

## Kinetyczna i statystyczna analiza chaosu chemicznego w układach z bifurkacjami Hopfa i węzeł-siodło

Układami doświadczalnymi, których dynamikę chaotyczną badano, były reakcje Bielousowa-Żabotyńskiego w reaktorze chemicznym, opisywane w [1], [3], [5] i [6]. W układach tych stwierdzono przejście do oscylacji poprzez bifurkacje Hopfa i węzeł-siodło (tzw. SNIPER). Następnie testowano wpływ zewnętrznego periodycznego zaburzenia w pobliżu tych bifurkacji. Obserwowano doświadczalnie, że w zależności od częstości tego zaburzenia wielkości stężeń związków chemicznych w reaktorze zmieniały się jakościowo różnorodnie, od synchronizacji poprzez oscylacje wielokrotne i obszary przejściowe do chaosu.

Kinetykę przeprowadzanych reakcji opisano układem równań różniczkowych zwyczajnych odpowiadającym reakcjom typu Bielousowa-Żabotyńskiego, tak zwanym zmodyfikowanym Oregonatorem w przestrzeni 3D [7], z periodyczną funkcją  $k_0(t)$  odpowiadającą zewnętrznemu zaburzeniu:

$$\begin{aligned}\dot{X} &= k_1AY - k_2XY + k_3AX - 2k_4X^2 - k_0X \\ \dot{Y} &= -k_1AY - k_2XY + k_5fZ + k_0(Y_0 - Y) \\ \dot{Z} &= k_3AX - k_5Z + k_0(Z_0 - Z)\end{aligned}\quad (1)$$

gdzie  $A \equiv [\text{BrO}_3^-]$ ,  $X \equiv [\text{HBrO}_2]$ ,  $Y \equiv [\text{Br}^-]$ ,  $Z \equiv 2[\text{Mn(III)}]$ , a  $f$  jest współczynnikiem stechiometrycznym odpowiadającym odtwarzaniu substancji  $Y$  przy zużywaniu substancji  $Z$ .

Układ ten analizowano metodą jakościową stanów stacjonarnych upraszczając go do dwóch niezależnych zmiennych  $Y$  oraz  $Z$  i badając zależność, a także wzajemne położenie otrzymanych izoklin od parametrów.

Zastosowane metody statystyczne to konstrukcja funkcji autokorelacji na podstawie danych eksperymentalnych dotyczących chaosu powstającego w pobliżu bifurkacji Hopfa oraz bifurkacji węzeł-siodło przy zastosowaniu algorytmu Grassbergera-Procaccia [2] wyznaczania funkcji autokorelacji  $C(l, r)$  i wymiaru korelacyjnego [4]  $\nu$ :

$$\nu = \lim_{l \rightarrow 0} \frac{\ln C(l, r)}{\ln l}.\quad (2)$$

Dla stanów chaotycznych uzyskiwanych poprzez odmienne bifurkacje przeprowadzono również badanie zgodności z wybranymi rozkładami statystycznymi.

### Literatura

- [1] R. J. Field and M. Burger, *Oscillations and Traveling Waves in Chemical Systems*, Wiley, New York 1985.
- [2] P. Grassberger and I. Procaccia, *Physica D* 9 (1983), 189.
- [3] H. Ściegosz and S. Pokrzywnicki, *Acta Chemica Scandinavica* 43 (1989), 926.
- [4] M. Dhamala, Y.-Ch. Lai, E. J. Kostelich, *Phys. Rev. E*, 64 (2001), 056207-1-9.
- [5] S. Pokrzywnicki, H. Ściegosz, *Book of Abstracts, Dynamics Days Europe 2002*, Heidelberg, July 15–19, 2002, 78.
- [6] S. Pokrzywnicki, H. Ściegosz, *Applied Mathematics and Applications of Mathematics*, AMAM 2003, Nice, France, 10–13 February 2003, 91(36).
- [7] K. Bar-Eli, R. M. Noyes, *J. Chem. Phys.* 86(4) (1987), 1927.