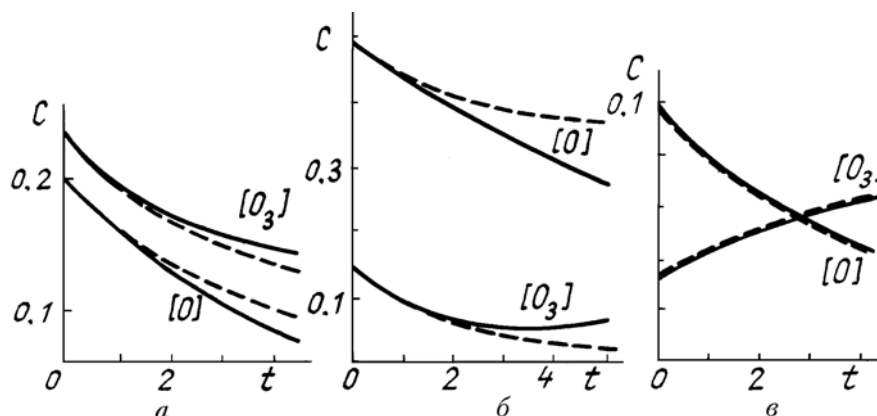


Рис. 5. Варианты поведения концентраций (y , z) в зависимости от времени для систем с постоянной (штриховые линии) и произвольной (сплошные) концентрацией O_2 , $A = 1$; а, б— $x_0^2 = 0,0025$; в— $x_0^2 = 0,16$

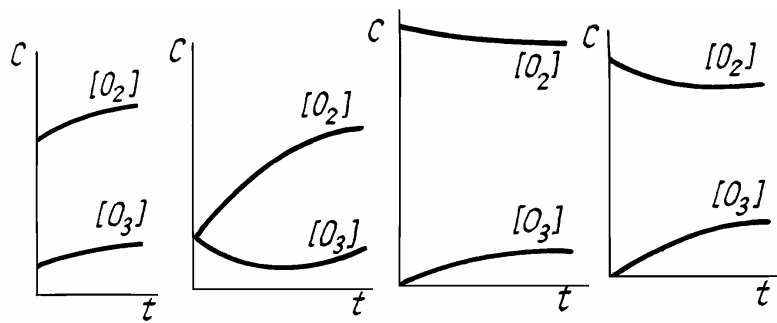


Рис. 6. Варианты поведения концентраций C в зависимости от времени для системы (9)

Заключение

Итак, изложенные выше результаты свидетельствуют о том, что фазовый портрет дает полную информацию о траекториях системы, показывая области с разным качественным поведением траекторий в зависимости от начальных условий и тенденции долговременного изменения решений. Подчеркнем, что в таком объеме информация о системе не может быть получена иными методами.

Помимо иллюстрации возможностей качественного анализа рассмотрение систем уравнений озонного цикла в отсутствие излучения позволяет сделать следующие выводы. Решения системы (5) с постоянной концентрацией O_2 в физически допустимой области монотонно меняются со временем. Решения системы (8) с произвольной концентрацией O_2 при некоторых начальных условиях обнаруживают немонотонное изменение со временем концентрации O_3 . Атмосферные концентрации кислорода отвечают области фазового пространства вблизи начала координат, где решения систем (5) и (8) практически неотличимы друг от друга. Нетривиальное поведение концентраций в системе (8) может представлять интерес для изучения процессов в химических реакторах. Результаты работы будут использованы для исследования озонного цикла с излучением.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Рассмотрим систему двух нелинейных дифференциальных уравнений

$$\begin{cases} \dot{x} = P(x, y) \\ \dot{y} = Q(x, y) \end{cases}, \quad (\text{П1})$$

правые части которых не зависят явно от времени и определены на всей плоскости (x, y) или в некоторой ее области G . Такая система удовлетворяет условиям существования и единственности решения и называется автономной динамической системой второго порядка в области G , которая может совпадать со всей плоскостью (x, y) . Каждая совокупность значений переменных x, y характеризует некоторое состояние системы. Совокупность всех состояний системы образует ее фазовое пространство. При заданных начальных условиях точка в фазовом пространстве движется по кривой, называемой фазовой траекторией. Через каждую точку фазового пространства проходит только одна фазовая траектория. Точки, в которых

$$P(x, y) = 0, Q(x, y) = 0, \quad (\text{П2})$$

т. е. в которых состояние системы не меняется со временем, представляют собой особые точки, или состояния равновесия системы. Особая точка сама является отдельной траекторией. Периодическим решениям отвечают, очевидно, замкнутые траектории.

Задавая в области G динамическую систему (П1), мы тем самым задаем некоторое семейство траекторий, или, другими словами, разбиение области G на траектории.

При отображениях плоскости в себя вид траекторий может сильно меняться. Выделим среди возможных отображений топологические отображения плоскости в себя, которые являются взаимнооднозначными и двусторонне непрерывными отображениями плоскости. Существуют такие характеристики разбиения на траектории, которые остаются неизменными при топологических отображениях, или, как говорят, являются топологически инвариантными. Так, замкнутая траектория остается замкнутой при топологическом отображении, остаются неизменными число и характер состояний равновесия, взаимное расположение замкнутых и незамкнутых траекторий и т.п.

Под качественным исследованием динамической системы или, что то же, под качественной картиной фазовых траекторий понимают нахождение всех свойств разбиения на траектории, которые являются топологически инвариантными.

Качественное исследование предполагает установление числа и характера состояний равновесия в конечной части плоскости и на бесконечности, наличия предельных циклов и расположения сепаратрис. Координаты состояний равновесия находятся, как упоминалось выше, из уравнений (П2). Если при малом возмущении, выводящем систему из состояния равновесия, изображающая точка не удаляется от состояния равновесия, оно является устойчивым; от неустойчивого положения равновесия точка удаляется, будучи раз выведена из него. Вопрос о типе устойчивости состояния равновесия (x_0, y_0) решается с помощью первого метода Ляпунова.

Разлагая правые части уравнений (П1) в ряд по отклонениям от состояний равновесия и перенося в него начало координат, получим из уравнений (П1):

$$d\xi/dt = a\xi + b\eta + \varphi(\xi, \eta),$$

$$d\eta/dt = c\xi + d\eta + \psi(\xi, \eta), \quad (\text{П3})$$

где $\xi = x - x_0$, $\eta = y - y_0$, $a = P'_x(x_0, y_0)$, $b = P'_y(x_0, y_0)$, $c = Q'_x(x_0, y_0)$, $d = Q'_y(x_0, y_0)$, и функции φ и ψ начинаются с членов не ниже второго порядка по ξ и η . Общее решение системы, получающейся из (П3) отбрасыванием нелинейных членов, имеет вид

$$\begin{aligned} \xi &= C_1 e^{\lambda_1 t} + C_2 e^{\lambda_2 t}, \\ \eta &= C_1 \lambda_1 e^{\lambda_1 t} + C_2 \lambda_2 e^{\lambda_2 t}, \end{aligned} \quad (\text{П4})$$

где λ_1, λ_2 являются корнями так называемого характеристического уравнения

$$\lambda^2 - T\lambda + \Delta = 0, \quad (\text{П5})$$

где $T = a + d$, $\Delta = ad - bc$. При $\Delta \neq 0$ состояние равновесия является простым. Возможны следующие типы простых состояний равновесия:

1. $\Delta > 0$, $T^2 - 4\Delta > 0$. Корни характеристического уравнения действительны и имеют одинаковые знаки. Состояние равновесия называется устойчивым узлом, когда $\lambda_1 < 0$, $\lambda_2 < 0$, и неустойчивым узлом, когда $\lambda_1 > 0$, $\lambda_2 > 0$, см. рис. 7, а. Стрелки на траекториях отвечают направлению возрастания времени. Из соотношений (П4) видно, что в первом случае координаты изображающей точки остаются в достаточно малой окрестности состояния равновесия, во втором — неограниченно удаляются от него.

2. $\Delta < 0$. Корни характеристического уравнения действительны и различных знаков: $\lambda_1 \cdot \lambda_2 < 0$. Соответствующее состояние равновесия называется седлом. В этом случае существуют четыре особые фазовые траектории, называемые сепаратрисами седла, по двум из которых изображающая точка приближается к состояниям равновесия, по двум другим — удаляется от него, см. рис. 7, б. При движении по траекториям, отличным от сепаратрис, изображающая точка в конечном счете удаляется от состояния равновесия. Таким образом, седло является неустойчивым состоянием равновесия. Сепаратрисы («разделяющие») делят фазовое пространство на части, так что траектории не могут проникать из одной части в другую.

3. $\Delta > 0$, $T^2 - 4\Delta < 0$, $T \neq 0$. Корни характеристического уравнения — комплексно сопряженные, и их действительные части отличны от нуля. Состояние равновесия называется фокусом, устойчивым при отрицательных действительных частях и неустойчивым при положительных, рис. 7, в. Траектории представляют собой спирали. Они, очевидно, отвечают периодическим движениям с меняющейся амплитудой. В случае чисто мнимых корней состояние равновесия называется центром. Траектории, проходящие через точки достаточно малой окрестности состояния равновесия, замкнуты и отвечают периодическим движениям с амплитудой, задаваемой начальными условиями.

В нелинейных системах могут также существовать замкнутые траектории, характеристики которых не зависят от начальных условий, а присущи системе как таковой. Такие замкнутые траектории называются предельными циклами. Поведение траекторий в окрестности предельного цикла изображено на рис. 7, д. Способы нахождения предельных циклов в общем случае еще являются, в известной мере, вопросом искусства.

В случае $\Delta = 0$ состояния равновесия являются сложными, для исследования характера их устойчивости недостаточно уравнений первого приближения (П3), и нужно предпринимать более подробные исследования.

Совокупность фазовых траекторий образует так называемый фазовый портрет системы. Рис. 7, а—д — представляет фрагменты фазовых портретов.

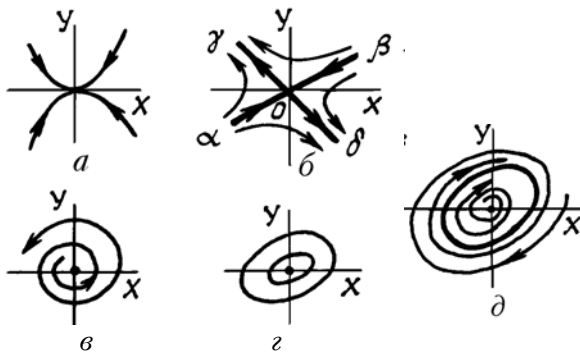


Рис. 7. Типы состояний равновесия: a — устойчивый узел; b — седло; траектории $\alpha 0$, $\beta 0$ и 0γ , 0δ — сепаратрисы седла; c — неустойчивый фокус; z — центр; d — устойчивый предельный цикл

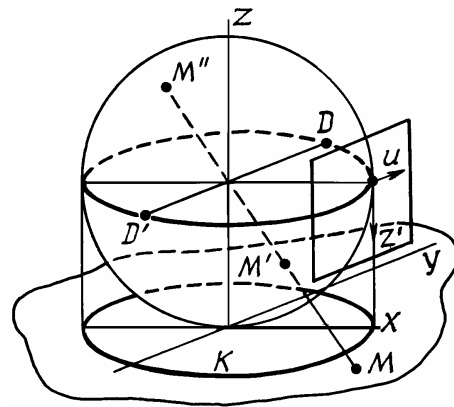


Рис. 8. Преобразования Пуанкаре

Описанные выше приемы позволяют определить поведение системы в конечной части плоскости. Для получения полной картины необходимо исследовать и бесконечно удаленные точки плоскости. Когда правые части (П1) — многочлены, это может быть проделано стандартными методами, с помощью так называемых преобразований Пуанкаре. Эти преобразования поясняет рис. 8. Каждой точке плоскости \mathbf{M} ставятся в соответствие две точки M' и M'' сферы единичного радиуса, касающейся плоскости в начале координат, находящиеся на пересечении сферы и прямой, соединяющей точку M с центром сферы. Точкам экватора соответствуют бесконечно удаленные точки плоскости. Конечная часть плоскости топологически переходит в поверхность сферы, т. е. число и характер особых точек сохраняются и на сфере. Однако на экваторе могут «проявиться» новые особые точки. Преобразование $x = 1/z'$, $y = u/z'$ позволяет изучить особые точки, лежащие на экваторе, за исключением «концов» оси y . Плоскость, для которой u , z' являются декартовыми координатами, есть касательная к сфере плоскость, перпендикулярная плоскости (x, y) и параллельная оси y . Для исследования концов оси y (точки D, D') нужно положить $x = v/z'$, $y = 1/z'$. В этом случае плоскость (v, z') будет параллельна оси x . Преобразованные к новым координатам системы уравнений исследуются далее на предмет наличия состояний равновесия с помощью уже описанных приемов. Нижняя полусфера затем ортогонально проектируется на круг K в плоскости (x, y) . В круге K будем, таким образом, иметь для системы полный фазовый портрет, т. е. картину особых точек и траекторий вместе с бесконечностью. Фазовый портрет фактически предоставляет полную качественную Информацию о системе, т. е. о том, какие типы движения вообще возможны в данной системе и при каких начальных условиях они осуществляются.

1. Андронов А.А., Леонтович Е.А., Гордон И.И., Майер А.Г. Качественная теория динамических систем второго порядка М.: Наука, 1966. 568 с.
2. Charman S. //Phil. Mag. Ser. 7. 1930. V. 10. № 64. P. 369–383.
3. Karol I. L. //Pure and Appl. Geophys. 1980. V. 118. № 3. P. 695–705.
4. Шабалова М. В. //Труды ГГО. 1985. Вып. 494. С. 77–82.
5. Kozak J.J., Nicolis G., Kress J.W., Sanglier M. //J. Non-Equilibrium Thermodyn. 1979. V. 4. № 2. P. 67–74.
6. Гордов Е.П., Родимова О.Б., Смирнов Ю.Е. //Оптика атмосферы. 1988. Т. 1. № 7. С. 56–63.
7. Gordov E.P., Rodimova O.B. //Abstracts of Fifth Scientific Assembly of IAMAP. 1989. V. 2. TC 36.
8. Баутин Н.Н., Леонтович Е.А. Методы и приемы качественного исследования динамических систем на плоскости. М.; Наука, 1976. 494 с.

Институт оптики атмосферы СО РАН,
Томск

Поступила в редакцию
21 ноября 1991 г.

V. G. Monoshkina, O. B. Rodimova. **Qualitative Analysis of the Ozone Cycle Equations.**

The qualitative analysis is performed of the simple system of the ozone cycle equations for the case of no incident radiation. The phase portraits are drawn for the systems with fixed and arbitrary concentration of the molecular oxygen. Some peculiarities in the time behaviour of concentrations at different initial conditions are discussed.