

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΑΙΓΑΙΟΥ  
ΣΧΟΛΗ ΘΕΤΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ  
ΤΜΗΜΑ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ

ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΩΝ ΣΠΟΥΔΩΝ  
«ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΗ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ  
ΣΤΙΣ ΦΥΣΙΚΕΣ ΕΠΙΣΤΗΜΕΣ  
ΚΑΙ ΣΤΙΣ ΣΥΓΧΡΟΝΕΣ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΕΣ»

---

**ΦΑΙΝΟΜΕΝΑ ΔΙΑΚΛΑΔΩΣΗΣ  
ΤΥΠΟΥ HOPF  
ΣΕ ΧΗΜΙΚΑ ΚΑΙ ΒΙΟΛΟΓΙΚΑ ΣΥΣΤΗΜΑΤΑ**

---

ΜΑΡΙΑ ΡΕΥΜΑΤΑ

ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΗ ΔΙΑΤΡΙΒΗ

ΚΑΡΛΟΒΑΣΙ ΣΑΜΟΥ, 2004

*Η εργασία αυτή αφιερώνεται  
σ' αυτούς που μου συμπαράστέκονται  
σε κάθε μου βήμα...*

# 1 ΠΡΟΛΟΓΟΣ

Η μαθηματική μοντελοποίηση αποτελεί ένα σημαντικότατο εργαλείο για την κατανόηση και διερεύνηση χημικών, βιολογικών και βιοχημικών δράσεων. Σε συνέχεια της εφαρμογής νόμων της θερμοδυναμικής και της χημικής κινητικής, καθώς και εμπειρικών νόμων που προκύπτουν από πειραματικά δεδομένα, η μαθηματική προσομοίωση καθιστά δυνατή τη μελέτη της δυναμικής συμπεριφοράς ακόμη και πολύπλοκων συστημάτων, επιτρέποντας την εκτίμηση της εικόνας τους μια οποιαδήποτε χρονική στιγμή καθώς και τον προσδιορισμό των συνθηκών που οδηγούν στην εμφάνιση μιας συγκεκριμένης συμπεριφοράς.

Με την παρούσα μεταπτυχιακή διατριβή επιχειρείται μια εισαγωγική προσέγγιση της δυναμικής συμπεριφοράς ομογενών ταλαντούμενων αντιδράσεων που εμφανίζουν το φαινόμενο διακλάδωσης Hopf. Αρχικά, γίνεται μια συνοπτική αναφορά στη μοντελοποίηση των χημικών φαινομένων και στις ταλαντούμενες χημικές αντιδράσεις. Ακολουθεί η διατύπωση και απόδειξη του θεωρήματος διακλάδωσης Hopf, στην περίπτωση συστήματος δεύτερης τάξης. Στη συνέχεια, μελετάται ο μηχανισμός αντίδρασης Brusselator που αποτελεί χαρακτηριστικό παράδειγμα αυτοκαταλυόμενης ταλαντούμενης αντίδρασης με δύο χημικά ενδιάμεσα. Πρώτα εξετάζεται η ευστάθεια του συστήματος απουσία διάχυσης και με την εφαρμογή του θεωρήματος διακλάδωσης Hopf αποδεικνύεται η ύπαρξη περιοδικών λύσεων. Κατόπιν μελετάται η συμπεριφορά του ίδιου μοντέλου λαμβάνοντας υπόψη το φαινόμενο της διάχυσης και προσδιορίζονται οι συνθήκες που θα πρέπει να ικανοποιούνται για την εμφάνιση αστάθειας Turing.

Από τη θέση αυτή, θα ήθελα να ευχαριστήσω θερμά:

- Τον Επιβλέποντα Διδάσκοντα κ. Νίκο Καραχάλιο, ο οποίος με εισήγαγε στην περιοχή των Δυναμικών Συστημάτων, τόσο με τη διδασκαλία του στο ομώνυμο μάθημα του Προγράμματος Μεταπτυχιακών Σπουδών, όσο και με την ανάθεση του θέματος αυτού για τη μεταπτυχιακή μου διατριβή. Τον ευχαριστώ, επίσης, για την καθοδήγηση, τις συμβουλές και τη συμπαράστασή του καθ' όλη τη διάρκεια εκπόνησης της εργασίας αυτής.
- Τους Διδάσκοντες των οποίων τα μαθήματα είχα την τύχη να παρακολουθήσω κατά τη διάρκεια της φοίτησής μου στο Πρόγραμμα Μεταπτυχιακών Σπουδών του Τμήματος Μαθηματικών του Πανεπιστημίου Αιγαίου και συγκεκριμένα: τον κ. Γιώργο Κόκκορη (Μαθηματικά Μοντέλα στις Περιβαλλοντικές Επιστήμες & Μαθηματικά Μοντέλα στις

Βιολογικές Επιστήμες), τον κ. Αθανάσιο Λυμπερόπουλο (Μερικές Διαφορικές Εξισώσεις), τον κ. Γιώργο Ηλιόπουλο (Πιθανότητες), τον κ. Αγάπιο Πλατή (Ταυτοποίηση Συστημάτων), τους κ. Δημήτρη Κανδυλάκη και Γιώργο Γραββάνη (Αριθμητική Ανάλυση).

- τον Διευθυντή του Προγράμματος Μεταπτυχιακών Σπουδών του Τμήματος Μαθηματικών του Πανεπιστημίου Αιγαίου, Καθηγητή κ. Μιχάλη Ανούση, για το ενδιαφέρον του και τις συμβουλές του.
- τον Λέκτορα κ. Αντώνη Τσολομύτη για τη βοήθεια που μου πρόσφερε πάνω σε θέματα του  $\text{L}^{\text{A}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ .

Καρλόβασι Σάμου, Ιανουάριος 2005

Μαρία Ι. Ρευματά

*Πάντα πίστευα ότι η επιστήμη είναι διάλογος με τη φύση.  
Όπως συμβαίνει σε κάθε αυθεντικό διάλογο, οι απαντήσεις  
είναι συχνά απροσδόκητες.*

(ILYA PRIGOGINE, Βραβείο Nobel Χημείας, 1977)

# Περιεχόμενα

<b>1 ΠΡΟΛΟΓΟΣ</b>	<b>iii</b>
<b>2 ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΤΑΛΑΝΤΟΥΜΕΝΩΝ ΧΗΜΙΚΩΝ ΑΝΤΙΔΡΑΣΕΩΝ</b>	<b>2</b>
2.1 <b>ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΧΗΜΙΚΩΝ ΑΝΤΙΔΡΑΣΕΩΝ</b> . . . . .	2
2.1.1 Εύρεση του κινητικού μηχανισμού μιας αντίδρασης . . .	2
2.1.2 Κινητική σύνθετων χημικών αντιδράσεων . . . . .	3
2.2 <b>ΤΑΛΑΝΤΟΥΜΕΝΕΣ ΧΗΜΙΚΕΣ ΑΝΤΙΔΡΑΣΕΙΣ</b> . . . . .	5
2.2.1 Γενικά . . . . .	5
2.2.2 Μια συνοπτική ιστορική αναδρομή - Η αντίδραση Belousov-Zhabotinsky . . . . .	5
2.2.3 Μαθηματική προσομοίωση ταλαντούμενων χημικών αντιδράσεων . . . . .	7
<b>3 ΤΟ ΘΕΩΡΗΜΑ ΔΙΑΚΛΑΔΩΣΗΣ HOPF</b>	<b>9</b>
3.1 <b>ΔΙΑΚΛΑΔΩΣΗ HOPF</b> . . . . .	9
3.2 <b>ΔΙΑΤΥΠΩΣΗ ΚΑΙ ΑΠΟΔΕΙΞΗ ΘΕΩΡΗΜΑΤΟΣ ΔΙΑΚΛΑΔΩΣΗΣ HOPF</b> . . . . .	10
<b>4 Ο ΜΗΧΑΝΙΣΜΟΣ ΑΝΤΙΔΡΑΣΗΣ BRUSSELATOR</b>	<b>24</b>
4.1 <b>ΤΟ ΜΟΝΤΕΛΟ BRUSSELATOR ΜΕ ΑΜΕΛΗΤΑ ΤΗΝ ΕΠΙΔΡΑΣΗ ΦΑΙΝΟΜΕΝΩΝ ΔΙΑΧΥΣΗΣ</b> . . . . .	26
4.1.1 Μαθηματική μοντελοποίηση της αντίδρασης Brusselator απουσία διάχυσης . . . . .	26
4.1.2 Μελέτη της ευστάθειας του συστήματος Brusselator χωρίς φαινόμενα διάχυσης . . . . .	27
4.1.3 Εφαρμογή του Θεωρήματος Διακλάδωσης Hopf στο μοντέλο Brusselator χωρίς διάχυση . . . . .	30
4.2 <b>ΤΟ ΜΟΝΤΕΛΟ BRUSSELATOR ΠΑΡΟΥΣΙΑ ΔΙΑΧΥΣΗΣ</b> . . . . .	47
4.2.1 Αστάθεια Turing . . . . .	47
4.2.2 Μαθηματική μοντελοποίηση της αντίδρασης Brusselator παρουσία διάχυσης . . . . .	47
4.2.3 Στοιχεία από τη θεωρία των προβλημάτων Sturm-Liouville και εφαρμογή στην επίλυση της εξίσωσης θερμότητας . .	51
4.2.4 Μελέτη του γραμμικοποιημένου συστήματος που αντιστοιχεί στο σύστημα Brusselator παρουσία διάχυσης . .	58
<b>Α΄ ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ</b>	<b>67</b>
<b>Β΄ ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ</b>	<b>70</b>

## **2 ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΤΑΛΑΝΤΟΥΜΕΝΩΝ ΧΗΜΙΚΩΝ ΑΝΤΙΔΡΑΣΕΩΝ**

### **2.1 ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΧΗΜΙΚΩΝ ΑΝΤΙΔΡΑΣΕΩΝ**

Το ποια θα είναι η εξέλιξη ενός χημικού φαινομένου, δηλαδή μιας χημικής αντίδρασης, σε δεδομένες συνθήκες, σε σχέση με το χρόνο, αποτελεί ένα σημαντικό θέμα που απασχολεί πολλούς τομείς της χημικής και βιοχημικής μηχανικής, της χημείας και της βιολογίας, με πολλές προεκτάσεις σε ποικίλες εφαρμογές.

Μελετώντας τη δυναμική ενός συστήματος μπορεί αφενός να εκτιμηθεί η συμπεριφορά που αυτό θα εμφανίσει μια οποιαδήποτε χρονική στιγμή και αφετέρου να εξακριβωθούν οι ιδιαίτερες συνθήκες που οδηγούν στην εμφάνιση συγκεκριμένων ιδιοτήτων στο χρόνο και στο χώρο.

Η μαθηματική μοντελοποίηση αποτελεί ένα από τα σημαντικότερα εργαλεία για την κατανόηση και διερεύνηση ποικίλων φαινομένων. Ο ρόλος της στη χημική και βιοχημική μηχανική είναι καθοριστικός διότι στη μαθηματική προσομοίωση στηρίζεται η περιγραφή της ποιοτικής συμπεριφοράς του μηχανισμού μιας χημικής αντίδρασης, μετά την εφαρμογή νόμων της θερμοδυναμικής και της χημικής κινητικής ή εμπειρικών νόμων που προκύπτουν από πειραματικά δεδομένα.

#### **2.1.1 Εύρεση του κινητικού μηχανισμού μιας αντίδρασης**

Οι περισσότερες από τις χημικές αντιδράσεις που συμβαίνουν στη φύση είναι σύνθετες. Αποτελούνται από ένα δίκτυο απλών αντιδράσεων, οι οποίες μπορεί να είναι αμφίδρομες, παράλληλες, διαδοχικές, αντίθετες, αλυσιδωτές κλπ. Οι απλές αυτές αντιδράσεις, με τη σειρά τους, αναλύονται σε απλούστερες, τις στοιχειώδεις αντιδράσεις ή ενδιάμεσα στάδια. Η διάκριση μεταξύ των απλών και των στοιχειωδών αντιδράσεων συνεχώς αναμορφώνεται. Αντιδράσεις οι οποίες παλαιότερα θεωρούνταν ως στοιχειώδεις, σήμερα θεωρούνται απλές, αφού διαπιστώθηκε ότι αποτελούνται από άλλες απλούστερες. Κατά τη διάρκεια δε της εξέλιξης μιας αντίδρασης, σχηματίζονται, ενδιάμεσα, ενώσεις που τελικά δεν εμφανίζονται στη στοιχειομετρική της εξίσωση. Τα ενδιάμεσα αυτά προϊόντα που διακρίνονται σε σταθερά ενδιάμεσα και σε ασταθή ενδιάμεσα ή ενεργά κέντρα (τα οποία είναι δραστικότερα από τα πρώτα), ενώ παρεμβάλλονται μεταξύ των αντιδρώντων και των προϊόντων, τελικά καταναλώνονται και γι' αυτό δεν εμφανίζονται στη στοιχειομετρική εξίσωση που περιγράφει την

αντίδραση.

Η εύρεση του κινητικού μηχανισμού, δηλαδή του μοντέλου μιας χημικής αντίδρασης, αποτελεί ένα θεμελιώδες και πολυσύνθετο πρόβλημα. Το πρώτο βήμα, συνήθως, είναι η μετατροπή των πειραματικών δεδομένων, που τις περισσότερες φορές έχουν τη μορφή της συγκέντρωσης συναρτήσει του χρόνου, σε μια διαφορική κινητική εξίσωση που θα συνδέει το ρυθμό της αντίδρασης με τις συγκεντρώσεις αντιδρώντων, προϊόντων και καταλύτη. Το επόμενο βήμα είναι η διερεύνηση αυτού του εμπειρικού κινητικού νόμου, με τον καθορισμό και την καταγραφή όλων των δυνατών δικτύων, των πιθανών απλών και στοιχειωδών αντιδράσεων, καθώς και η τελική «φορμαλιστική» διατύπωση του μηχανισμού. Ακολουθεί η έρευνα για την αναζήτηση και άλλων μοντέλων που πιθανόν βρίσκονται σε συμφωνία με τα εν λόγω πειραματικά δεδομένα. Αν από το στάδιο αυτό αποκαλυφθεί ότι δεν υπάρχει αμφιμονοσήμαντη αντιστοιχία μεταξύ εμπειρικού κινητικού νόμου και μηχανισμού τότε γίνονται συμπληρωματικά πειράματα, κινητικής φύσης ή μη, προκειμένου να αποκλειστούν ορισμένοι, τουλάχιστον, φαινομενικά πιθανοί μηχανισμοί.

### 2.1.2 Κινητική σύνθετων χημικών αντιδράσεων

Η κινητική των σύνθετων αντιδράσεων στηρίζεται στην πειραματική «αρχή της ανεξαρτησίας», σύμφωνα με την οποία εάν σε ένα σύστημα παίρνουν μέρος αρκετές αντιδράσεις, τότε κάθε μια από αυτές ακολουθεί το βασικό κινητικό νόμο και προχωρεί ανεξάρτητα από τις άλλες. Όταν είναι, λοιπόν, γνωστά όλα τα επιμέρους στοιχειώδη στάδια μιας αντίδρασης μπορούν να γραφούν οι εξισώσεις του ρυθμού της αντίδρασης με βάση το *νόμο δράσης των μαζών*. Σύμφωνα με αυτόν, ο ρυθμός μιας στοιχειώδους, ομογενούς χημικής αντίδρασης, είναι ανάλογος με το γινόμενο των δρώσων ή ενεργών μαζών των αντιδρώντων (ατόμων, μορίων, ιόντων, ριζών). Είναι, δηλαδή, ανάλογος του γινομένου των συγκεντρώσεων των αντιδρώντων σωμάτων υψωμένων στους αντίστοιχους στοιχειομετρικούς τους συντελεστές. Για τη στοιχειώδη αντίδραση π.χ.



ο ρυθμός της, σύμφωνα με το νόμο δράσης των μαζών, είναι:

$$r = k[A]^2[B]$$

όπου  $[A]$  και  $[B]$  είναι οι συγκεντρώσεις των σωμάτων A και B αντίστοιχα, ενώ  $k$  είναι ο συντελεστής του ρυθμού της αντίδρασης.



Συνδυάζοντας όλους τους ρυθμούς των επιμέρους στοιχειωδών σταδίων προκύπτουν οι (διαφορικές) εξισώσεις του ρυθμού για τη συνολική αντίδραση. Οι κινητικές αυτές μερικές φορές είναι ολοκληρώσιμες και μπορούν να ελεγχθούν πειραματικά. Στις περισσότερες, όμως, περιπτώσεις η ολοκλήρωση, ακόμη και με αριθμητικές μεθόδους, δε είναι εύκολη, δεδομένου ότι τα περισσότερα χημικά συστήματα είναι, συνήθως, πολύπλοκα. Για το λόγο αυτό, μελετάται η ποιοτική τους συμπεριφορά με τη βοήθεια της θεωρίας των Δυναμικών Συστημάτων, όπως φαίνεται και στην παρούσα εργασία.

## 2.2 ΤΑΛΑΝΤΟΥΜΕΝΕΣ ΧΗΜΙΚΕΣ ΑΝΤΙΔΡΑΣΕΙΣ

### 2.2.1 Γενικά

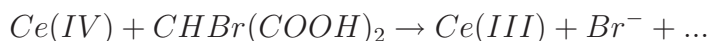
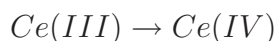
Στις περισσότερες χημικές αντιδράσεις, οι συγκεντρώσεις των σωμάτων που περιλαμβάνονται στο αντιδρών σύστημα είναι μονότονες συναρτήσεις του χρόνου. Υπάρχουν, ωστόσο, και αντιδράσεις κατά τις οποίες, μακριά από την ισορροπία, εμφανίζονται περιοδικές μεταβολές στη συγκέντρωση ενός ή περισσότερων από τα σώματα που λαμβάνουν μέρος σ' αυτές. Παρατηρείται, δηλαδή, η συγκέντρωσή τους να αυξάνεται και να ελαττώνεται, περιοδικά, μεταξύ δύο ορίων. Σε άλλες, δε, περιπτώσεις παρατηρείται η δημιουργία ταλαντώσεων στο χώρο και η παραγωγή *χωρικών μορφωμάτων (spatial patterns)*. Όλα αυτά τα αντιδρώντα συστήματα αναφέρονται ως *ταλαντούμενες χημικές αντιδράσεις (oscillating chemical reactions)* και παρουσιάζουν μεγάλο ενδιαφέρον. Πολλά φυσικά και βιολογικά φαινόμενα, όπως για παράδειγμα ο καρδιακός παλμός ή η γλυκόλυση, αποτελούν ταλαντούμενα χημικά συστήματα, ενώ η δημιουργία χωρικών μορφωμάτων σχετίζεται με την ύπαρξη ανάλογων δομών σε ποικίλους ζωικούς και φυτικούς οργανισμούς (μορφογένεση).

### 2.2.2 Μια συνοπτική ιστορική αναδρομή - Η αντίδραση Belousov-Zhabotinsky

Η μελέτη ομογενών ταλαντούμενων χημικών αντιδράσεων ξεκίνησε το 1910, όταν ο Alfred Lotka παρουσίασε μια θεωρητική αντίδραση η οποία εμφάνιζε αποσβεννόμενη ταλάντωση. Λίγα χρόνια αργότερα (1920), ο Lotka πρότεινε το μηχανισμό μιας ταλαντούμενης θεωρητικής αντίδρασης, που ονομάστηκε μοντέλο Lotka-Volterra, για την περιγραφή αλληλεπιδράσεων θηρευτή-θηράματος. Εντούτοις, ο πρώτος που επιβεβαίωσε πειραματικά τη δημιουργία ταλαντώσεων σε χημικές αντιδράσεις ήταν ο W. C. Bray (1921), ο οποίος παρατήρησε ότι υφίσταται ταλάντωση η συγκέντρωση ιωδίου καθώς και ο ρυθμός σχηματισμού οξυγόνου, στην αντίδραση διάσπασης του υπεροξειδίου του υδρογόνου, με ιωδικά ιόντα ( $\text{IO}_3^-$ ), σε οξυγόνο και νερό (αντίδραση Bray-Liebhafsky). Η ανακάλυψη, όμως, του Bray αντιμετωπίστηκε αρνητικά από την επιστημονική κοινότητα της εποχής, θεωρώντας ότι έρχεται σε αντίθεση με το δεύτερο νόμο της Θερμοδυναμικής. Στη συνέχεια ήρθε η ανακάλυψη της πιο διάσημης, ιστορικά, ταλαντούμενης αντίδρασης, από τον Boris Belousov (1951, 1959), οι έρευνες του οποίου συνεχίστηκαν από τον Anatol Zhabotinskii (1964): της αντίδρασης Belousov-Zhabotinskii, ή, πιο απλά, αντίδρασης B-Z.

Μελετώντας το κύκλο του Krebs, ο Belousov παρατήρησε ότι ένα μίγμα κίτρικου οξέος, ιόντων  $\text{BrO}_3^-$  και σέριου (Ce) ως καταλύτη, παρουσίαζε, μέσα σε διάλυμα θειικού οξέος, περιοδικές μεταβολές στο χρώμα του. Συγκεκριμένα, από άχρωμο, το διάλυμα αποκτούσε κίτρινο χρώμα, στη συνέχεια αποχρωματίζονταν, μετά ξαναγινόταν κίτρινο κ.ο.κ., γεγονός που υποδήλωνε ότι ο λόγος των συγκεντρώσεων των ιόντων Ce(IV) και Ce(III) υφίστατο ταλάντωση. Ωστόσο και η εργασία του Belousov δεν έγινε αποδεκτή και το αντίστοιχο άρθρο του έμεινε αδημοσίευτο για χρόνια. Το 1961, δέκα χρόνια μετά τα αρχικά πειράματα του Belousov, ο A. M. Zhabotinskii αναπαρήγαγε εύκολα τα αποτελέσματα στα οποία είχε καταλήξει ο Belousov και άρχισε να μελετά παρόμοια συστήματα χρησιμοποιώντας ως αναγωγικό μέσο μαλικό ή μαλονικό οξύ.

Ο Zhabotinskii πρότεινε ένα μηχανισμό για την περιγραφή του αντιδρώντος αυτού συστήματος, του οποίου η βασική ιδέα είναι η εξής:



Κατά τη μετάβαση του σέριου από την τρίτη στην τέταρτη οξειδωτική βαθμίδα, τα ιόντα  $\text{BrO}_3^-$  δρουν ως αυτοκαταλύτης, ενώ τα ιόντα  $\text{Br}^-$  παρεμποδίζουν την αντίδραση αυτή. Καθώς παράγεται Ce(IV), αυξάνεται ο ρυθμός της αντίδρασης που περιγράφεται από τη δεύτερη χημική εξίσωση. Αυτό οδηγεί σε υψηλές συγκεντρώσεις ιόντων  $\text{Br}^-$ , το οποίο παρεμποδίζει την πρώτη αντίδραση και μειώνει το ρυθμό της. Τη μείωση στη συγκέντρωση του Ce(IV) ακολουθεί και η μείωση της συγκέντρωσης βρωμιόντων και ο κύκλος ξαναρχίζει.

Ο πλήρης μηχανισμός της αντίδρασης B-Z είναι πολύ πολύπλοκος και αποτελεί ακόμη και σήμερα αντικείμενο μελέτης. Σε μια πρόσφατη, βελτιωμένη «έκδοσή» του, αποτελείται από 80 στοιχειώδη βήματα και 26 ενδιάμεσα είδη(!) Θεωρείται, όμως, ότι ο απλοποιημένος μηχανισμός που έχουν προτείνει οι Field, Körös και Noyes (1972), καθώς και το μοντέλο Oregonator (Field, Noyes, 1974), αποτελούν καλές προσεγγίσεις του βασικού μηχανισμού.

Θα πρέπει να σημειωθεί ότι η αντίδραση B-Z αποτελεί την πρώτη αντίδραση που ανακαλύφθηκε ότι παρουσιάζει ταλάντωση τόσο στο χρόνο, με την περιοδική μεταβολή του χρώματος του διαλύματος στο οποίο λαμβάνει χώρα, όσο και στο χώρο, με τη δημιουργία, αρχικά, κηλίδων και στη συνέχεια ομόκεντρων δακτυλίων και σπειροειδών μορφών.

Η μελέτη ταλαντούμενων χημικών αντιδράσεων και μη γραμμικών δυναμικών συστημάτων στη χημεία έχει σημειώσει ουσιαστική πρόοδο τα τελευταία 35 χρόνια, με καθοριστική τη συνεισφορά της αντίδρασης B-Z από τη μια και της θεωρίας των δομών έκλυσης του Ilya Prigogine από την άλλη. Σήμερα είναι γνωστός σημαντικός αριθμός αντιδράσεων που παρουσιάζουν περιοδική συμπεριφορά και σε πολλές από αυτές έχουν περιγραφεί λεπτομερώς οι μηχανισμοί τους. Υπάρχει, επίσης, ένας αξιόλογος αριθμός από συστήματα, τόσο πραγματικά όσο και θεωρητικά, τα οποία μπορούν να χρησιμοποιηθούν για τη μελέτη πολύπλοκων ταλαντούμενων συστημάτων.

### 2.2.3 Μαθηματική προσομοίωση ταλαντούμενων χημικών αντιδράσεων

Οι μαθηματικές προσομοιώσεις ταλαντούμενων αντιδράσεων οδηγούν σε ένα σύστημα διαφορικών εξισώσεων. Στην περίπτωση που αγνοούνται τα φαινόμενα διάχυσης, το σύστημα αποτελείται συνήθως από συνήθεις διαφορικές εξισώσεις και έχει τη μορφή

$$\frac{dx}{dt} = f(x) \quad (1)$$

όπου η  $f$  είναι μη γραμμική συνάρτηση που περιγράφει την κινητική της αντίδρασης. Το ενδιαφέρον επικεντρώνεται, κυρίως, στις περιοδικές λύσεις της (1), οι οποίες είναι τέτοιες ώστε

$$x(t + T) = x(t) \quad (2)$$

όπου  $T > 0$  είναι η περίοδος. Στο χώρο φάσεων των συγκεντρώσεων, η διαδρομή (trajectory) μιας περιοδικής λύσης είναι μια απλή κλειστή καμπύλη (orbit) έστω  $\gamma$ . Εάν η λύση  $x_0(t)$  είναι αυτή που αντιστοιχεί στον οριακό κύκλο, τότε είναι ασυμπτωτικά ευσταθής εάν οποιαδήποτε μικρή απομάκρυνση από τη  $x_0$ , ή τη  $\gamma$ , τελικά τείνει στο μηδέν καθώς  $t \rightarrow \infty$ .

Στη μεγάλη πλειοψηφία των περιπτώσεων, οι διαφορικές εξισώσεις που περιγράφουν τη δυναμική συμπεριφορά ταλαντούμενων αντιδράσεων εμπεριέχουν διάφορες παραμέτρους. Η συμπεριφορά των λύσεων  $x(t; v)$ , όπου  $v$  παράμετρος, εξαρτάται από τις τιμές της παραμέτρου. Γενικά, οι λύσεις του συστήματος (1) που αντιστοιχούν σε μόνιμη κατάσταση (steady state), δηλαδή οι λύσεις της εξίσωσης  $f(x) = 0$  που οδηγούν σε ένα ή περισσότερα σημεία ισορροπίας για το (1), είναι ευσταθείς, για μικρές διαταραχές, εάν το  $v$  κινείται σε ένα συγκεκριμένο εύρος τιμών και γίνονται ασταθείς όταν το  $v$  ξεπεράσει μια κρίσιμη τιμή  $v_c$ . Το σημείο όπου σημειώνεται αλλαγή στην ευστάθεια του συστήματος λέγεται *σημείο διακλάδωσης (bifurcation point)*.

Όταν ένα μοντέλο περιέχει δύο ανεξάρτητες μεταβλητές, η ανάλυση του συστήματος που περιγράφεται από την (1) μπορεί να πραγματοποιηθεί με το διάγραμμα φάσεων του (phase plane). Για συστήματα στο χώρο  $\mathbb{R}^3$  η ανάλυση αυτή μπορεί να είναι ιδιαίτερα πολύπλοκη, ενώ για συστήματα μεγαλύτερης διάστασης δεν είναι, συνήθως, εφικτή και δεδομένου ότι η σχετική θεωρία δεν έχει αναπτυχθεί πλήρως, κάθε περίπτωση αντιμετωπίζεται ξεχωριστά.

Για το λόγο αυτό είναι πολύ μεγάλη η σπουδαιότητα του θεωρήματος διακλάδωσης Hopf, το οποίο διατυπώνεται και αποδεικνύεται στη συνέχεια. Το θεώρημα αυτό δίνει τις συνθήκες που θα πρέπει να ισχύουν για να έχει περιοδικές λύσεις ένα σύστημα της μορφής (1) με παράμετρο, δηλαδή ένα σύστημα της μορφής:

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{F}(\mathbf{x}, v)$$

όπου  $\mathbf{F}$  και  $\mathbf{x}(v, t)$  είναι  $n$ -διάστατα διανύσματα και  $v$  πραγματική παράμετρος.

## 3 ΤΟ ΘΕΩΡΗΜΑ ΔΙΑΚΛΑΔΩΣΗΣ HOPF

### 3.1 ΔΙΑΚΛΑΔΩΣΗ HOPF

Η θεωρία διακλαδώσεων έχει ως στόχο τη μελέτη της εξάρτησης της ποιοτικής συμπεριφοράς των λύσεων ενός συστήματος διαφορικών εξισώσεων και, γενικότερα, της συμπεριφοράς ενός δυναμικού συστήματος από διάφορες παραμέτρους οι οποίες είναι δυνατόν να εμπλέκονται στο σύστημα αυτό. Χαρακτηριστικό παράδειγμα αποτελεί η ενδεχόμενη απώλεια της ευστάθειας ενός σημείου ισορροπίας και η εμφάνιση ενός νέου σημείου ισορροπίας ή άλλου τύπου λύσης, καθώς η παράμετρος ή οι παράμετροι μεταβάλλονται.

Για τις λύσεις ισορροπίας (στάσιμες λύσεις) ενός μη γραμμικού συστήματος διαφορικών εξισώσεων ιδιαίτερη είναι η σημασία του θεωρήματος γραμμικοποίησης. Εάν οι ιδιοτιμές που αντιστοιχούν στη γραμμικοποίηση του συστήματος σε ένα δεδομένο σημείο ισορροπίας έχουν μη μηδενικά πραγματικά μέρη, το σημείο, δηλαδή, ισορροπίας είναι *υπερβολικό*, τότε τοπικά η συμπεριφορά του αρχικού συστήματος περιγράφεται πλήρως από τη συμπεριφορά του γραμμικοποιημένου συστήματος. Επιπλέον, μικρές διαταραχές στο σύστημα δεν επιφέρουν μεταβολές στον τύπο ευστάθειας του σημείου ισορροπίας. Κατά συνέπεια, το θεώρημα γραμμικοποίησης παρέχει, επιπλέον, ένα κριτήριο για τον εντοπισμό φαινομένων διακλάδωσης: *αν το σύστημα παρουσιάζει εξάρτηση από κάποιες παραμέτρους, αναζητούμε τιμές των παραμέτρων για τις οποίες το γραμμικοποιημένο σύστημα, στο υπό μελέτη σημείο ισορροπίας, έχει καθαρά φανταστικές ιδιοτιμές.*

Το *φαινόμενο διακλάδωσης Hopf* σχετίζεται με την απώλεια της ευστάθειας ενός υπερβολικού στάσιμου σημείου καθώς οι παράμετροι του συστήματος λαμβάνουν κάποια συγκεκριμένη τιμή και την εμφάνιση περιοδικών λύσεων. Αφορά, δηλαδή, τη μετάβαση από μια κατάσταση ευσταθούς ισορροπίας, την οποία μπορεί να απολαμβάνει ένα σύστημα για ένα συγκεκριμένο εύρος τιμών των παραμέτρων, σε περιοδική συμπεριφορά, καθώς οι παράμετροι αυτοί λαμβάνουν και στη συνέχεια ξεπερνούν κάποια κατωφλική τιμή. Από μαθηματικής πλευράς, για την κατωφλική αυτή τιμή των παραμέτρων, το γραμμικοποιημένο σύστημα στο συγκεκριμένο σημείο ισορροπίας αποδίδει καθαρά φανταστικές ιδιοτιμές.

### 3.2 ΔΙΑΤΥΠΩΣΗ ΚΑΙ ΑΠΟΔΕΙΞΗ ΘΕΩΡΗΜΑΤΟΣ ΔΙΑΚΛΑΔΩΣΗΣ HOPF

Το *Θεώρημα διακλάδωσης Hopf*, με το οποίο θα ασχοληθούμε σε αυτή την ενότητα, παρέχει αναγκαίες συνθήκες για την εμφάνιση περιοδικών λύσεων του πραγματικού συστήματος συνήθων διαφορικών εξισώσεων της μορφής

$$\frac{dx}{dt} = \mathbf{F}(\mathbf{x}, v)$$

όπου  $v \in \mathbb{R}$  παράμετρος.

Το ίδιο το θεώρημα έχει ενδιαφέρουσα ιστορία. Ονομάστηκε έτσι προς τιμή του E. Hopf, ο οποίος παρουσίασε την απόδειξη για συστήματα στο  $\mathbb{R}^N$ , το 1942. Αργότερα, όμως, διαπιστώθηκε ότι οι A. Andronov και E. A. Leontovich είχαν δώσει πρώτοι την απόδειξη του θεωρήματος, στα τέλη της δεκαετίας του '30, χρησιμοποιώντας ιδέες των H. Poincaré και I. Bendixson. Είναι, επίσης, χαρακτηριστικό ότι στο *Méthodes nouvelles de la mécanique céleste*, Vol. 1 (1892), ο H. Poincaré αναφέρει το αποτέλεσμα του θεωρήματος αλλά γράφει ότι η απόδειξη είναι τετριμμένη και για αυτό αποφεύγει να την παρουσιάσει [5].

Ακολουθεί η διατύπωση του θεωρήματος και η απόδειξή του στην περίπτωση συστήματος στο επίπεδο. Η απόδειξη αυτή έχει δοθεί από τον J. D. Murray και βασίζεται σε αυτή του Friedrichs (1971).

**ΘΕΩΡΗΜΑ 3.1 (Θεώρημα Διακλάδωσης Hopf)** *Θεωρούμε το αυτόνομο σύστημα συνήθων διαφορικών εξισώσεων*

$$\frac{dx}{dt} = \mathbf{F}(\mathbf{x}, v). \quad (3)$$

*Υποθέτουμε ότι η πραγματική παράμετρος  $v \in (-v_0, v_0)$ ,  $v_0 > 0$ , και  $\mathbf{F} \in C^2(D \times (-v_0, v_0), \mathbb{R}^2)$ , όπου  $D$  είναι μια ανοικτή περιοχή του  $\mathbb{R}^2$ . Υποθέτουμε, επίσης, ότι το σύστημα (3) έχει μοναδικό σημείο ισορροπίας για κάθε  $v$  τέτοιο ώστε*

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}, v) = 0 \Rightarrow \mathbf{x} = \mathbf{a}(v). \quad (4)$$

*Συμβολίζουμε με  $\mathbf{A}(v)$  τον πίνακα του γραμμικοποιημένου συστήματος του (3) στο σημείο ισορροπίας  $\mathbf{a}(v)$ , δηλαδή*

$$\mathbf{A}(v) = [\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{F}(\mathbf{x}, v)]_{\mathbf{x}=\mathbf{a}(v)}. \quad (5)$$

Αν ο πίνακας  $\mathbf{A}(0)$  έχει καθαρά φανταστικές ιδιοτιμές  $\pm i\omega$ ,  $\omega \neq 0$ , δηλαδή

$$\operatorname{tr}\mathbf{A}(0) = 0, \quad \det\mathbf{A}(0) > 0 \quad (6)$$

και ο πίνακας  $\mathbf{B}(v)$  που ορίζεται από τη σχέση

$$\mathbf{A}(v) = \mathbf{A}(0) + v\mathbf{B}(v), \quad (7)$$

είναι τέτοιος ώστε

$$\operatorname{tr}\mathbf{B}(0) \neq 0 \quad (8)$$

τότε υπάρχει περιοδική λύση της (3) για  $v$  σε μια περιοχή του  $v = 0$  και  $\mathbf{x}$  σε μια περιοχή του  $\mathbf{a}$ , με προσεγγιστική περίοδο  $T = 2\pi/\omega$ , για μικρές τιμές του  $v$ .

### Απόδειξη:

Η απόδειξη του θεωρήματος βασίζεται στην κατασκευή της περιοδικής λύσης, υπό τη μορφή αθροίσματος του σημείου ισορροπίας και ενός περιοδικού τμήματος (δηλαδή ως περιοδική «διαταραχή» του σημείου ισορροπίας).

Εισάγουμε τη βοηθητική μεταβλητή  $u$ , της οποίας ο ρόλος θα διευκρινιστεί στη συνέχεια. Θα δειχθεί ότι για κάθε διάνυσμα  $\mathbf{b}$ , υπάρχουν συναρτήσεις  $c(u)$ ,  $d(u)$ ,  $\mathbf{y}(s, u)$  (η  $s = \frac{T_0 t}{T(u)}$  αποτελεί βοηθητική αλλαγή μεταβλητής ως προς το χρόνο),  $v(u) = ud(u)$ ,  $T(u) = T_0[1 + uc(u)]$  και

$$\mathbf{x}(u, t) = \mathbf{a}(v(u)) + u\mathbf{y}\left(\frac{T_0 t}{T(u)}, u\right), \quad (9)$$

που ικανοποιούν τις συνθήκες:

- (i)  $c(0) = 0 = d(0)$ ,
- (ii)  $c(u)$  και  $d(u)$  είναι  $C^1[0, u_0)$  για κάποιο αρκετά μικρό  $u_0$ ,
- (iii)  $\mathbf{y}(0, u) = \mathbf{b}$ , για αυθαίρετο διάνυσμα  $\mathbf{b}$ ,
- (iv)  $\mathbf{y}(s, u)$  έχει περίοδο  $T_0$  (ως προς τη μεταβλητή  $s$ ),
- (v)  $\mathbf{x}(u, t)$  είναι η λύση της εξίσωσης

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{F}(\mathbf{x}, v(u)), \quad (10)$$

με περίοδο  $T(u)$ , δηλαδή με περίοδο που εξαρτάται από την τιμή της παραμέτρου  $v$ .

Σημειώνουμε τώρα το ρόλο της μεταβλητής  $u$ : Κατά την μεταβολή της παραμέτρου και καθώς εκείνη λαμβάνει και στη συνέχεια ξεπερνά την κατωφλική τιμή (εδώ  $v = 0$ ), εμφανίζεται η περιοδική λύση. Για να δηλωθεί



η μεταβολή της  $v$ , θεωρούμε ότι αποτελεί συνάρτηση της βοηθητικής μεταβλητής  $u$ , δηλαδή  $v = ud(u)$ ,  $u \in [0, u_0)$ . Για κάθε  $u \in [0, u_0)$ , λαμβάνουμε μοναδική τιμή της  $v \in [0, v_0)$  στην οποία αντιστοιχεί η περιοδική λύση.

Με χρήση κατάλληλων μετασχηματισμών, στοχεύουμε στην κατασκευή μιας εξίσωσης για την περιοδική συνάρτηση  $y$ , η οποία να παράγεται από την εξίσωση (3).

Με χρήση λοιπόν των μεταβλητών

$$\begin{aligned} s &= \frac{T_0 t}{T(u)} \\ v &= ud(u) \\ T(u) &= T_0[1 + uc(u)], \end{aligned} \tag{11}$$

αναζητούμε λύση (της μορφής (9),

$$\mathbf{x}(u, t) = \mathbf{a}(v(u)) + u\mathbf{y}\left(\frac{T_0 t}{T(u)}, u\right) \equiv \mathbf{x}(u, v, t).$$

Αν η  $\mathbf{x}(v, u, t)$  είναι περιοδική με περίοδο  $T(u)$ , τότε η  $\mathbf{y}(s, u)$  είναι περιοδική ως προς τη μεταβλητή  $s$  με περίοδο  $T_0$ .

Πράγματι, θέτοντας στην (9)  $t = T(u)$  προκύπτει ότι

$$\mathbf{x}(u, T(u)) = \mathbf{a}(v(u)) + u\mathbf{y}\left(\frac{T_0 T(u)}{T(u)}, u\right) = \mathbf{a}(v(u)) + u\mathbf{y}(T_0, u).$$

Θέτοντας  $t = 0$  στην (9), έχουμε

$$\mathbf{x}(u, 0) = \mathbf{a}(v(u)) + u\mathbf{y}(0, u).$$

Η χρήση της αρχικής συνθήκης (iii) για την  $\mathbf{y}$ , ότι δηλαδή για  $s = 0$ ,  $\mathbf{y}(0, u) = \mathbf{b}$ , για αυθαίρετο διάνυσμα  $\mathbf{b}$ , δίνει ότι

$$\mathbf{x}(u, 0) \equiv \mathbf{x}(v, u, 0) = \mathbf{a}(v(u)) + u\mathbf{b},$$

ή, πιο απλά,

$$\mathbf{x}(v, u, 0) = \mathbf{a}(v) + u\mathbf{b}. \tag{12}$$

Εισάγοντας την  $\mathbf{x}(u, t) = \mathbf{a}(v(u)) + u\mathbf{y}\left(\frac{T_0 t}{T(u)}, v\right)$  στην εξίσωση (10), λαμβάνουμε

$$\frac{d}{dt}[\mathbf{a}(v(u)) + u\mathbf{y}\left(\frac{T_0 t}{T(u)}, v\right)] = \mathbf{F}[\mathbf{a}(v(u)) + u\mathbf{y}\left(\frac{T_0 t}{T(u)}, v\right)].$$

Από τη σχέση  $s = \frac{T_0 t}{T(u)}$  προκύπτει ότι  $ds = \frac{T_0}{T(u)} dt$  κι επομένως

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{x}}{ds} &= \frac{d}{ds}[\mathbf{a}(v(u)) + u\mathbf{y}(s, u)] = \frac{d}{ds}[\mathbf{a}(v(u))] + \frac{d}{ds}[u\mathbf{y}(s, u)] \\ &= \frac{u d\mathbf{y}(s, u)}{ds} = \frac{T(u)}{T_0} \mathbf{F}[\mathbf{a}(v(u)) + u\mathbf{y}(s, u), u], \end{aligned}$$

δηλαδή

$$\frac{u d\mathbf{y}(s, u)}{ds} = \frac{T(u)}{T_0} \mathbf{F}[\mathbf{a}(v(u)) + u\mathbf{y}, u]. \quad (13)$$

Θεωρώντας, τώρα, αρκετά μικρά  $u$ , θα χρησιμοποιήσουμε την προσέγγιση Taylor δεύτερης τάξης της  $\mathbf{F}(\mathbf{a} + u\mathbf{y})$  ως προς  $u\mathbf{y}$ , οπότε

$$\mathbf{F}(\mathbf{a} + u\mathbf{y}, v) = u\mathbf{A}(v)\mathbf{y} + u^2\mathbf{Q}(\mathbf{y}, v, u), \quad (14)$$

όπου η  $\mathbf{Q}(\mathbf{y}, v, u)$  είναι μια κατάλληλη συνάρτηση, τετραγωνική ως προς  $\mathbf{y}$  (δηλαδή, θεωρούμε ότι ο όρος  $\mathbf{y}^2$  της προσέγγισης Taylor έχει ενσωματωθεί στην  $\mathbf{Q}$ ). Αντικαθιστώντας τη σχέση (14) στη σχέση (13) έχουμε

$$\frac{u d\mathbf{y}(s, u)}{ds} = \frac{T(u)}{T_0} [u\mathbf{A}(v)\mathbf{y} + u^2\mathbf{Q}(\mathbf{y}, v, u)].$$

Χρησιμοποιώντας, από την (11), την  $T(u) = T_0[1 + uc(u)]$ , η παραπάνω σχέση γίνεται

$$\begin{aligned} \frac{u d\mathbf{y}(s, u)}{ds} &= [1 + uc(u)][u\mathbf{A}(v)\mathbf{y} + u^2\mathbf{Q}(\mathbf{y}, v, u)] \\ &= [1 + uc(u)]u\mathbf{A}(v)\mathbf{y} + [1 + uc(u)]u^2\mathbf{Q}(\mathbf{y}, v, u), \end{aligned}$$

ή, διαφορετικά,

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{y}(s, u)}{ds} &= [1 + uc(u)]\mathbf{A}(v)\mathbf{y} + [1 + uc(u)]u\mathbf{Q}(\mathbf{y}, v, u) \\ &= \mathbf{A}(0)\mathbf{y} + uc(u)\mathbf{A}(v)\mathbf{y} + [1 + uc(u)]u\mathbf{Q}(\mathbf{y}, v, u). \end{aligned} \quad (15)$$

Επειδή από την (7),  $\mathbf{A}(v) = \mathbf{A}(0) + v\mathbf{B}(v)$ , η (15) μπορεί να γραφτεί

$$\frac{d\mathbf{y}(s, u)}{ds} = \mathbf{A}(0)\mathbf{y} + v\mathbf{B}(v)\mathbf{y} + uc(u)\mathbf{A}(v)\mathbf{y} + [1 + uc(u)]u\mathbf{Q}(\mathbf{y}, v, u)$$

και χρησιμοποιώντας την  $v = ud(u)$ ,

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{y}(s, u)}{ds} &= \mathbf{A}(0)\mathbf{y} + ud(u)\mathbf{B}(ud(u))\mathbf{y} + uc(u)\mathbf{A}(ud(u))\mathbf{y} \\ &\quad + [1 + uc(u)]u\mathbf{Q}(\mathbf{y}, v, u) \\ &= \mathbf{A}(0)\mathbf{y} + u[d(u)\mathbf{B}(ud(u))\mathbf{y} + c(u)\mathbf{A}(ud(u))\mathbf{y} \\ &\quad + [1 + uc(u)]\mathbf{Q}(\mathbf{y}, ud(u), u)]. \end{aligned}$$

Καταλήγουμε, επομένως, στο ότι η  $y$  πρέπει να αποτελεί λύση του συστήματος

$$\frac{dy}{ds} = \mathbf{A}(0)y + u\mathbf{G}(y, u), \quad (16)$$

όπου η συνάρτηση  $\mathbf{G}$ , δίνεται από την έκφραση

$$\mathbf{G}(y, u) = d(u)\mathbf{B}(ud(u))y + c(u)\mathbf{A}(ud(u))y + [1 + uc(u)]\mathbf{Q}(y, ud(u), u). \quad (17)$$

Θεωρούμε τη λύση του γραμμικού προβλήματος

$$\frac{dy}{ds} = \mathbf{A}(0)y \quad (18)$$

Επειδή ο πίνακας  $\mathbf{A}(0)$  έχει φανταστικές ιδιοτιμές  $\pm i\omega$  ( $\text{tr}\mathbf{A}(0) = 0$ ,  $\det\mathbf{A}(0) > 0$ ), η λύση της (18) είναι της μορφής

$$\mathbf{Y}(s) = \cos(\omega s)\mathbf{I} + \frac{1}{\omega} \sin(\omega s)\mathbf{A}(0). \quad (19)$$

Επειδή  $\mathbf{A}(0) = \pm i\omega\mathbf{I}$ , θα ισχύει ότι

$$\mathbf{A}(0)^2 = -\omega^2\mathbf{I} \Rightarrow \frac{1}{\omega}\mathbf{A}(0) \left( -\frac{1}{\omega}\mathbf{A}(0) \right) = \mathbf{I}$$

δηλαδή ο αντίστροφος του πίνακα  $\frac{1}{\omega}\mathbf{A}(0)$  είναι ο  $-\frac{1}{\omega}\mathbf{A}(0)$ . Επομένως, έχουμε ότι

$$\mathbf{Y}^{-1}(s) = \cos(\omega s)\mathbf{I} - \frac{1}{\omega} \sin(\omega s)\mathbf{A}(0) \quad (20)$$

Παραγωγίζοντας την (20) λαμβάνουμε

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{Y}^{-1}(s)}{ds} &= -\omega \sin(\omega s)\mathbf{I} - \cos(\omega s)\mathbf{A}(0) \\ &= -\mathbf{Y}^{-1}(s)\mathbf{A}(0) \end{aligned} \quad (21)$$

Από την (21), προκύπτει ότι

$$\frac{d[\mathbf{Y}^{-1}(s)y(s, u)]}{ds} = \mathbf{Y}^{-1}(s)\frac{dy}{ds} - \mathbf{Y}^{-1}\mathbf{A}(0)y, \quad (22)$$

και με εισαγωγή της (16) στην (22), έχουμε

$$\frac{d[\mathbf{Y}^{-1}(s)y(s, u)]}{ds} = u\mathbf{Y}^{-1}(s)\mathbf{G}(y(s, u), u). \quad (23)$$

Ολοκληρώνοντας την (23), έχουμε

$$\mathbf{Y}^{-1}(s)\mathbf{y}(s, u) = u \int_0^s \mathbf{Y}^{-1}(z)\mathbf{G}(\mathbf{y}(z, u), u)dz + \mathbf{c}. \quad (24)$$

Θέτοντας  $s = 0$ , υπολογίζουμε τη σταθερά ολοκλήρωσης  $\mathbf{c}$ ,

$$\mathbf{Y}^{-1}(0)\mathbf{y}(0, u) = \mathbf{c}.$$

Από την έκφραση (20) για τη  $\mathbf{Y}^{-1}(s)$ , θέτοντας  $s = 0$ , έχουμε ότι

$$\mathbf{Y}^{-1}(0) = \cos(0)\mathbf{I} - \frac{1}{\omega} \sin(0)\mathbf{A}(0) = \mathbf{I}.$$

Χρησιμοποιώντας για μια ακόμη φορά την αρχική συνθήκη  $\mathbf{y}(0, u) = \mathbf{b}$ , βρίσκουμε, τελικά, ότι

$$\mathbf{c} = \mathbf{y}(0, u) = \mathbf{b}.$$

Επομένως, η (24) γράφεται:

$$\mathbf{y}(s, u) = \mathbf{Y}(s)\mathbf{b} + u\mathbf{Y}(s) \int_0^s \mathbf{Y}^{-1}(z)\mathbf{G}(\mathbf{y}(z, u), u)dz \quad (25)$$

όπου από τη (17) η  $\mathbf{G}$  είναι συνάρτηση του  $\mathbf{y}$ .

Βρέθηκε, λοιπόν, η έκφραση της περιοδικής συνάρτησης  $\mathbf{y}$ . Η έκφραση (25), από μια σκοπιά, θα μπορούσε να θεωρηθεί αναμενόμενη, καθώς η μη-γραμμική εξίσωση (16) μπορεί να ειπωθεί ως μια μη-ομογενής εκδοχή της γραμμικής εξίσωσης (18) (όπου η μη-γραμμική συνάρτηση  $\mathbf{G}(\mathbf{y}, u)$  κατέχει το ρόλο του μή ομογενούς όρου). Υπό αυτή την έννοια, με την (25), καταλήξαμε σε μια «μη-γραμμική» εκδοχή του τύπου παρεμβολής των σταθερών, ο οποίος δίνει τη λύση μη-ομογενών γραμμικών διαφορικών εξισώσεων.

Για να ολοκληρωθεί η απόδειξη του θεωρήματος, θα πρέπει να προσδιοριστούν οι  $u$ ,  $c(u)$  και  $d(u)$  έτσι ώστε η  $\mathbf{y}$  να έχει περίοδο  $T_0$ , για κάθε  $u$  και να υπάρχει συνέπεια με τη συνθήκη (iv).

Καθώς, λοιπόν, ο λογισμός που παραγματοποιήθηκε με βάση τις αλλαγές μεταβλητών, πρέπει να ισχύει για κάθε  $u$ , θέτοντας  $u = 0$  στην (25), έχουμε

$$\mathbf{y}(s, 0) = \mathbf{Y}(s)\mathbf{b}.$$

Επειδή ισχύει ότι  $\mathbf{y}(0, u) = \mathbf{b}$  για κάθε  $u$ , θα είναι και  $\mathbf{y}(0, 0) = \mathbf{b}$ . Επιπλέον, η  $\mathbf{y}$  είναι περιοδική ως προς  $s$  με περίοδο  $T_0$ . Άρα,

$$\mathbf{y}(s, u) = \mathbf{y}(s + T_0, u)$$

και για  $s = 0, u = 0$ , σύμφωνα με τα παραπάνω θα έχουμε:

$$\mathbf{y}(T_0, 0) = \mathbf{Y}(T_0)\mathbf{b} = \mathbf{y}(0, 0) = \mathbf{b}$$

Επομένως, θα είναι

$$\mathbf{Y}(T_0) = \mathbf{I}$$

κι από τη (19),

$$\mathbf{Y}(T_0) = \cos(\omega T_0)\mathbf{I} + \frac{1}{\omega} \sin(\omega T_0)\mathbf{A}(0) = \mathbf{I}$$

που σημαίνει ότι:

$$T_0 = \frac{2\pi}{\omega} \quad (26)$$

Λόγω της απαίτησης για περιοδικότητα της  $\mathbf{y}(s, u)$  με περίοδο  $T_0$ , για κάθε  $u$ , θα έχουμε

$$\mathbf{y}(0, u) = \mathbf{y}(T_0, u) = \mathbf{b}. \quad (27)$$

Θέτοντας, λοιπόν,  $s = T_0$  στην (25), προκύπτει ότι

$$\mathbf{y}(T_0, u) = \mathbf{Y}(T_0)\mathbf{b} + u\mathbf{Y}(T_0) \int_0^{T_0} \mathbf{Y}^{-1}(z)\mathbf{G}(z)dz = 0,$$

$$\mathbf{b} = \mathbf{I}\mathbf{b} + u\mathbf{I} \int_0^{T_0} \mathbf{Y}^{-1}(z)\mathbf{G}(z)dz,$$

για κάθε  $u$ . Χρησιμοποιώντας και την (27), προκύπτει ότι

$$\int_0^{T_0} \mathbf{Y}^{-1}(z)\mathbf{G}(z)dz = 0$$

και με αντικατάσταση της  $\mathbf{G}$  από την (17), παράγουμε την εξίσωση

$$\begin{aligned} \mathbf{\Lambda}(u, c(u), d(u)) &:= \int_0^{T_0} \mathbf{Y}^{-1}(z)[c(u)\mathbf{A}(ud(u))\mathbf{y}(z, u) \\ &\quad + d(u)\mathbf{B}(ud(u))\mathbf{y}(z, u) \\ &\quad + (1 + uc(u))\mathbf{Q}(\mathbf{y}(z, u), ud(u), u)]dz = 0. \end{aligned} \quad (28)$$

Η εξίσωση (28), θα θεωρηθεί ως μια πεπλεγμένη συνάρτηση  $\mathbf{\Lambda} : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$  των  $(u, (c, d))$ , ή αλλιώς, ως ένα σύστημα μη-γραμμικών αλγεβρικών εξισώσεων, για παράδειγμα το

$$\mathbf{\Lambda}(u, c(u), d(u)) = \begin{pmatrix} \Lambda_1(u, c(u), d(u)) \\ \Lambda_2(u, c(u), d(u)) \end{pmatrix} = 0. \quad (29)$$

Οι  $c(u)$ ,  $d(u)$  θα υπάρχουν για κάθε  $u$  κοντά στο 0, εάν δειχτεί ότι η (28) μπορεί να λυθεί ως προς  $c = c(u)$ ,  $d = d(u)$ . Για το σκοπό αυτό θα χρησιμοποιηθεί το θεώρημα πεπλεγμένης συνάρτησης. Για την εφαρμογή του θεωρήματος στην (28), θα πρέπει να δειχθεί ότι αν  $u = 0$  τότε και  $c(0) = d(0) = 0$ . Στη συνέχεια θα πρέπει να αποδειχθεί ότι ο  $2 \times 2$  ιακωβιανός πίνακας

$$D_{(c,d)}\Lambda(0,0,0) = \begin{bmatrix} \frac{\partial\Lambda_1(u,c,d)}{\partial c}, & \frac{\partial\Lambda_1(u,c,d)}{\partial d} \\ \frac{\partial\Lambda_2(u,c,d)}{\partial c}, & \frac{\partial\Lambda_2(u,c,d)}{\partial d} \end{bmatrix}_{(0,0,0)},$$

είναι αντιστρέψιμος κι επομένως η εξίσωση (28) μπορεί να επιλυθεί ως προς  $c = c(u)$ ,  $d = d(u)$ , σε μια περιοχή του  $(0,0,0)$ . Σημειώνεται εδώ ότι με το πρώτο βήμα αποδεικνύεται και η (i).

Υπενθυμίζεται ότι η (14) είναι προσέγγιση Taylor για την  $\mathbf{F}$ , ως προς  $uy$ , όπου λαμβάνονται υπόψη οι όροι μέχρι και δεύτερης τάξης (με τον όρο  $y^2$  να περιέχεται στην  $\mathbf{Q}$ ), καθώς εργαζόμαστε για αρκετά μικρά  $u$  (και επομένως οι όροι ανώτερης τάξης, αν η  $\mathbf{F}$  είχε επιπλέον ικανοποιητική ομαλότητα, θα θεωρούνταν αμελητέοι). Δηλαδή, η  $\mathbf{Q}$  είναι τετραγωνική ως προς  $y$ , για αρκετά μικρά  $u$ .

Από τη (25) και για  $u = 0$ , παρατηρείται ότι

$$\mathbf{y}(s,0) = \mathbf{Y}(s)\mathbf{b}.$$

Επομένως η  $\mathbf{Q}(\mathbf{y},v,0) = \mathbf{Q}(\mathbf{y},ud(u),0)$  είναι τετραγωνική και ως προς  $\mathbf{Y}$ .

Από την (19) προκύπτει ότι η  $\mathbf{Y}(s)^2$  είναι γραμμικός συνδυασμός των όρων  $\cos^n(\omega s) \sin^{2-n}(\omega s)$ , με  $n = 0, 1, 2$ . Επομένως, το ίδιο συμβαίνει και με την  $\mathbf{Q}(\mathbf{y},v,0)$ . Άρα, και η  $\mathbf{Y}^{-1}(s)\mathbf{Q}(\mathbf{y}(s,0),0,0)$  είναι αυτής της μορφής. Δηλαδή,

$$\mathbf{Y}^{-1}(s)\mathbf{Q}(\mathbf{y}(s,0),0,0) \propto \cos^n(\omega s) \sin^{2-n}(\omega s),$$

είναι περιοδική με περίοδο  $T_0 = \frac{2\pi}{\omega}$ . Άρα,

$$\int_0^{T_0} \mathbf{Y}^{-1}(z)\mathbf{Q}(\mathbf{y}(z,0),0,0)dz \propto \int_0^{\frac{2\pi}{\omega}} \cos^n(\omega z) \sin^{2-n}(\omega z)dz = 0. \quad (30)$$

Θέτοντας τώρα  $u = 0$  στην (28) και χρησιμοποιώντας την (30), προκύπτει ότι

$$\int_0^{T_0} [c(0)\mathbf{Y}^{-1}(z)\mathbf{A}(0)\mathbf{Y}(z)\mathbf{b} + d(0)\mathbf{Y}^{-1}(z)\mathbf{B}(0)\mathbf{Y}(z)\mathbf{b}]dz = 0. \quad (31)$$

Ορίζουμε τον πίνακα  $\mathbf{B}^*$  από τη σχέση

$$\mathbf{B}^* = T_0^{-1} \int_{T_0}^0 \mathbf{Y}^{-1}(z) \mathbf{B}(0) \mathbf{Y}(z) dz. \quad (32)$$

Χρησιμοποιώντας τώρα τις σχέσεις (19) και (20),

$$\begin{aligned} \mathbf{Y}^{-1}(z) \mathbf{A}(0) \mathbf{Y}(z) &= [\cos(\omega z) \mathbf{I} + \frac{1}{\omega} \sin(\omega z) \mathbf{A}(0)] \mathbf{A}(0) \\ &\quad \times [\cos(\omega z) \mathbf{I} - \frac{1}{\omega} \sin(\omega z) \mathbf{A}(0)] \\ &= [\cos(\omega z) \mathbf{A}(0) + \frac{1}{\omega} \sin(\omega z) \mathbf{A}^2(0)] \\ &\quad \times [\cos(\omega z) \mathbf{I} - \frac{1}{\omega} \sin(\omega z) \mathbf{A}(0)] \\ &= \cos^2(\omega z) \mathbf{A}(0) - \frac{1}{\omega} \sin(\omega z) \cos(\omega z) \mathbf{A}^2(0) \\ &\quad + \frac{1}{\omega} \sin(\omega z) \cos(\omega z) \mathbf{A}^2(0) - \frac{1}{\omega^2} \sin^2(\omega z) \mathbf{A}^3(0) \\ &= \cos^2(\omega z) \mathbf{A}(0) - \frac{1}{\omega^2} \sin^2(\omega z) \mathbf{A}^3(0) \end{aligned}$$

και καθώς  $\mathbf{A}^2(0) = -\omega^2 \mathbf{I}$ , έχουμε

$$\begin{aligned} \mathbf{Y}^{-1}(z) \mathbf{A}(0) \mathbf{Y}(z) &= \cos^2(\omega z) \mathbf{A}(0) - \frac{1}{\omega^2} \sin^2(\omega z) (-\omega^2 \mathbf{I}) \mathbf{A}(0) \\ &= \cos^2(\omega z) \mathbf{A}(0) + \sin^2(\omega z) \mathbf{A}(0) \\ &= \mathbf{A}(0). \end{aligned}$$

Επομένως,

$$\int_0^{T_0} \mathbf{Y}^{-1}(z) \mathbf{A}(0) \mathbf{Y}(z) dz = \int_0^{T_0} \mathbf{A}(0) dz = T_0 \mathbf{A}(0). \quad (33)$$

Από τις σχέσεις (31), (32) και (33), έχουμε:

$$c(0) T_0 \mathbf{A}(0) \mathbf{b} + d(0) T_0 \mathbf{B}^* \mathbf{b} = 0$$

ή

$$c(0) \mathbf{A}(0) \mathbf{b} + d(0) \mathbf{B}^* \mathbf{b} = 0$$

Επειδή το διάνυσμα  $\mathbf{b}$  είναι αυθαίρετο, θα ισχύει και

$$c(0) \mathbf{A}(0) + d(0) \mathbf{B}^* = 0 \quad (34)$$

Έστω ότι

$$\mathbf{B}(0) = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix}$$

Από την (32), θα έχουμε ότι :

$$\begin{aligned} \mathbf{B}^* &= T_0^{-1} \int_0^{T_0} [\cos(\omega z)\mathbf{I} - \frac{1}{\omega} \sin(\omega z)\mathbf{A}(0)]\mathbf{B}(0) \\ &\quad \times [\cos(\omega z)\mathbf{I} + \frac{1}{\omega} \sin(\omega z)\mathbf{A}(0)]dz \\ &= T_0^{-1} \int_0^{T_0} [\cos(\omega z)\mathbf{B}(0) - \frac{1}{\omega} \sin(\omega z)\mathbf{A}(0)\mathbf{B}(0)] \\ &\quad \times [\cos(\omega z)\mathbf{I} + \frac{1}{\omega} \sin(\omega z)\mathbf{A}(0)]dz \\ &= \mathbf{B}(0)T_0^{-1} \int_0^{T_0} \cos^2(\omega z)dz + \frac{1}{\omega}\mathbf{B}(0)\mathbf{A}(0)T_0^{-1} \int_0^{T_0} \sin(\omega z) \cos(\omega z)dz \\ &\quad - \frac{1}{\omega}\mathbf{A}(0)\mathbf{B}(0)T_0^{-1} \int_0^{T_0} \sin(\omega z) \cos(\omega z)dz \\ &\quad - \frac{1}{\omega^2}\mathbf{A}(0)\mathbf{B}(0)\mathbf{A}(0)T_0^{-1} \int_0^{T_0} \sin^2(\omega z)dz \\ &= \frac{1}{2}\mathbf{B}(0) - \frac{1}{2}\frac{1}{\omega^2}\mathbf{A}(0)\mathbf{B}(0)\mathbf{A}(0) \\ &= \frac{1}{2}\left(\mathbf{B}(0) - \omega^{-2}\mathbf{A}(0)\mathbf{B}(0)\mathbf{A}(0)\right) \end{aligned} \tag{35}$$

Από τη βασική μας υπόθεση ότι  $tr\mathbf{B}(0) \neq 0$  και τη σχέση (35), προκύπτει ότι

$$tr\mathbf{B}^*(0) \neq 0$$

Η εξίσωση (34) είναι ένα ομογενές γραμμικό σύστημα. Δεδομένου ότι  $tr\mathbf{A}(0) = 0$  και  $tr\mathbf{B}^* \neq 0$ , η ορίζουσα των συντελεστών των  $c(0)$  και  $d(0)$  είναι διάφορη του μηδενός. Αυτό σημαίνει ότι η (34) έχει μοναδική λύση την  $c(0) = d(0) = 0$  και αποδεικνύεται, έτσι, τόσο η απαίτηση (i) όσο και η πρώτη υπόθεση για το θεώρημα πεπλεγμένης συνάρτησης, για αναζήτηση λύσης γύρω από το σημείο  $(0, 0, 0)$ .

Συνεχίζοντας την εφαρμογή του θεωρήματος πεπλεγμένης συνάρτησης, θα πρέπει να βρεθεί η ιακωβιανή της (28) υπολογισμένη στο σημείο  $(0, 0, 0)$ . Παραγωγίζοντας ως προς  $d$  την (28), προκύπτει το ολοκλήρωμα

$$\int_0^{T_0} \mathbf{Y}^{-1}(z)\mathbf{B}(ud(u))\mathbf{y}(z, u)dz$$



το οποίο, θέτοντας  $c = d = u = 0$  παίρνει τη μορφή

$$\int_0^{T_0} \mathbf{Y}^{-1}(z) \mathbf{B}(0) \mathbf{y}(z, 0) dz.$$

Από την (25) έχουμε ότι για  $u = 0$ ,  $\mathbf{y}(z, 0) = \mathbf{Y}(z) \mathbf{b}$ . Επομένως,

$$\int_0^{T_0} \mathbf{Y}^{-1}(z) \mathbf{B}(0) \mathbf{y}(z, 0) dz = \int_0^{T_0} \mathbf{Y}^{-1}(z) \mathbf{B}(0) \mathbf{Y}(z) \mathbf{b} dz$$

και από τον ορισμό του πίνακα  $\mathbf{B}^*$ , στην (32), προκύπτει τελικά ότι

$$\int_0^{T_0} \mathbf{Y}^{-1}(z) \mathbf{B}(0) \mathbf{Y}(z) \mathbf{b} dz = T_0 \mathbf{B}^* \mathbf{b} \quad (36)$$

Παραγωγίζοντας ως προς  $c$  την (28), με ανάλογη διαδικασία έχουμε:

$$\int_0^{T_0} \mathbf{Y}^{-1}(z) \mathbf{A}(ud(u)) \mathbf{y}(z, u) dz$$

θέτοντας  $c = d = u = 0$  προκύπτει ότι

$$\int_0^{T_0} \mathbf{Y}^{-1}(z) \mathbf{A}(0) \mathbf{y}(z, 0) dz = \int_0^{T_0} \mathbf{Y}^{-1}(z) \mathbf{A}(0) \mathbf{Y}(z) \mathbf{b} dz$$

και χρησιμοποιώντας την (33), καταλήγουμε στη σχέση

$$\int_0^{T_0} \mathbf{Y}^{-1}(z) \mathbf{A}(0) \mathbf{Y}(z) \mathbf{b} dz = T_0 \mathbf{A}(0) \mathbf{b}. \quad (37)$$

Άρα, η παραγόμενη ιακωβιανή είναι ο πίνακας  $2 \times 2$

$$D_{(c,d)} \mathbf{A}(0, 0, 0) = [\mathbf{B}^* \mathbf{b}, \mathbf{A}(0) \mathbf{b}]$$

ο οποίος θα πρέπει να δειχτεί ότι έχει μη μηδενική ορίζουσα για κάθε μη μηδενικό διάνυσμα  $\mathbf{b}$ .

Ο πίνακας  $\mathbf{A}(0)$  έχει φανταστικές ιδιοτιμές. Χρησιμοποιώντας τον πίνακα μετασχηματισμού  $\mathbf{P}$  (με στήλες τα αντίστοιχα ιδιοδιανύσματα) ο  $\mathbf{A}(0)$  έρχεται στην κανονική μορφή

$$\mathbf{P}^{-1} \mathbf{A}(0) \mathbf{P} = \begin{pmatrix} i\omega & 0 \\ 0 & -i\omega \end{pmatrix} \quad (38)$$

Από τη (35) και την τελευταία σχέση παίρνουμε

$$\begin{aligned}
2\mathbf{P}^{-1}\mathbf{B}^*\mathbf{P} &= \mathbf{P}^{-1}\mathbf{B}(0)\mathbf{P} - \omega^{-2}\mathbf{P}^{-1}\mathbf{A}(0)\mathbf{B}(0)\mathbf{A}(0)\mathbf{P} \\
&= \mathbf{P}^{-1}\mathbf{B}(0)\mathbf{P} - \omega^{-2}\mathbf{P}^{-1}\mathbf{A}(0)\mathbf{P}\mathbf{P}^{-1}\mathbf{B}(0)\mathbf{P}\mathbf{P}^{-1}\mathbf{A}(0)\mathbf{P} \\
&= \mathbf{P}^{-1}\mathbf{B}(0)\mathbf{P} - \omega^{-2}\begin{pmatrix} i\omega & 0 \\ 0 & -i\omega \end{pmatrix}\mathbf{P}^{-1}\mathbf{B}(0)\mathbf{P}\begin{pmatrix} i\omega & 0 \\ 0 & -i\omega \end{pmatrix} \\
&= \mathbf{P}^{-1}\mathbf{B}(0)\mathbf{P} + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\mathbf{P}^{-1}\mathbf{B}(0)\mathbf{P}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.
\end{aligned}$$

Θέτοντας

$$\mathbf{P}^{-1}\mathbf{B}(0)\mathbf{P} = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix},$$

προκύπτει ότι

$$\begin{aligned}
2\mathbf{P}^{-1}\mathbf{B}^*\mathbf{P} &= \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ -\gamma & -\delta \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \alpha & -\beta \\ -\gamma & \delta \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} 2\alpha & 0 \\ 0 & 2\delta \end{pmatrix}.
\end{aligned}$$

Δηλαδή έχουμε

$$\mathbf{P}^{-1}\mathbf{B}^*\mathbf{P} = \begin{pmatrix} \alpha & 0 \\ 0 & \delta \end{pmatrix}. \quad (39)$$

Επειδή ο  $\mathbf{P}$  είναι αντιστρέψιμος, αρκεί να δειχτεί ότι η ορίζουσα

$$\det\mathbf{P}^{-1}[\mathbf{B}^*\mathbf{b}, \mathbf{A}(0)\mathbf{b}]$$

είναι μη μηδενική.

Έστω  $\mathbf{k} = \begin{pmatrix} k_1 \\ k_2 \end{pmatrix} = \mathbf{P}^{-1}\mathbf{b}$ . Τότε

$$\mathbf{P}^{-1}[\mathbf{B}^*\mathbf{b}, \mathbf{A}(0)\mathbf{b}] = [\mathbf{P}^{-1}\mathbf{B}^*\mathbf{b}, \mathbf{P}^{-1}\mathbf{A}(0)\mathbf{b}] = \begin{pmatrix} \alpha k_1 & i\omega k_1 \\ \delta k_2 & -i\omega k_2 \end{pmatrix}.$$

Άρα, για την ορίζουσα έχουμε

$$\begin{aligned}
\det\mathbf{P}^{-1}[\mathbf{B}^*\mathbf{b}, \mathbf{A}(0)\mathbf{b}] &= -i\omega k_1 k_2 \alpha - i\omega k_1 k_2 \\
&= -i\omega k_1 k_2 (\alpha + \delta) = -i\omega k_1 k_2 \text{tr}\mathbf{B}^*.
\end{aligned}$$

Επειδή, όπως έχει αποδειχθεί παραπάνω,  $\text{tr}\mathbf{B}^* \neq 0$ , απλά πρέπει να δείξουμε ότι  $k_1 k_2 \neq 0$ .

Έστω ότι

$$\mathbf{b} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} P_{11} & P_{12} \\ P_{21} & P_{22} \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{A}(0) = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix}$$

Υποθέτουμε ότι  $k_2 = 0$  και  $k_1 \neq 0$ .

Τότε,  $\mathbf{b} = \mathbf{P}\mathbf{k}$  (εφόσον έχει οριστεί ότι  $\mathbf{k} = \mathbf{P}^{-1}\mathbf{b}$ ) και

$$b_1 = P_{11}k_1 + P_{12}k_2 = P_{11}k_1, \quad b_2 = P_{21}k_1 + P_{22}k_2 = P_{21}k_1. \quad (40)$$

Από την (38) έχουμε ότι

$$\mathbf{A}(0)\mathbf{P} = i\omega\mathbf{P} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Κατά συνέπεια,

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P_{11} & P_{12} \\ P_{21} & P_{22} \end{pmatrix} = i\omega \begin{pmatrix} P_{11} & P_{12} \\ P_{21} & P_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \Rightarrow$$

$$\begin{pmatrix} A_{11}P_{11} + A_{12}P_{21} & A_{11}P_{12} + A_{12}P_{22} \\ A_{21}P_{11} + A_{22}P_{21} & A_{21}P_{12} + A_{22}P_{22} \end{pmatrix} = i\omega \begin{pmatrix} P_{11} & -P_{12} \\ P_{21} & -P_{22} \end{pmatrix} \Rightarrow$$

$$A_{11}P_{11} + A_{12}P_{21} = i\omega P_{11} \quad (41)$$

$$A_{21}P_{11} + A_{22}P_{21} = i\omega P_{21} \quad (42)$$

Πολλαπλασιάζοντας με  $k_1$  την (41), προκύπτει ότι

$$(A_{11}P_{11} + A_{12}P_{21})k_1 = i\omega P_{11}k_1 \Rightarrow A_{11}P_{11}k_1 + A_{12}P_{21}k_1 = i\omega P_{11}k_1$$

κι επειδή από την (40),  $b_1 = P_{11}k_1$ , θα έχουμε

$$A_{11}b_1 + A_{12}b_2 = i\omega b_1$$

Επειδή τα  $\mathbf{A}(0)$  και  $\mathbf{b}$  είναι πραγματικά, από την τελευταία εξίσωση προκύπτει ότι  $b = 0$  και επομένως, από την (40) έπεται ότι  $P_{11} = 0$  (έχουμε υποθέσει ότι  $k_1 \neq 0$ ). Έτσι, από την (42) έχουμε ότι

$$A_{22}P_{21} = i\omega P_{21} \quad \text{ή} \quad A_{22} = i\omega$$

το οποίο είναι άτοπο, διότι ο  $\mathbf{A}(0)$  είναι πραγματικός πίνακας. Άρα, η υπόθεση ότι  $k_2 = 0$  δεν ευσταθεί και τελικά έχουμε ότι  $k_2 \neq 0$ .

Με ανάλογο τρόπο, αν υποθέσουμε ότι  $k_1 = 0$  και  $k_2 \neq 0$ , τότε από τη σχέση  $\mathbf{b} = \mathbf{P}\mathbf{k}$  λαμβάνουμε τις σχέσεις

$$b_1 = P_{12}k_2, b_2 = P_{22}k_2$$

$$A_{11}P_{12} + A_{12}P_{22} = -i\omega P_{12}$$

$$A_{21}P_{12} + A_{22}P_{22} = -i\omega P_{22}$$

Δηλαδή έχουμε

$$\begin{aligned} A_{11}P_{12} + A_{12}P_{22} &= -i\omega P_{12} \Rightarrow \\ A_{11}P_{12}k_2 + A_{12}P_{22}k_2 &= -i\omega P_{12}k_2 \Rightarrow \\ A_{11}b_1 + A_{12}b_2 &= -i\omega b_1 \end{aligned}$$

που σημαίνει ότι  $b_1 = 0$  και κατά συνέπεια  $P_{12} = 0$ . Άρα,

$$\begin{aligned} A_{22}P_{22} &= -i\omega P_{22} \Rightarrow \\ A_{22} &= -i\omega \end{aligned}$$

Αυτό, όμως, είναι άτοπο κι επομένως, ισχύει ότι  $k_1 \neq 0$ . Δείξαμε λοιπόν ότι,

$$\det[\mathbf{B}^*\mathbf{b}, \mathbf{A}(0)\mathbf{b}] \neq 0$$

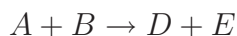
Κατά συνέπεια, οι συναρτήσεις  $c = c(u)$  και  $d = d(u)$  υπάρχουν, τουλάχιστον για αρκετά μικρό  $u$ , με  $0 < u \leq u_0$  και ικανοποιούν την απαίτηση (ii).

Στην παραπάνω ανάλυση έχουμε δει ότι ικανοποιούνται, επίσης, οι απαιτήσεις (iii) και (iv). Έτσι, από το μετασχηματισμό της (9) και (11) έχουμε δείξει ότι η απαίτηση (v) είναι αληθής.

Για μικρό  $u$ , το  $v$  είναι μικρό και  $T(u) \approx T_0$ , ενώ η συχνότητα είναι περίπου  $\frac{2\pi}{T_0}$  με  $T_0 = \omega$ , όπου  $\omega$  είναι το φανταστικό μέρος των ιδιοτιμών του πίνακα  $\mathbf{A}(0)$ .

## 4 Ο ΜΗΧΑΝΙΣΜΟΣ ΑΝΤΙΔΡΑΣΗΣ BRUSSELATOR

Ένα διάσημο μοντέλο, που έχει ευρέως χρησιμοποιηθεί στη Χημεία, για την περιγραφή ταλαντούμενων χημικών αντιδράσεων της μορφής



είναι ο *μηχανισμός αντίδρασης Brusselator*. Ο μηχανισμός αυτός έχει προταθεί από τους Lefever, Prigogine και Nicolis (Prigogine and Lefever 1968; Glansdorff and Prigogine 1971; Nicolis and Prigogine 1977; Lefever et al. 1988; Gray et al. 1988b) και πήρε το όνομά του από τις Βρυξέλλες, τον τόπο όπου πρωτομελετήθηκε (Universite Libre de Bruxelles, Belgium).

Το μοντέλο Brusselator περιγράφει τη μετατροπή δύο χημικών ειδών A και B στα προϊόντα D και E, μέσω δύο χημικών ενδιάμεσων X και Y. Στην κλασική μορφή του μοντέλου, η μετατροπή αυτή πραγματοποιείται μέσω τεσσάρων στοιχειωδών, μονόδρομων αντιδράσεων, σύμφωνα με το ακόλουθο σχήμα :



Στο αντιδρόν αυτό σχήμα εφαρμόζονται οι εξής παραδοχές :

1. Το σύστημα βρίσκεται μακριά από την ισορροπία και οι αντίστροφες δράσεις αγνοούνται θεωρώντας ότι έχουν ρυθμό αντίδρασης ίσο με το μηδέν.
2. Οι συγκεντρώσεις των αρχικών αντιδρώντων A και B και των τελικών προϊόντων D και E διατηρούνται σταθερές καθόλη τη διάρκεια της αντίδρασης. Θεωρείται, μάλιστα, ότι τα χημικά είδη A και B βρίσκονται σε περίσσεια και οι συγκεντρώσεις τους είναι πολύ μεγαλύτερες από τις μέγιστες συγκεντρώσεις των ενδιάμεσων, ενώ η αντίδραση «έναρξης» (I) χαρακτηρίζεται από σχετικά μικρό συντελεστή ρυθμού  $k_1$ . Η παραδοχή αυτή, που συναντάται συχνά στη βιβλιογραφία για την περιγραφή καταστάσεων μακριά από τη χημική ισορροπία, έχει την ονομασία *pool chemical approximation*.
3. Δεν σημειώνεται καμιά μεταβολή της θερμοκρασίας του συστήματος κατά τη διάρκεια εξέλιξης της συνολικής αντίδρασης.

4. Οι συντελεστές του ρυθμού των επιμέρους δράσεων ( $k_i$ ,  $i = 1, 2, 3, 4$ ) παραμένουν σταθεροί.

Η αντίδραση Brusselator αποτελεί χαρακτηριστικό παράδειγμα *αυτοκαταλυόμενης* δράσης. Το φαινόμενο της αυτοκατάλυσης εμφανίζεται στη στοιχειώδη αντίδραση που περιγράφεται από τη στοιχειομετρική εξίσωση (III), όπου η παρουσία του ενδιάμεσου X καταλύει τον ίδιο το σχηματισμό του, αυξάνει δηλαδή την απόδοση της ίδιας του της παραγωγής, καθώς αντιδρούν δύο mole του X με ένα mole του Y για το σχηματισμό τριών mole του X (cubic autocatalysis).

Στη συνέχεια, γίνεται μελέτη του συστήματος Brusselator στις εξής περιπτώσεις:

- α) Θεωρώντας αμελητέα την επίδραση φαινομένων διάχυσης και
- β) Λαμβάνοντας υπόψη την παρουσία διάχυσης.

## 4.1 ΤΟ ΜΟΝΤΕΛΟ BRUSSELTOR ΜΕ ΑΜΕΛΗΤΑ ΤΗΝ ΕΠΙΔΡΑΣΗ ΦΑΙΝΟΜΕΝΩΝ ΔΙΑΧΥΣΗΣ

### 4.1.1 Μαθηματική μοντελοποίηση της αντίδρασης Brusselator απουσία διάχυσης

Ο ρυθμός μιας στοιχειώδους, ομογενούς χημικής αντίδρασης, σύμφωνα με το νόμο δράσης των μαζών, είναι ανάλογος με το γινόμενο των συγκεντρώσεων των αντιδρώντων σωμάτων υψωμένων στους αντίστοιχους στοιχειομετρικούς τους συντελεστές.

Εφαρμόζοντας το νόμο δράσης των μαζών σε κάθε μια από τις στοιχειώδεις αντιδράσεις (I)-(IV), προκύπτει ότι:

$$\begin{aligned}r_1 &= k_1[A] \\r_2 &= k_2[B][X] \\r_3 &= k_3[X]^2[Y] \\r_4 &= k_4[X]\end{aligned}$$

Γράφοντας τις εξισώσεις ρυθμού, για τη συνολική αντίδραση, ως προς τις συγκεντρώσεις των ενδιάμεσων  $X$  και  $Y$ , προκύπτει ένα σύστημα δύο συνήθων διαφορικών εξισώσεων που περιγράφει τη δυναμική συμπεριφορά της αντίδρασης Brusselator, με τις παραδοχές που έχουν αναφερθεί παραπάνω:

$$\begin{aligned}\frac{d[X]}{dt} &= k_1[A] - k_2[B][X] + k_3[X]^2[Y] - k_4[X] \\ \frac{d[Y]}{dt} &= k_2[B][X] - k_3[X]^2[Y]\end{aligned}\tag{43}$$

όπου  $[A]$ ,  $[B]$ ,  $[X]$  και  $[Y]$  οι συγκεντρώσεις των A, B, X και Y, αντίστοιχα, με  $[A] = [A]_o$  και  $[B] = [B]_o$ , όπου  $[A]_o$  και  $[B]_o$  οι αρχικές συγκεντρώσεις των A και B.

Με αδιαστατικοποίηση (nondimensionalization), η οποία πραγματοποιείται θέτοντας:

$$\begin{aligned}\tau &= k_4 t \\ a &= k_3(k_1[A])^2/k_4^3 \\ b &= k_2[B]/k_4\end{aligned}$$

το σύστημα (43) μετατρέπεται στην αδιάστατη μορφή:

$$\begin{aligned}\frac{du}{d\tau} &= 1 - (b+1)u + au^2v \\ \frac{dv}{d\tau} &= bu - au^2v\end{aligned}$$

όπου τα  $u$  και  $v$  αντιστοιχούν στα ενδιάμεσα  $X$  και  $Y$ , αντίστοιχα. Για λόγους συνήθειας, για το συμβολισμό του χρόνου θα εξακολουθήσουμε να χρησιμοποιούμε το σύμβολο  $t$  αντί για το  $\tau$ , χωρίς αυτό να επηρεάζει τα λαμβανόμενα αποτελέσματα. Το αδιάστατο, λοιπόν, σύστημα διαφορικών εξισώσεων που αντιστοιχεί στο μοντέλο Brusselator, θεωρώντας τη διάχυση αμελητέα, είναι :

$$\begin{aligned}\frac{du}{dt} &= 1 - (b+1)u + au^2v := f(u, v) \\ \frac{dv}{dt} &= bu - au^2v := g(u, v)\end{aligned}\tag{44}$$

όπου  $u, v \in R$  και  $a, b \in R$  είναι σταθερές με  $a, b > 0$ .

Με την αδιαστατικοποίηση δεν επηρεάζεται η δυναμική συμπεριφορά του μοντέλου. Απλά, μειώνεται ο αριθμός των παραμέτρων από έξι (τέσσερις συντελεστές ρυθμού και δύο αρχικές συγκεντρώσεις) σε δύο:  $a$  και  $b$ .

#### 4.1.2 Μελέτη της ευστάθειας του συστήματος Brusselator χωρίς φαινόμενα διάχυσης

Τα στάσιμα σημεία του συστήματος (44) δίνονται από τις λύσεις του συστήματος εξισώσεων :

$$\begin{aligned}f(u, v) &= 0 \\ g(u, v) &= 0\end{aligned}$$

Δηλαδή,

$$\begin{aligned}1 - (b+1)u + au^2v &= 0 \\ bu - au^2v &= 0\end{aligned}$$

Προσθέτοντας κατά μέλη τις δύο αυτές εξισώσεις προκύπτει ότι :

$$1 - u = 0 \Rightarrow u = 1$$

Αντικαθιστώντας στη δεύτερη εξίσωση την τιμή  $u = 1$ , προκύπτει ότι :

$$b - av = 0 \Rightarrow v = \frac{b}{a}$$

Επομένως, το σύστημα (44) έχει μοναδικό στάσιμο σημείο το

$$(u_s, v_s) = \left(1, \frac{b}{a}\right)$$



Η ευστάθεια του συστήματος στο στάσιμο σημείο προσδιορίζεται από τις ιδιοτιμές του πίνακα γραμμικοποίησής του (ιακωβιανού πίνακα) στο σημείο αυτό.

Έχουμε, λοιπόν, ότι:

$$J(u, v) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial u} & \frac{\partial f}{\partial v} \\ \frac{\partial g}{\partial u} & \frac{\partial g}{\partial v} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -(b+1) + 2auv & au^2 \\ b - 2auv & -au^2 \end{pmatrix}$$

Στο στάσιμο σημείο, ο πίνακας γραμμικοποίησης είναι ο

$$J(u_s, v_s) = \begin{pmatrix} b-1 & a \\ -b & -a \end{pmatrix} = A$$

Οι ιδιοτιμές,  $\lambda$ , του  $J(u_s, v_s)$ , τον οποίο ας συμβολίσουμε πιο απλά με  $A$ , αποτελούν τις λύσεις της εξίσωσης:

$$\det(A - \lambda I) = \lambda^2 - \text{tr}(A)\lambda + \det(A) = 0$$

Έχουμε, λοιπόν,

$$\det(A) = -a(b-1) + ab = a > 0$$

$$\text{tr}(A) = b - 1 - a$$

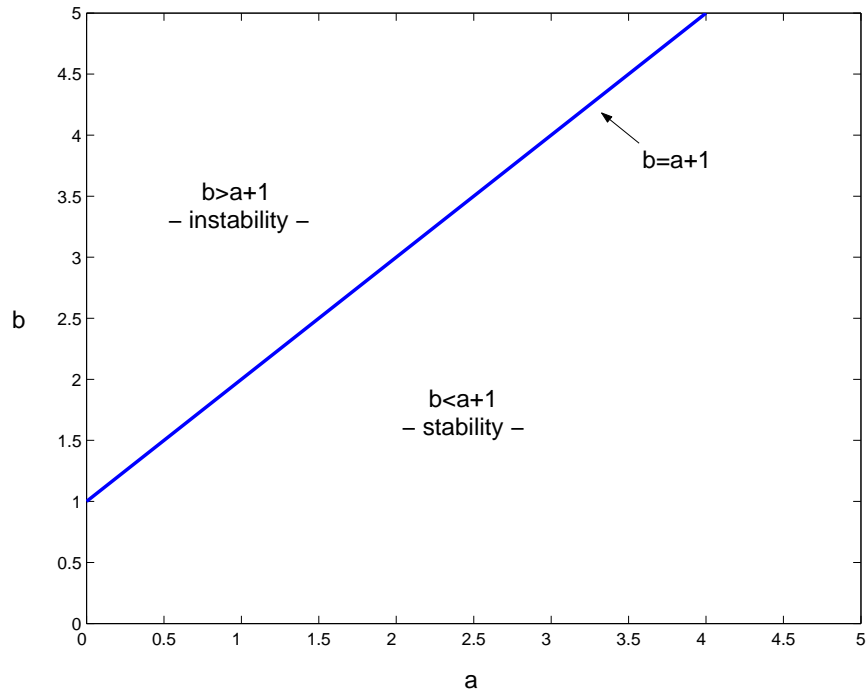
Το γεγονός ότι  $\det(A) > 0$ , συνεπάγεται ότι δεν είναι δυνατή η ύπαρξη δύο ετερόσημων, πραγματικών ιδιοτιμών, αποκλείοντας έτσι το ενδεχόμενο το στάσιμο σημείο να είναι ένα σαγματικό σημείο.

Ανάλογα, τώρα, με το πρόσημο του  $\text{tr}(A)$  έχουμε τα εξής:

- Για  $\text{tr}(A) < 0$  δηλ.  $b - 1 - a < 0 \Rightarrow b < a + 1$ , έχουμε  $\text{Re}\lambda < 0$ , οπότε το στάσιμο σημείο είναι ευσταθές
- Για  $\text{tr}(A) > 0$  δηλ.  $b - 1 - a > 0 \Rightarrow b > a + 1$ , έχουμε  $\text{Re}\lambda > 0$ , οπότε το στάσιμο σημείο είναι ασταθές
- Στο σημείο όπου  $\text{tr}(A) = 0$ , όταν δηλαδή  $b = b_c = a + 1$ , παρατηρείται αλλαγή στην ευστάθεια του συστήματος. Τότε, το χαρακτηριστικό πολυώνυμο παίρνει τη μορφή  $\lambda^2 + a = 0$ , οπότε  $\lambda = \pm i\sqrt{a}$ , δηλαδή έχουμε καθαρά φανταστικές ιδιοτιμές.

Για την τιμή, λοιπόν, της παραμέτρου  $b = b_c = a + 1$  υπάρχει η ένδειξη ότι το σύστημα παρουσιάζει διακλάδωση Hopf, η ύπαρξη της οποίας εξετάζεται στη συνέχεια με την εφαρμογή του ομώνυμου Θεωρήματος, το οποίο έχει διατυπωθεί και αποδειχθεί στην ενότητα (3).

Το σχήμα (1) παρουσιάζει μια γραφική απεικόνιση των περιοχών ευστάθειας και αστάθειας του συστήματος (44) σε σχέση με τις τιμές των  $a$  και  $b$ .



Σχήμα 1: Απεικόνιση των περιοχών ευστάθειας και αστάθειας του συστήματος (44) σε σχέση με τις τιμές των  $a$  και  $b$ .

### 4.1.3 Εφαρμογή του Θεωρήματος Διακλάδωσης Hopf στο μοντέλο Brusselator χωρίς διάχυση

Για να εξεταστεί εάν ισχύουν οι προϋποθέσεις του θεωρήματος διακλάδωσης Hopf ώστε να υπάρχουν περιοδικές λύσεις του συστήματος στο στάσιμο σημείο, το σύστημα (44), με αλλαγή μεταβλητής, γράφεται με τέτοιο τρόπο ώστε το στάσιμο σημείο του  $(u_s, v_s) = (1, \frac{b}{a})$  να αντιστοιχεί στην αρχή των αξόνων.

Ο μετασχηματισμός που γίνεται είναι ο εξής:

$$\begin{aligned} w_1 &= u - 1 \\ w_2 &= v - \frac{b}{a} \end{aligned}$$

Παρατηρείται ότι:

$$\dot{w}_1 = \dot{u}, \quad \dot{w}_2 = \dot{v}$$

και

$$\begin{aligned} u &= w_1 + 1 \\ v &= w_2 + \frac{b}{a} \end{aligned}$$

Με αντικατάσταση των παραπάνω σχέσεων στο σύστημα (44), προκύπτει ότι:

$$\begin{aligned} \frac{dw_1}{dt} &= 1 - (b+1)(w_1+1) + a(w_1+1)^2(w_2+\frac{b}{a}) := f_1(w_1, w_2) \\ \frac{dw_2}{dt} &= b(w_1+1) - a(w_1+1)^2(w_2+\frac{b}{a}) := g_1(w_1, w_2) \end{aligned} \quad (45)$$

Το σύστημα (45) στο οποίο μετασχηματίστηκε το (44), έχει την αρχή των αξόνων  $(0, 0)$  ως σημείο ισοροπίας. Πράγματι, θέτοντας  $w_1 = 0$  και  $w_2 = 0$ , προκύπτει ότι

$$f_1(w_1, w_2) = g_1(w_1, w_2) = 0$$

Ο πίνακας γραμμικοποίησης του συστήματος (45) είναι:

$$\begin{aligned} J(w_1, w_2) &= \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial w_1} & \frac{\partial f_1}{\partial w_2} \\ \frac{\partial g_1}{\partial w_1} & \frac{\partial g_1}{\partial w_2} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} -(b+1) + 2a(w_1+1)(w_2+\frac{b}{a}) & a(w_1+1)^2 \\ b - 2a(w_1+1)(w_2+\frac{b}{a}) & -a(w_1+1)^2 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Στο στάσιμο σημείο  $(w_1, w_2) = (0, 0)$ , ο ιακωβιανός πίνακας θα είναι:

$$J(0,0) = \begin{pmatrix} b-1 & a \\ -b & -a \end{pmatrix} = A$$

Όπως ήταν αναμενόμενο, ο πίνακας γραμμικοποίησης του συστήματος (45) στο στάσιμο σημείο του  $(0, 0)$  ταυτίζεται με τον αντίστοιχο πίνακα του συστήματος (44) στο στάσιμο σημείο του  $(1, b/a)$ .

Μετά δε την αλλαγή μεταβλητής, το γραμμικοποιημένο σύστημα στο στάσιμο σημείο  $(w_1, w_2) = (0, 0)$  είναι της μορφής

$$\dot{\mathbf{w}} = A\mathbf{w} \quad (46)$$

Σύμφωνα με τη διατύπωση του θεωρήματος Hopf, η τιμή της παραμέτρου για την οποία εμφανίζεται το φαινόμενο της περιοδικής τροχιάς θεωρείται ότι είναι το μηδεν. Για το λόγο αυτό, θα πρέπει να πραγματοποιηθεί άλλη μια αλλαγή μεταβλητής, αυτή τη φορά ως προς την παράμετρο.

Έτσι, θέτουμε:

$$\mu = b - (1 + a) = b - a - 1$$

Αντικαθιστώντας στις εξισώσεις του συστήματος (45) την τιμή  $b = \mu + a + 1$ , προκύπτει το σύστημα:

$$\begin{aligned} \frac{dw_1}{dt} &= 1 - (\mu + a + 2)(w_1 + 1) + a(w_1 + 1)^2(w_2 + \frac{\mu + a + 1}{a}) \\ \frac{dw_2}{dt} &= (\mu + a + 1)(w_1 + 1) - a(w_1 + 1)^2(w_2 + \frac{\mu + a + 1}{a}) \end{aligned} \quad (47)$$

Ο πίνακας γραμμικοποίησης του παραπάνω συστήματος στο στάσιμο σημείο  $(0, 0)$  προκύπτει με την αντικατάσταση  $b = \mu + a + 1$  στον αντίστοιχο πίνακα του συστήματος (45).

Οπότε,

$$A(\mu) = \begin{pmatrix} \mu + a + 1 - 1 & a \\ -(\mu + a + 1) & -a \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mu + a & a \\ -(\mu + a + 1) & -a \end{pmatrix}$$

Ο έλεγχος, λοιπόν, των προϋποθέσεων του θεωρήματος Hopf, πραγματοποιείται με βάση τον πίνακα  $A(\mu)$ .

Έτσι, έχουμε:

$$A(\mu = 0) = A(0) = \begin{pmatrix} a & a \\ -(a + 1) & -a \end{pmatrix}$$

Οι ιδιοτιμές του πίνακα  $A(0)$  είναι οι λύσεις της εξίσωσης

$$\lambda^2 - \text{tr}A(0)\lambda + \det A(0) = 0$$

$$\operatorname{tr}A(0) = a + (-a) = 0$$

$$\det A(0) = -a^2 + a(a+1) = -a^2 + a^2 + a = a > 0$$

Οπότε, έχουμε :

$$\lambda^2 + a = 0$$

Δηλαδή

$$\lambda = \pm i\sqrt{a}$$

Παρατηρείται, λοιπόν, ότι ο πίνακας  $A(0)$  έχει καθαρά φανταστικές ιδιοτιμές. Έστω  $B(\mu)$  ο πίνακας για τον οποίο

$$A(\mu) := A(0) + \mu B(\mu)$$

Τότε,

$$B(\mu) = \frac{1}{\mu}(A(\mu) - A(0))$$

Δηλαδή,

$$\begin{aligned} B(\mu) &= \frac{1}{\mu} \left( \begin{pmatrix} \mu + a & a \\ -(\mu + a + 1) & -a \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} a & a \\ -(a + 1) & -a \end{pmatrix} \right) \\ &= \frac{1}{\mu} \begin{pmatrix} \mu & 0 \\ -\mu & 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Οπότε,

$$B(0) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$$

Έτσι, έχουμε ότι :

$$\operatorname{tr}B(0) = 1 \neq 0$$

που σημαίνει ότι ισχύουν οι προϋποθέσεις του θεωρήματος Hopf και υπάρχει περιοδική λύση όταν η παράμετρος  $\mu$  παίρνει τιμές στην περιοχή του μηδενός. Σύμφωνα με το θεώρημα, δεδομένου ότι οι ιδιοτιμές του πίνακα  $A(0)$  είναι  $\lambda = \pm i\sqrt{a}$ , η περίοδος της τροχιάς, για μικρές τιμές του  $\mu$ , είναι :

$$T = \frac{2\pi}{\sqrt{a}}$$

Η ύπαρξη οριακού κύκλου όταν σε ένα αντιδρόν σχήμα υπεισέρχονται, ως ενδιάμεσα στάδια, μία ή περισσότερες τριμοριακές απλές αντιδράσεις έχει

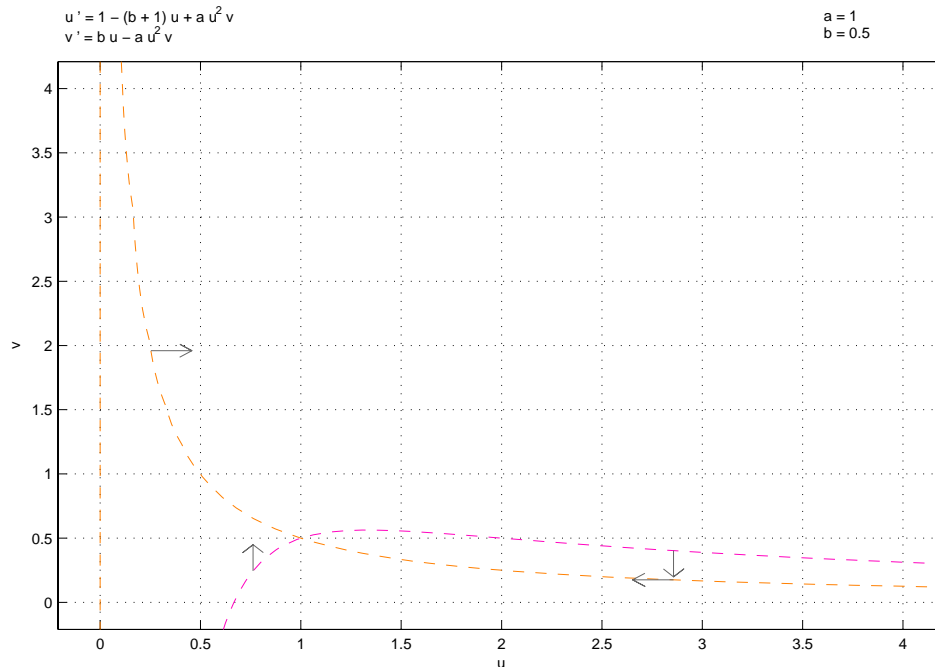
δειχθεί, ανεξάρτητα, από τον Hanusse (1972) και τους Tyson και Light [9].

Υπάρχουν περιπτώσεις, όπως για παράδειγμα συμβαίνει με την εξίσωση Van der Pol [9], όπου οι περιοδικές λύσεις μπορούν να υπολογιστούν ποσοτικά, με βάση την απόδειξη του θεωρήματος Hopf. Στην περίπτωση του μοντέλου Brusselator αυτό δεν κατέσται δυνατό μια και οδηγηθήκαμε σε εξαιρετικά πολύπλοκες αλγεβρικές παραστάσεις για τα  $c'(0)$  και  $d'(0)$ .

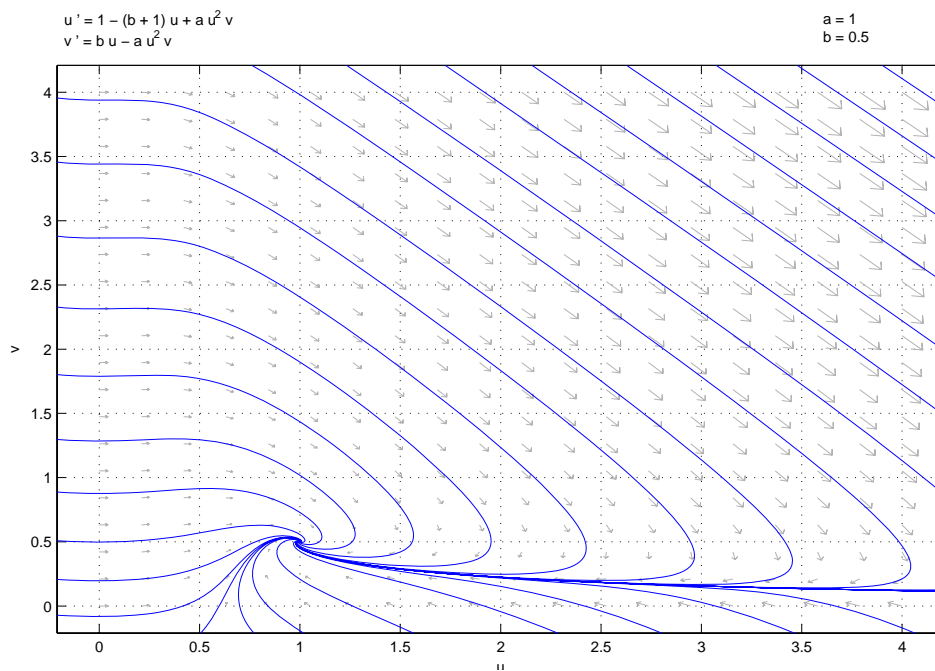
Στα σχήματα (2)-(13) απεικονίζονται οι ισοκλινείς μηδενικής αύξησης και τα διαγράμματα φάσεων του συστήματος (44) για περιπτώσεις όπου  $a + 1 > b$ ,  $a + 1 = b_c = b$  και  $a + 1 < b$  όπου έχουμε, δηλαδή, αντίστοιχα, ευστάθεια, ύπαρξη οριακού κύκλου και αστάθεια.

Συγκεκριμένα, στις περιπτώσεις των σχημάτων (2)-(7) έχουμε ευστάθεια στο στάσιμο σημείο, δεδομένου ότι για τις τιμές που έχουν δοθεί στις παραμέτρους ισχύει ότι  $a + 1 > b$ . Στα σχήματα (8) και (9), το στάσιμο σημείο  $(u_s, v_s) = (1, 2)$  αποτελεί σημείο διακλάδωσης αφού ικανοποιείται η σχέση  $a + 1 = b_c = b$ . Στα σχήματα, τέλος, (10) και (13) έχουμε αστάθεια στο στάσιμο σημείο και ύπαρξη περιοδικής τροχιάς, δεδομένου ότι για τις τιμές που δίνονται στις παραμέτρους ισχύει ότι  $a + 1 < b$ .

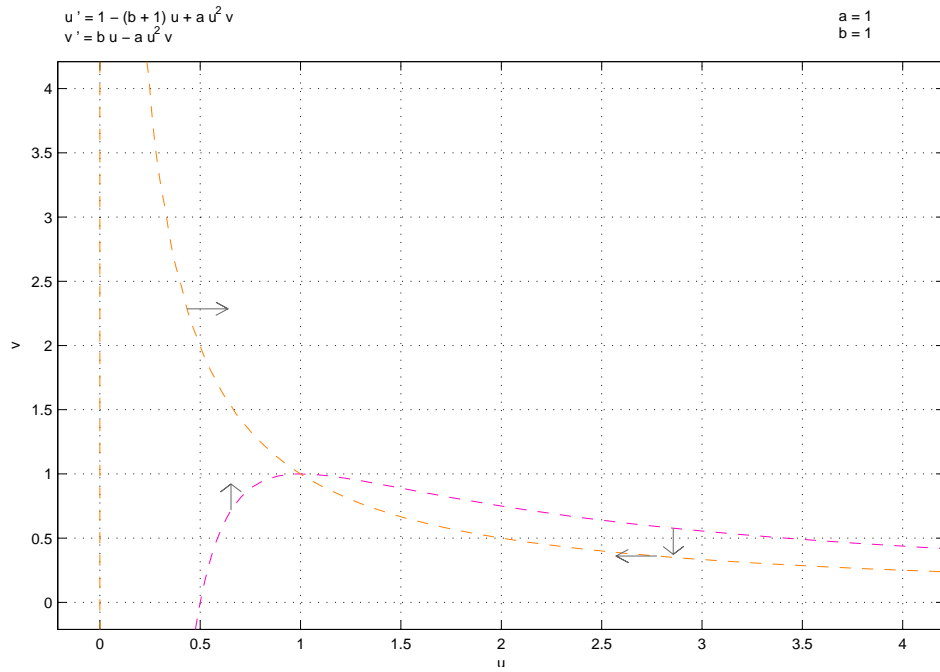
Όλα αυτά τα διαγράμματα αυτά έχουν κατασκευαστεί με τη βοήθεια του εργαλείου PPLANE του προγράμματος Matlab.



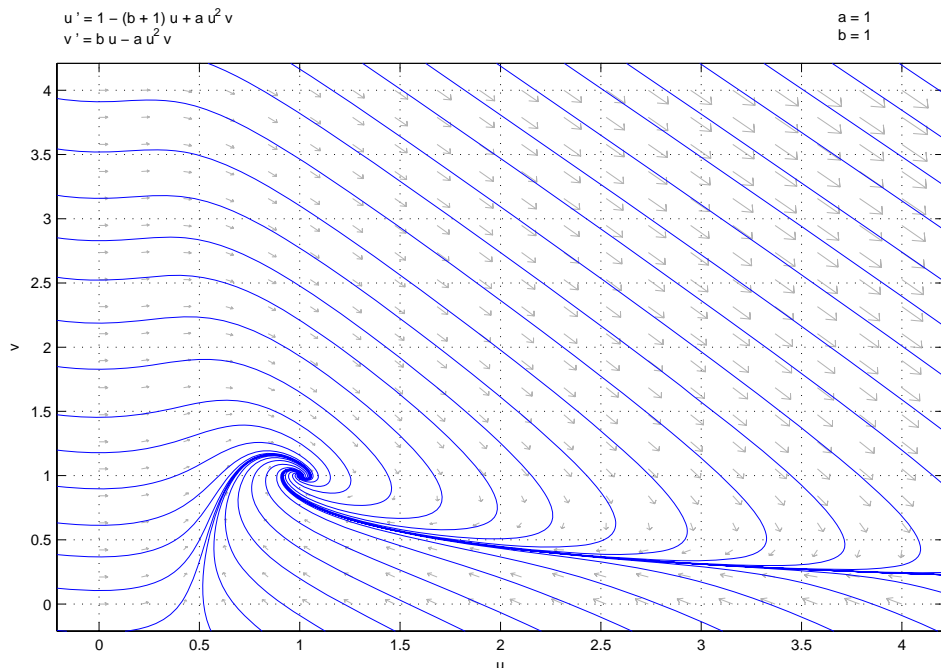
Σχήμα 2: Ισοκλινή μηδενικής αύξησης για  $a = 1$  και  $b = 0.5$ .



Σχήμα 3: Πορτρέτο φάσεων για  $a = 1$  και  $b = 0.5$ .

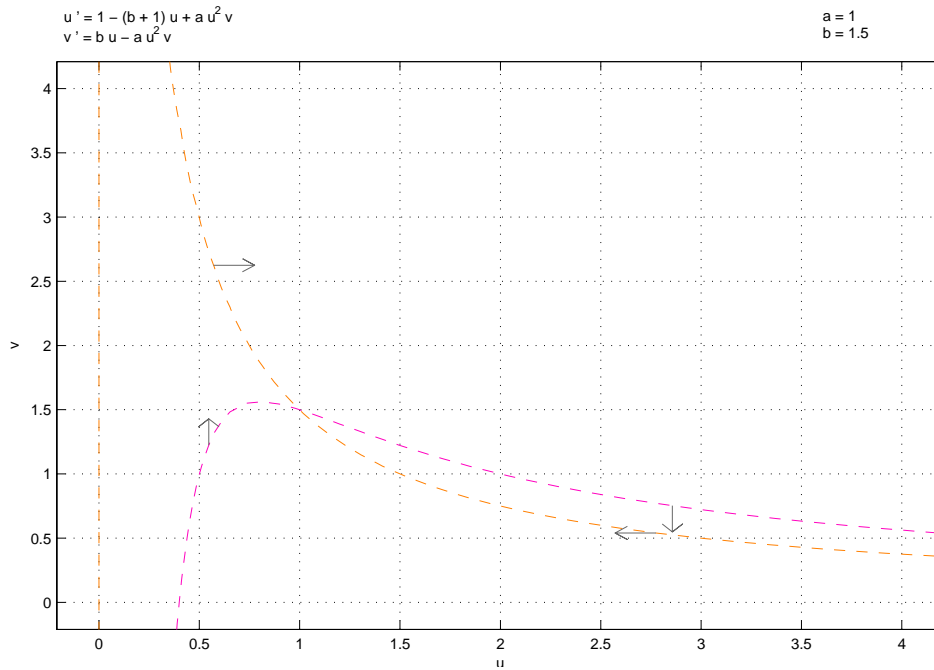


Σχήμα 4: Ισοκλινή μηδενικής αύξησης για  $a = 1$  και  $b = 1$ .

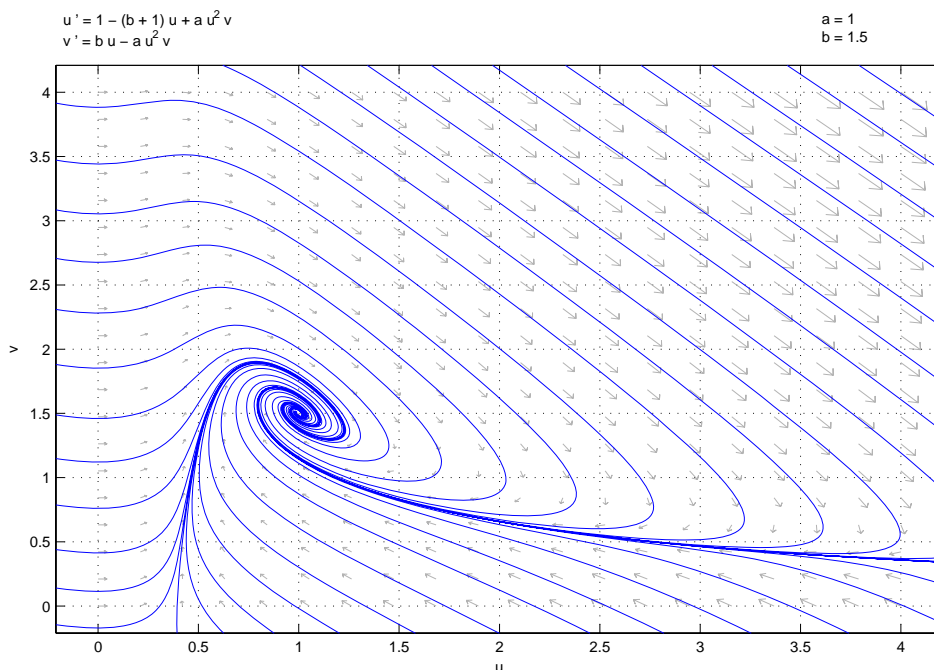


Σχήμα 5: Πορτρέτο φάσεων για  $a = 1$  και  $b = 1$ .

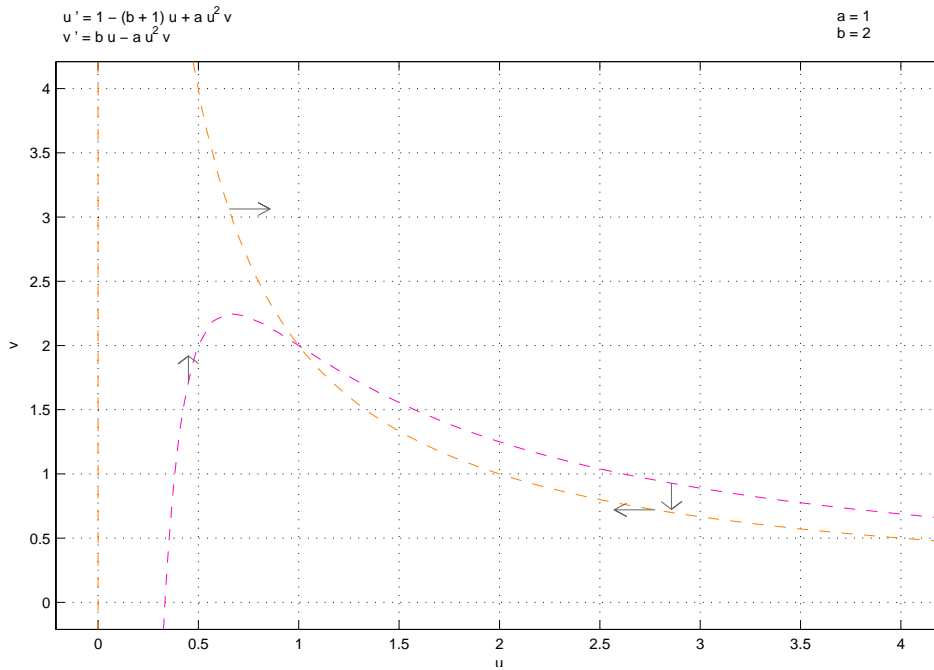




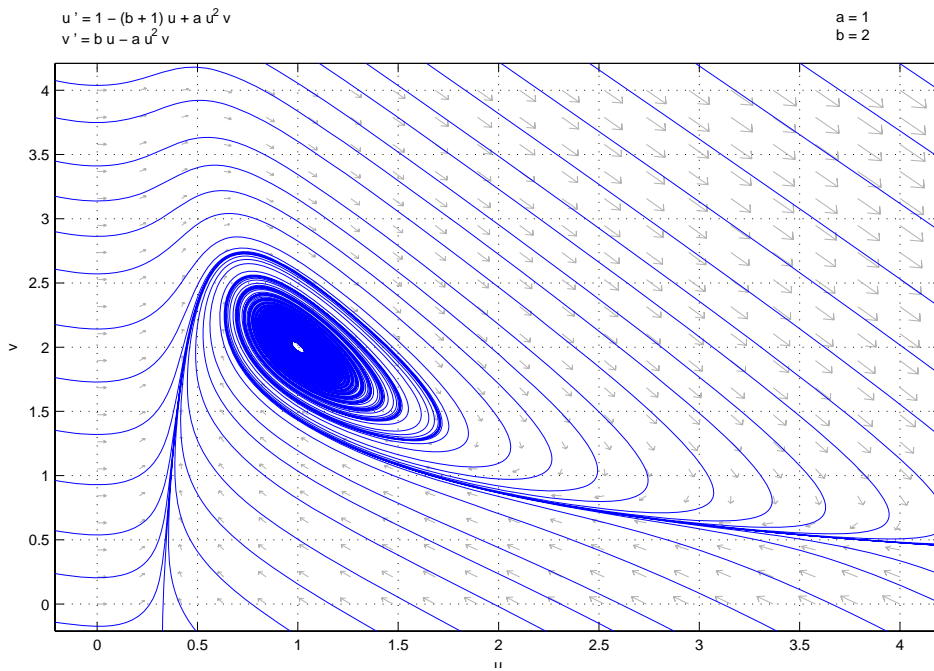
Σχήμα 6: Ισοκλινή μηδενικής αύξησης για  $a = 1$  και  $b = 1.5$ .



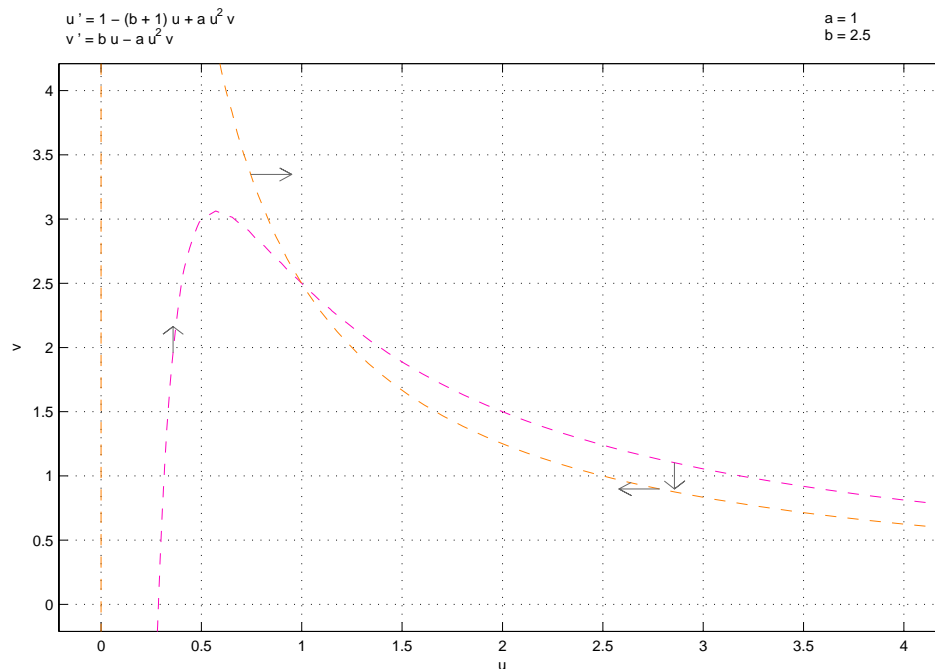
Σχήμα 7: Πορτρέτο φάσεων για  $a = 1$  και  $b = 1.5$ .



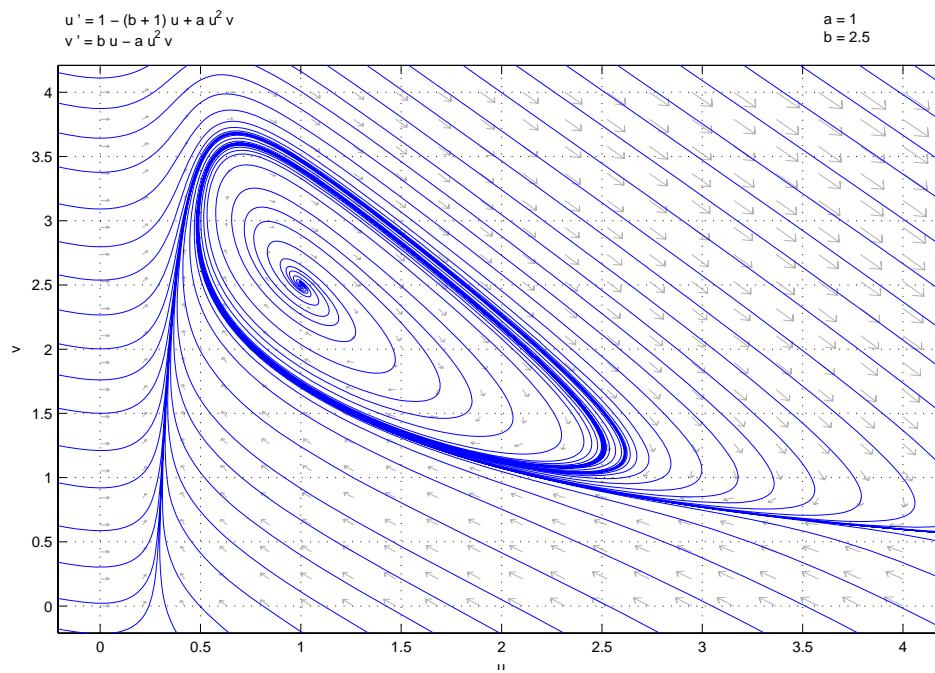
Σχήμα 8: Ισοκλινή μηδενικής αύξησης για  $a = 1$  και  $b = 2$ .



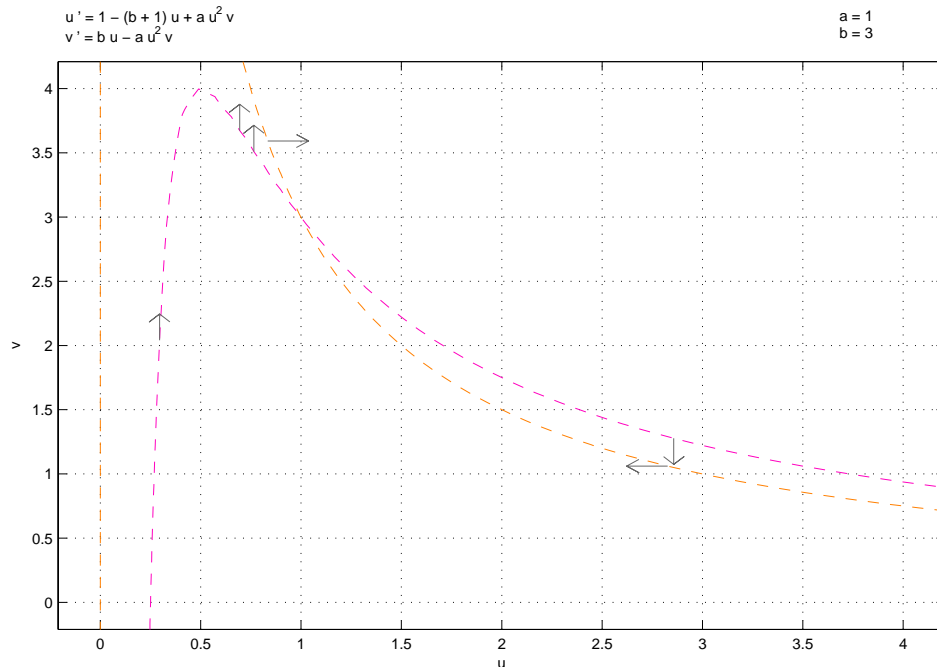
Σχήμα 9: Πορτρέτο φάσεων για  $a = 1$  και  $b = 2$ .



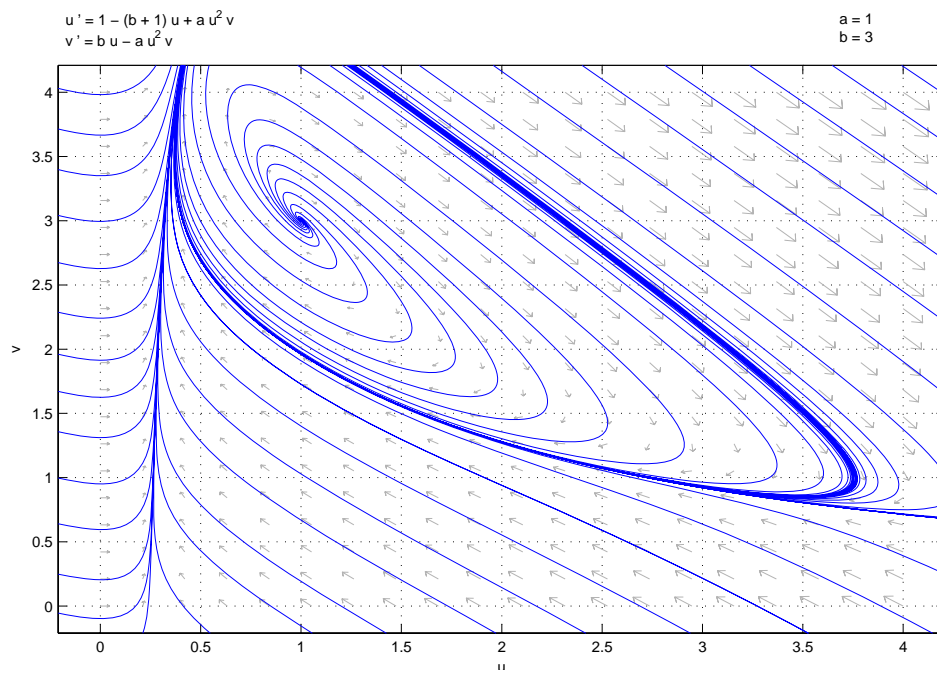
Σχήμα 10: Ισοκλινή μηδενικής αύξησης για  $a = 1$  και  $b = 2.5$ .



Σχήμα 11: Πορτρέτο φάσεων για  $a = 1$  και  $b = 2.5$ .



Σχήμα 12: Ισοκλή μηδενικής αύξησης για  $a = 1$  και  $b = 3$ .



Σχήμα 13: Πορτρέτο φάσεων για  $a = 1$  και  $b = 3$ .

Στα σχήματα (14)-(23) απεικονίζονται γραφικές παραστάσεις της λύσης του συστήματος (44), καθώς επίσης και διαγράμματα φάσεων, που παρήχθησαν από την αριθμητική προσέγγιση της λύσης με τη χρήση του προγράμματος MATHEMATICA.

Επιλέγοντας  $a = 1.1$ ,  $b = 2$ , ικανοποιείται η συνθήκη ευστάθειας  $a+1 > b$ . Το σημείο ισορροπίας είναι το  $(u_s, v_s) \sim (1, 1.81)$ , το οποίο είναι ασυμπωτικά ευσταθές καθώς  $a + 1 = 2.1 > 2$ .

Στο σχήμα (14) φαίνεται η σύγκλιση της λύσης  $u$  στη λύση ισορροπίας  $u_s = 1$ , μετά από κάποια ταλάντωση.

Ανάλογη συμπεριφορά παρατηρείται και για τη λύση  $v$ , στο σχήμα (15), όπου η λύση συγκλίνει στη λύση ισορροπίας  $v \sim 1.81$ .

Στο πορτραίτο φάσεων, οι τροχιές αναμένεται να συγκλίνουν στο  $(u_s, v_s)$  και το σημείο αυτό να εμφανίζεται ως ασυμπωτικά ευσταθής δίνη (σχήμα (16) στο  $uv$ -επίπεδο.

Για  $a = 1$ ,  $b = 2$ , βρισκόμαστε στο σημείο δικλάδωσης και τη γέννηση περιοδικής τροχιάς. Στα σχήματα (17) και (18), απεικονίζονται οι λύσεις στο σημείο διακλάδωσης. Το σημείο ισορροπίας είναι το  $(u_s, v_s) = (1, 2)$ . Για τις τιμές των παραμέτρων  $a = 1$ ,  $b = 2$ , το γραμμικοποιημένο σύστημα έχει πίνακα με καθαρά φανταστικές ιδιοτιμές.

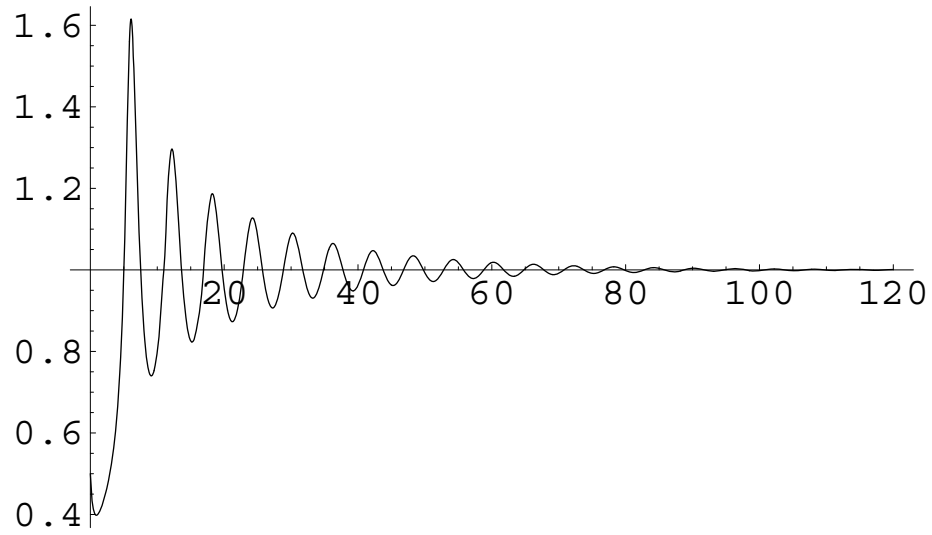
Στο πορτραίτο φάσεων που απεικονίζεται στο σχήμα (19), το σημείο  $(u_s, v_s)$  φαίνεται να είναι ευσταθές σημείο ισορροπίας, διαφορετικού, όμως, τύπου ευστάθειας από την προηγούμενη περίπτωση. Συγκεκριμένα, αυτό παρουσιάζεται ως «κέντρο», καθώς βρισκόμαστε στο «ξεκίνημα» της εμφάνισης περιοδικής συμπεριφοράς.

Για  $a = 0.9$ ,  $b = 2$ , στα σχήματα (20) και (21) απεικονίζονται οι περιοδικές λύσεις που έχουμε, καθώς σε αυτή την περίπτωση  $a + 1 = 1.9 < 2$ . Για τις τιμές αυτές των παραμέτρων, το σημείο ισορροπίας είναι το  $(u_s, v_s) \sim (1, 2.2)$ , το οποίο είναι πλέον ασταθές, έχοντας παραχωρήσει την ευστάθεια του στην περιοδική λύση.

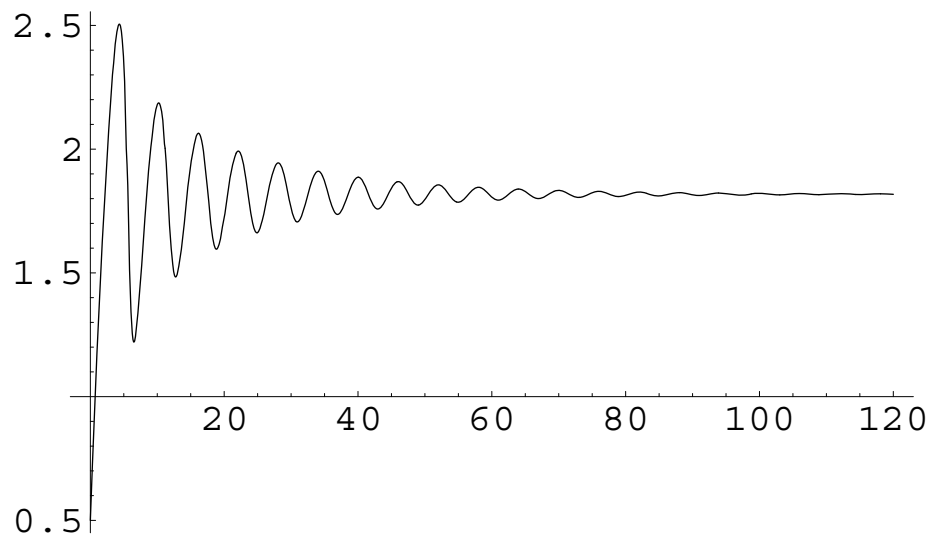
Έχοντας επιλύσει αριθμητικά το σύστημα, με αρχικές συνθήκες  $u(0) = 0.5$  και  $v(0) = 0.5$  και παρατηρώντας το πορτραίτο φάσεων του σχήματος (22), διαπιστώνεται η σύγκλιση των τροχιών στην περιοδική τροχιά η οποία περικλείει το ασταθές σημείο ισορροπίας  $(u_s, v_s) \sim (1, 2.2)$ .

Επιλύοντας αριθμητικά το σύστημα για αρχικές συνθήκες κοντά στο σημείο ισορροπίας  $(u(0), v(0)) = (1, 2.3)$ , παρατηρείται η σύγκλιση και από το εσωτερικό της περιοδικής τροχιάς, όπως φαίνεται στο σχήμα (23).

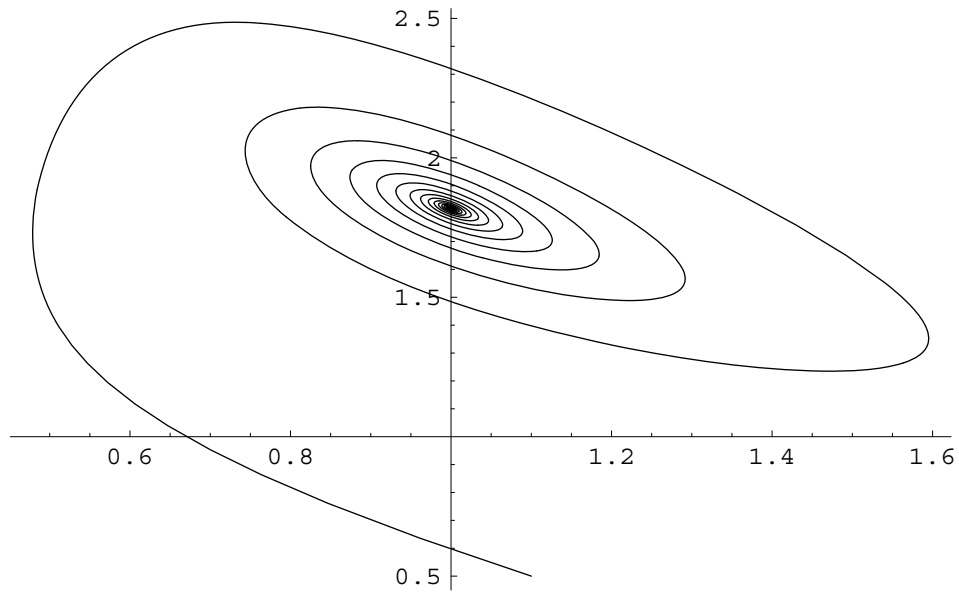
Στο σημείο αυτό αξίζει να σημειωθεί ότι θα ήταν ιδιαίτερα ενδιαφέρουσα η μελέτη για την αυστηρή απόδειξη τόσο της ευστάθειας της περιοδικής τροχιάς όσο και της ευστάθειας του σημείου ισορροπίας  $(1, b/a)$ , για την περίπτωση όπου  $b = a + 1$ .



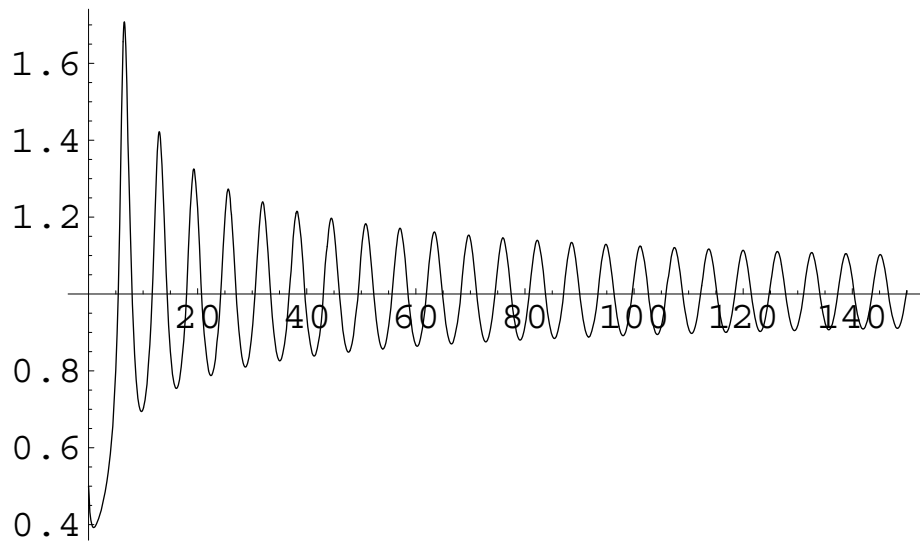
Σχήμα 14: Η λύση  $u$  για  $a = 1.1$  και  $b = 2$ . Σύγκλιση στη στάσιμη λύση  $u_s = 1$ .



Σχήμα 15: Η λύση  $v$  για  $a = 1.1$  και  $b = 2$ . Σύγκλιση στη στάσιμη λύση  $v_s \sim 1.81$ .

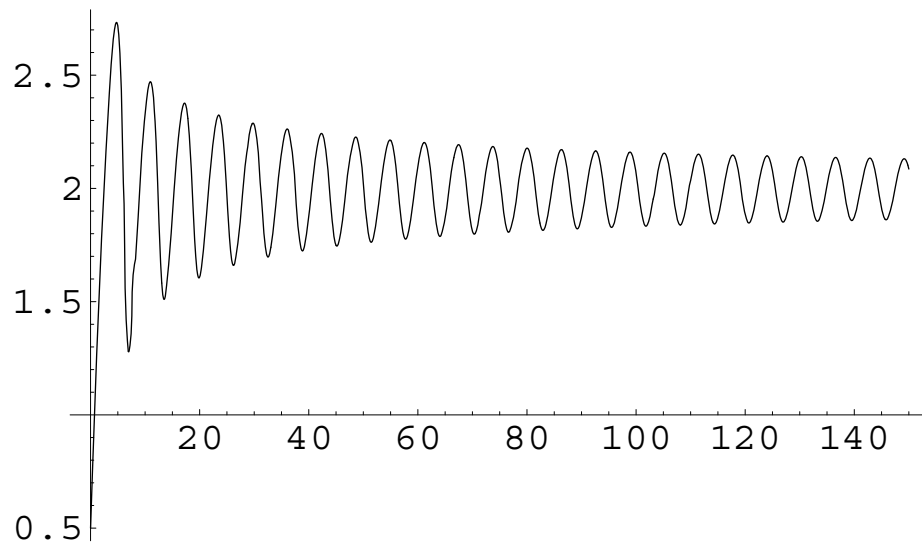


Σχήμα 16: Πορτραίτο φάσεων για  $a = 1.1$  και  $b = 2$ . Στο  $uv$ -επίπεδο, το σημείο  $(u_s, v_s) \sim (1, 1.81)$  είναι ασυμπτωτικά ευσταθής δίνη.

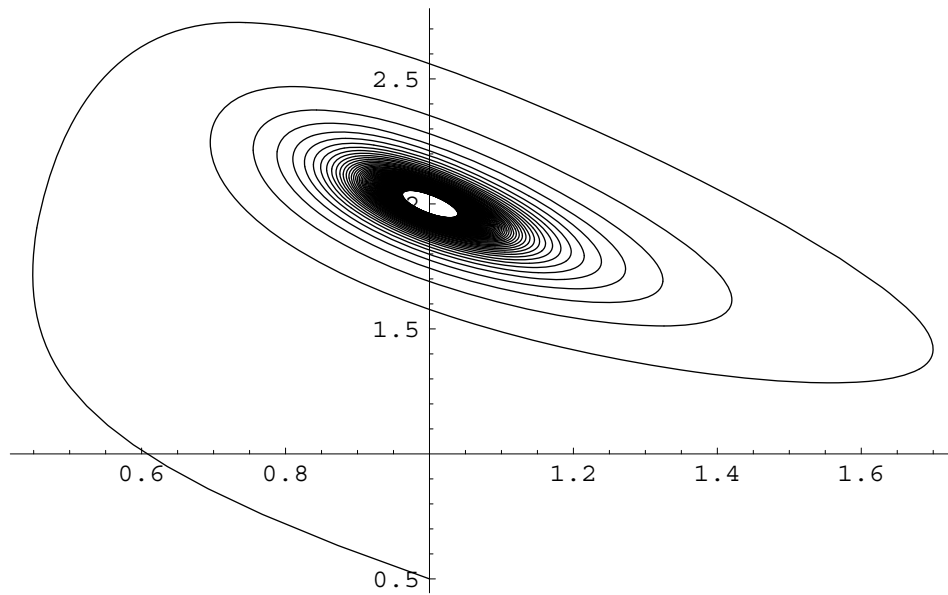


Σχήμα 17: Η λύση  $u$  για  $a = 1$  και  $b = 2$  (σημείο διακλάδωσης).

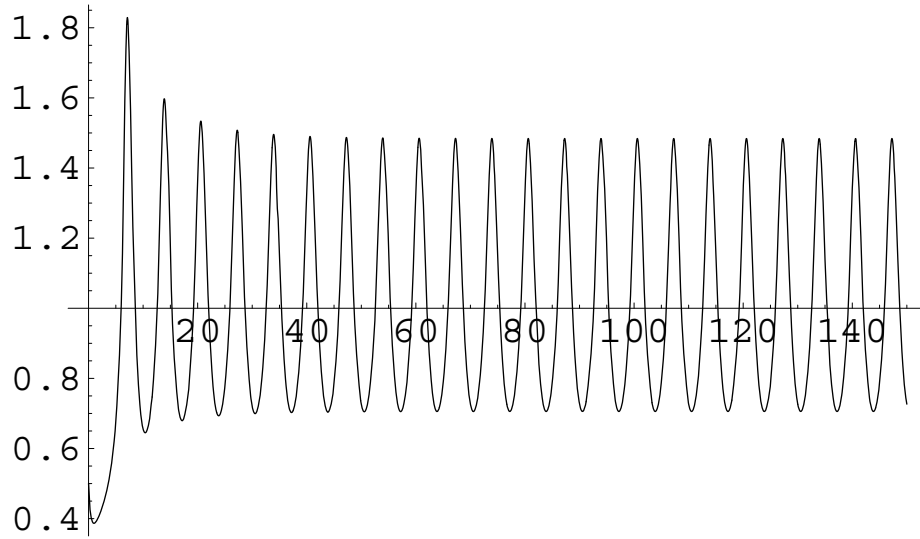




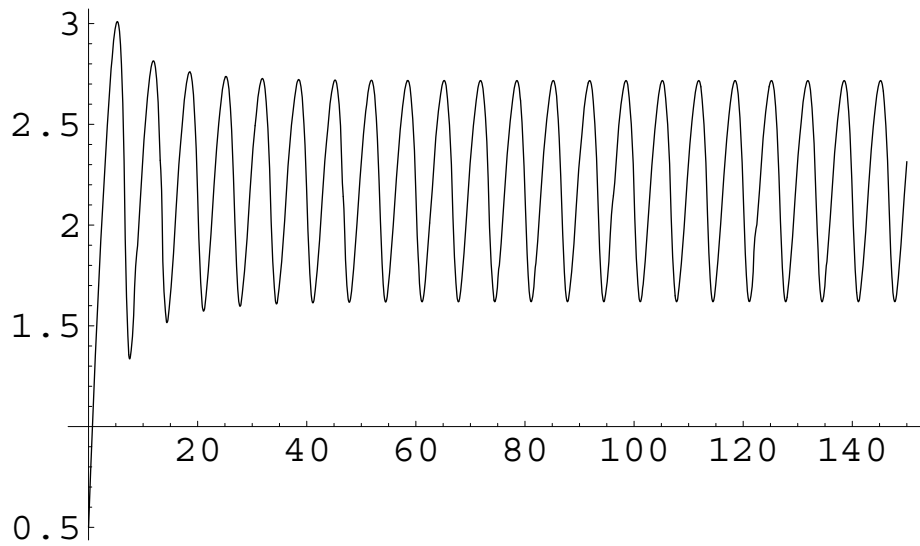
Σχήμα 18: Η λύση  $v$  για  $a = 1$  και  $b = 2$  (σημείο διακλάδωσης).



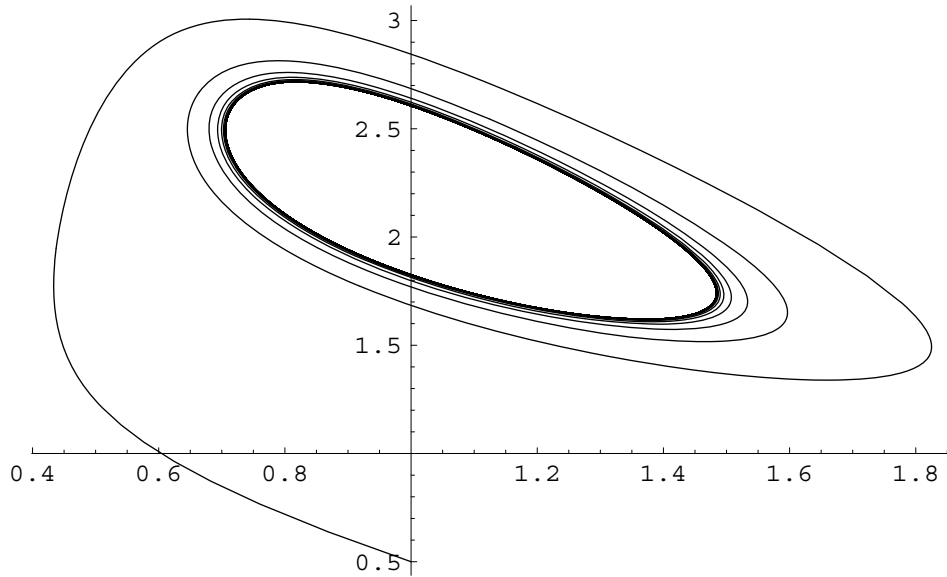
Σχήμα 19: Πορτραίτο φάσεων για  $a = 1$  και  $b = 2$  (σημείο διακλάδωσης).



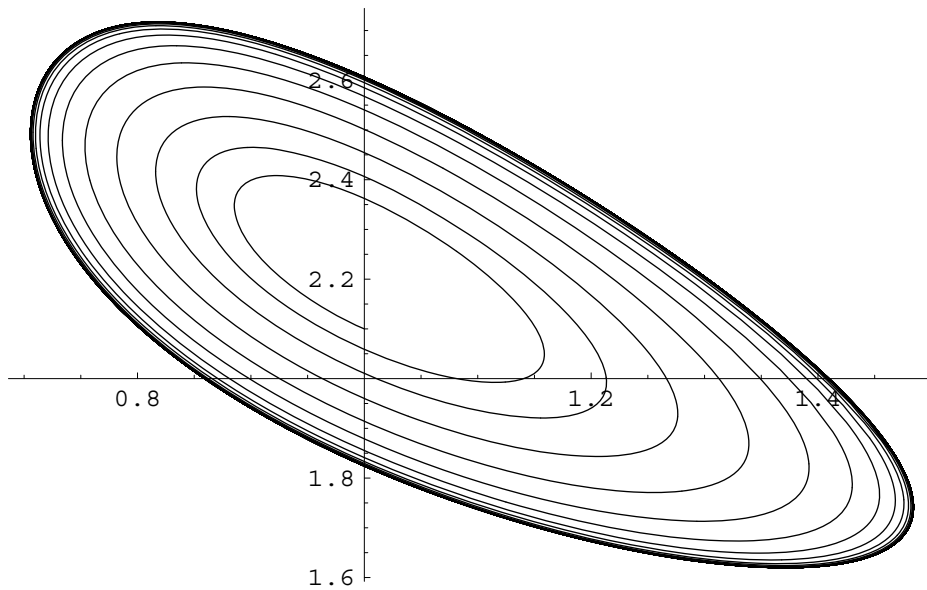
Σχήμα 20: Η λύση  $u$  για  $a = 0.9$  και  $b = 2$ . Η λύση  $u$  είναι περιοδική.



Σχήμα 21: Η λύση  $v$  για  $a = 0.9$  και  $b = 2$ . Η λύση  $v$  είναι περιοδική.



Σχήμα 22: Πορτραίτο φάσεων για  $a = 0.9$  και  $b = 2$ . Υπαρξη περιοδικής τροχιάς.



Σχήμα 23: Πορτραίτο φάσεων για  $a = 0.9$  και  $b = 2$ . Ενδείξεις για την ευστάθεια της περιοδικής τροχιάς.

## 4.2 ΤΟ ΜΟΝΤΕΛΟ BRUSSELATOR ΠΑΡΟΥΣΙΑ ΔΙΑΧΥΣΗΣ

### 4.2.1 Αστάθεια Turing

Η διάχυση, γενικά, θεωρείται ένας παράγοντας που τείνει να εξαλείφει τις διαφορές συγκέντρωσης σε ένα σύστημα, συμβάλλοντας στην επίτευξη χωρικά ομοιομορφών συγκεντρώσεων. Εντούτοις, ο Alan Turing, το 1952, στην εργασία του *The Chemical Basis of Morphogenesis* προέβλεψε ότι η παρουσία διάχυσης μπορεί να προκαλέσει αστάθεια και παραγωγή χωρικά μη ομογενών μορφωμάτων (spatially inhomogeneous patterns) σε ένα σύστημα που παρουσιάζει ευστάθεια όταν το φαινόμενο της διάχυσης θεωρείται αμελητέο. Παρόμοιες προβλέψεις είχαν γίνει και νωρίτερα (1938) από τον Nicolas Rashevski.

Η αστάθεια στο χώρο στην οποία μπορεί να οδηγηθεί ένα σύστημα λόγω της διάχυσης λέγεται *αστάθεια Turing* και έχει ιδιαίτερο ενδιαφέρον τόσο για χημικά όσο και για βιολογικά συστήματα (μορφογένεση).

Για την εμφάνιση χωρικών μορφωμάτων τύπου Turing, απαραίτητη προϋπόθεση είναι οι ρυθμοί διάχυσης των χημικών ειδών να μην είναι ίσοι μεταξύ τους. Η δε μορφή των μορφωμάτων εξαρτάται από τις κινητικές εκφράσεις της χημικής αντίδρασης που λαμβάνει χώρα.

Στη συνέχεια, μελετάται η επίδραση της διάχυσης στην περίπτωση του μοντέλου Brusselator και βρίσκονται οι συνθήκες που θα πρέπει να ικανοποιούνται ώστε να εμφανίζεται αστάθεια Turing.

Κίνητρό μας για τη μελέτη του φαινομένου αστάθειας Turing σε κινητικό μοντέλο αποτέλεσε η εργασία των A. Finlyason και J. Merkin: *Creation of spatial structure by an electric field applied to an ionic cubic autocatalator system* (2000).

### 4.2.2 Μαθηματική μοντελοποίηση της αντίδρασης Brusselator παρουσία διάχυσης

Η μαθηματική μοντελοποίηση της αντίδρασης Brusselator απουσία διάχυσης, όπως είδαμε στην ενότητα 4.1, οδήγησε σε ένα σύστημα συνήθων διαφορικών εξισώσεων (Σ.Δ.Ε.) της μορφής:

$$\frac{d\mathbf{C}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{C})$$

όπου  $C = C(t)$  η συγκέντρωση, ενώ η  $f$  αντιπροσωπεύει την κινητική της αντίδρασης.

Το φαινόμενο της διάχυσης υπεισέρχεται στις κινητικές εξισώσεις της αντίδρασης μέσω του 2ου νόμου του Fick, σύμφωνα με τον οποίο η μεταβολή στη συγκέντρωση μιας ουσίας  $A$  λόγω της διάχυσής της δίνεται από τη σχέση:

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} = D_A \nabla^2 C_A$$

όπου  $D_A$  ο συντελεστής διάχυσης της ουσίας  $A$ .

Παρουσία, λοιπόν, διάχυσης προκύπτει ένα σύστημα μερικών διαφορικών εξισώσεων (Μ.Δ.Ε.) της μορφής:

$$\frac{\partial \mathbf{C}}{\partial t} = \mathbf{f}(\mathbf{C}) + D \nabla^2 \mathbf{C}$$

όπου  $\mathbf{C} = \mathbf{C}(\mathbf{r}, t)$  είναι η συγκέντρωση, η οποία είναι συνάρτηση όχι μόνο του χρόνου αλλά και της θέσης, το  $\mathbf{f}$  αντιπροσωπεύει την κινητική της αντίδρασης και  $D$  είναι ο διαγώνιος πίνακας με στοιχεία τους συντελεστές διάχυσης (θετικές σταθερές).

Στην περίπτωση μονοδιάστατου χώρου, το παραπάνω σύστημα Μ.Δ.Ε. παίρνει τη μορφή:

$$\frac{\partial \mathbf{C}}{\partial t} = \mathbf{f}(\mathbf{C}) + D \left( \frac{\partial^2 \mathbf{C}}{\partial x^2} \right)$$

Στην ενότητα αυτή θα διερευνηθεί η ενδεχόμενη αστάθεια λόγω διάχυσης για το σύστημα Brusselator.

Λαμβάνοντας, λοιπόν, υπόψη το φαινόμενο της διάχυσης σε μονοδιάστατο χώρο, οι κινητικές εξισώσεις του συστήματος Brusselator ως προς τα δύο χημικά ενδιάμεσα  $X$  και  $Y$  παίρνουν την εξής μορφή:

$$\begin{aligned} \frac{\partial [X]}{\partial t} &= k_1[A] - k_2[B][X] + k_3[X]^2[Y] - k_4[X] + D_X \left( \frac{\partial^2 [X]}{\partial x^2} \right) \\ \frac{\partial [Y]}{\partial t} &= k_2[B][X] - k_3[X]^2[Y] + D_Y \left( \frac{\partial^2 [Y]}{\partial x^2} \right) \end{aligned} \quad (48)$$

όπου  $D_X$  και  $D_Y$  οι συντελεστές διάχυσης των  $X$  και  $Y$ , με  $D_X \neq D_Y$ .

Με αδιαστατικοποίηση (nondimensionalization), η οποία πραγματοποιείται θέτοντας:

$$\begin{aligned} k_i^* &= k_i / D_X \\ \tau &= k_4^* D_X t \\ a &= k_3^* (k_1^* [A])^2 / k_4^{*3} \\ b &= k_2^* [B] / k_4^* \end{aligned}$$

το σύστημα (48) μετατρέπεται στην αδιάστατη μορφή:

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial \tau} &= 1 - (b+1)u + au^2v + u_{xx} \\ \frac{\partial v}{\partial \tau} &= bu - au^2v + dv_{xx}\end{aligned}$$

όπου τα αδιάστατα μεγέθη  $u$  και  $v$  αντιστοιχούν στα  $X$  και  $Y$ , αντίστοιχα, ενώ  $d$  είναι ο λόγος των συντελεστών διάχυσης των δύο ενδιάμεσων, δηλαδή  $d = D_Y/D_X$ .

Για λόγους συνήθειας, για το συμβολισμό του χρόνου θα χρησιμοποιηθεί το σύμβολο  $t$  αντί για το  $\tau$ , χωρίς αυτό να επηρεάζει τα αποτελέσματα που λαμβάνονται.

Έτσι, το αδιάστατο σύστημα μερικών διαφορικών εξισώσεων που περιγράφει το μοντέλο Brusselator, παρουσία διάχυσης, σε μονοδιάστατο χώρο, είναι:

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial t} &= 1 - (b+1)u + au^2v + u_{xx} := f(u, v) + u_{xx} \\ \frac{\partial v}{\partial t} &= bu - au^2v + dv_{xx} := g(u, v) + dv_{xx}\end{aligned}\tag{49}$$

Θα μελετήσουμε αυτό το σύστημα Μ.Δ.Ε. στο διάστημα  $0 \leq x \leq 1$ , υποκείμενο σε συνοριακές συνθήκες Neumann,

$$\begin{aligned}u_x(0, t) &= u_x(1, t) = 0, \quad t > 0, \\ v_x(0, t) &= v_x(1, t) = 0, \quad t > 0\end{aligned}\tag{50}$$

Οι συνοριακές συνθήκες Neumann, καλούνται συχνά και *συνοριακές συνθήκες μηδενικής ροής (zero flux boundary conditions)*. Η φυσική τους ερμηνεία αντιστοιχεί στο ότι δεν υπάρχει απώλεια ποσοτήτων  $u, v$ , από τα άκρα του διαστήματος  $[0, 1]$ , για κάθε χρονική στιγμή.

Στο σύστημα δίνονται, επίσης, και οι αρχικές συνθήκες

$$u(x, 0) = f_0(x), \quad v(x, 0) = g_0(x)\tag{51}$$

Οι αρχικές αυτές συνθήκες αντιστοιχούν στις αρχικές συγκεντρώσεις (οι οποίες, φυσικά, πρέπει να ικανοποιούν τις συνοριακές συνθήκες).

Χωρίς την παρουσία διάχυσης, έχει βρεθεί ότι το σύστημα Brusselator έχει μοναδικό στάσιμο σημείο το

$$(u_s, v_s) = \left(1, \frac{b}{a}\right)$$

το οποίο είναι ευσταθές για

$$b < a + 1$$

Όπως στην περίπτωση χωρίς διάχυση, έτσι και τώρα, πραγματοποιείται αλλαγή μεταβλητής ώστε το στάσιμο σημείο να αντιστοιχεί στην αρχή των αξόνων.

Τίθεται, λοιπόν,

$$\begin{aligned} w_1 &= u - u_s = u - 1 \\ w_2 &= v - v_s = v - \frac{b}{a} \end{aligned}$$

Οπότε, το γραμμικοποιημένο σύστημα στο σημείο  $(w_1, w_2) = (0, 0)$ , παρουσία διάχυσης, έχει την εξής μορφή:

$$\frac{\partial \mathbf{w}}{\partial t} = A\mathbf{w} + D\mathbf{w}_{xx} \quad (52)$$

όπου

$$A = \begin{pmatrix} b-1 & a \\ -b & -a \end{pmatrix}, \quad D = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & d \end{pmatrix}$$

το οποίο υπόκειται σε συνοριακές συνθήκες Neumann, ενώ, φυσικά, δίνονται και αρχικές συνθήκες. Δηλαδή, η πλήρης μορφή του γραμμικοποιημένου συστήματος είναι:

$$\frac{\partial \mathbf{w}}{\partial t} = A\mathbf{w} + D\mathbf{w}_{xx}, \quad t > 0, \quad x \in (0, 1), \quad (53)$$

$$\mathbf{w}_x(0, t) = \mathbf{w}_x(1, t) = 0, \quad t > 0 \quad (54)$$

$$\mathbf{w}(x, 0) = \mathbf{z}_0(x), \quad x \in (0, 1). \quad (55)$$

Για τη μελέτη του συστήματος αυτού, απαιτείται η μελέτη του *προβλήματος ιδιοτιμών*:

$$\Phi_{xx} + \mu\Phi = 0, \quad (56)$$

$$\Phi_x(0) = \Phi_x(1) = 0. \quad (57)$$

όπου  $\mu$  οι ιδιοτιμές του προβλήματος και  $0 < x < 1$ .

Με αφορμή το πρόβλημα ιδιοτιμών γίνεται μια σύντομη αναφορά στη θεωρία των προβλημάτων Sturm-Liouville και στην εφαρμογή τους στην επίλυση της εξίσωσης θερμότητας. Η σύντομη αυτή αναφορά, θα αποδειχθεί ιδιαίτερα χρήσιμη καθώς θα αποκαλύψει τη βασική ιδέα για τη μαθηματική μοντελοποίηση του μηχανισμού αστάθειας Turing: την αναζήτηση συνθηκών για την ύπαρξη *μή-φραγμένων λύσεων ως προς το χρόνο*, για την «εξίσωση θερμότητας» (53).

### 4.2.3 Στοιχεία από τη θεωρία των προβλημάτων Sturm-Liouville και εφαρμογή στην επίλυση της εξίσωσης θερμοτήτας

**Το πρόβλημα Sturm-Liouville** Το πρόβλημα (56)-(57) είναι μια από τις πιο απλές περιπτώσεις προβλήματος Sturm-Liouville, του οποίου η γενικότερη μορφή είναι

$$[p(x)y_x]_x - q(x)y + \mu g(x)y = 0, \quad (58)$$

$$a_1y(0) + a_2y_x(0) = 0, \quad b_1y(1) + b_2y_x(1) = 0 \quad (59)$$

όπου οι συντελεστές  $p(x) \in C^1[0, 1]$  και  $q(x), g(x) \in C[0, 1]$ , ενώ  $a_i, b_i \in \mathbb{R}$ ,  $i = 1, 2$ .

Το πρόβλημα (56)-(57), λαμβάνεται για  $p(x) = 1$ ,  $q(x) = 0$ ,  $g(x) = 1$  και  $a_1 = b_1 = 0$ ,  $a_2 = b_2 = 1$ , αλλά για λόγους πληρότητας περιγράφεται, με συντομία, η λύση του καθώς και μερικά βασικά στοιχεία από τη γενική θεωρία των προβλημάτων Sturm-Liouville. Η προσοχή μας εστιάζεται στην περίπτωση όπου  $\mu = k^2 > 0$ . (Διευκρινίζεται ότι η πλήρης διερεύνηση του προβλήματος απαιτεί και τη μελέτη των περιπτώσεων όπου  $\mu = 0$  και  $\mu = -k^2 < 0$ , για τις οποίες παραλείπεται να δειχθεί ότι οδηγούν μόνο στη μηδενική (τετριμμένη) λύση  $\Phi = 0$ .)

Για την περίπτωση, λοιπόν, που  $\mu = k^2 > 0$ , η χαρακτηριστική εξίσωση της διαφορικής εξίσωσης δεύτερης τάξης (56), είναι η αλγεβρική εξίσωση ως προς  $r$ ,

$$r^2 + k^2 = 0,$$

η οποία έχει τις λύσεις  $r = \pm ik$ . Επομένως, η γενική λύση της εξίσωσης (56) είναι της μορφής:

$$\Phi(x) = \hat{c}_1 \cos(kx) + \hat{c}_2 \sin(kx), \quad (60)$$

όπου  $\hat{c}_1, \hat{c}_2$  είναι αυθαίρετες σταθερές.

Χρησιμοποιώντας τις συνοριακές συνθήκες (57), παρατηρείται ότι, αφού

$$\Phi_x(x) = -k\hat{c}_1 \sin(kx) + k\hat{c}_2 \cos(kx),$$

θα έχουμε

$$\Phi_x(0) = k\hat{c}_2 = 0, \quad (61)$$

$$\Phi_x(1) = -k\hat{c}_1 \sin k = 0. \quad (62)$$



Έχοντας εξαιρέσει την περίπτωση  $k = 0$ , η (61) δίνει  $\hat{c}_2 = 0$ . Επομένως, από την (62), για να μην έχουμε τη μηδενική λύση ( $\hat{c}_1 \neq 0$ ), θα πρέπει  $\sin k = 0$ . Η τελευταία εξίσωση δίνει τις λύσεις  $k = n\pi$ ,  $n = 1, 2, 3, \dots$ . Επομένως, οι ιδιοτιμές και οι ιδιοσυναρτήσεις του προβλήματος ιδιοτιμών (56)-(57) είναι οι εξής:

$$\mu_n = k^2(n), \quad k(n) = n\pi, \quad (63)$$

$$\Phi_n(x) = \hat{c}_n \cos(n\pi x), \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad (64)$$

Σημειώνεται ότι οι ιδιοσυναρτήσεις πολλαπλασιάζονται επί μια αυθαίρετη σταθερά  $\hat{c}_n \neq 0$ ,  $n = 1, 2, 3, \dots$ , όπως προκύπτει από την (60).

Γενικά, για τις ιδιοτιμές και τις ιδιοσυναρτήσεις του πρόβληματος Sturm-Liouville, αναφέρεται το ακόλουθο πολύ σημαντικό θεώρημα.

**ΘΕΩΡΗΜΑ 4.1** *Όλες οι ιδιοτιμές του προβλήματος Sturm-Liouville (58)-(59) είναι πραγματικές. Οι ιδιοτιμές του προβλήματος Sturm-Liouville (58)-(59), είναι απλές: Σε κάθε ιδιοτιμή αντιστοιχεί μόνο μία (γραμμικά ανεξάρτητη) ιδιοσυνάρτηση. Επιπλέον οι ιδιοτιμές μπορούν να διαταχθούν, έτσι ώστε*

$$\mu_1 < \mu_2 < \mu_3 < \dots < \mu_n < \dots,$$

και  $\mu_n \rightarrow \infty$  καθώς  $n \rightarrow \infty$ . Επιπλέον, αν  $y_1, y_2$  είναι δυο ιδιοσυναρτήσεις που αντιστοιχούν στις ιδιοτιμές  $\mu_1 \neq \mu_2$ , τότε

$$\int_0^1 g(x)y_1(x)y_2(x) = 0, \quad (65)$$

δηλαδή οι ιδιοτιμές είναι ορθογώνιες ως προς  $g(x)$ .

Είναι φανερό ότι οι ιδιοτιμές και οι ιδιοσυναρτήσεις του προβλήματος (56)-(57) οι οποίες δίνονται από την (63), αποτελούν χαρακτηριστικό παράδειγμα για το θεώρημα 4.1.

Η αυθαίρετη πολλαπλασιαστική σταθερά με την οποία είναι δυνατόν να πολλαπλασιάζονται οι ιδιοσυναρτήσεις του (58)-(59), προσδιορίζεται από τη συνθήκη κανονικότητας

$$\int_0^1 g(x)y_n^2(x) = 1. \quad (66)$$

Οι ιδιοσυναρτήσεις που ικανοποιούν τη συνθήκη (66), λέγονται κανονικοποιημένες.

Οι σχέσεις (65)-(66), μπορούν να συγκεντρωθούν στην

$$\int_0^1 y_n(x)y_m(x)dx = \delta_{mn}, \quad (67)$$

όπου  $\delta_{mn}$  είναι το Kronecker- $\delta$ ,

$$\delta_{mn} = \begin{cases} 0, & m \neq n, \\ 1, & m = n, \end{cases}$$

Στην περίπτωση αυτή, οι ιδιοσυναρτήσεις λέγεται ότι σχηματίζουν ένα ορθοκανονικό σύνολο.

Ειδικότερα, για τις ιδιοσυναρτήσεις τού προβλήματος (56)-(57), έχουμε

$$\int_0^1 \cos(n\pi x) \cos(m\pi x) dx = 0, \quad m \neq n,$$

ενώ για την απαίτηση κανονικότητας

$$\begin{aligned} 1 = \hat{c}_n^2 \int_0^1 \cos^2(n\pi x) dx &= \hat{c}_n^2 \int_0^1 (1 - \sin^2(n\pi x)) dx \\ &= \hat{c}_n^2 - \hat{c}_n^2 \int_0^1 \left( \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \cos 2(n\pi x) \right) dx \\ &= \hat{c}_n^2 - \frac{1}{2} \hat{c}_n^2 = \frac{1}{2} \hat{c}_n^2, \end{aligned}$$

άρα  $\hat{c}_n = \sqrt{2}$ . Επομένως, οι κανονικοποιημένες ιδιοσυναρτήσεις του προβλήματος (56)-(57) είναι οι

$$\mu_n = k^2(n), \quad k(n) = n\pi, \quad \hat{\Phi}_{k(n)}(x) = \sqrt{2} \cos(n\pi x), \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (68)$$

Οι κανονικοποιημένες ιδιοσυναρτήσεις του προβλήματος Sturm-Liouville, μπορούν να χρησιμοποιηθούν για την παραγωγή αναπτυγμάτων και σειρών συναρτήσεων με ιδιότητες εντελώς ανάλογες με αυτές των σειρών Fourier. Ισχύει το ακόλουθο πολύ βασικό θεώρημα, αντίστοιχο του θεωρήματος Fourier για τις ομώνυμες σειρές.

**ΘΕΩΡΗΜΑ 4.2** (Γενικευμένη σειρά Fourier) Έστω  $y_1, y_2, \dots, y_n, \dots$  οι κανονικοποιημένες ιδιοσυναρτήσεις του προβλήματος Sturm-Liouville (58)-(59), και  $f(x), f'(x)$  τμηματικά συνεχείς συναρτήσεις στο διάστημα  $0 \leq x \leq 1$ .

Συμβολίζουμε με  $f(c^+)$  και  $f(c^-)$ , τα όρια

$$f(c^+) = \lim_{x \rightarrow c^+} f(x), \quad f(c^-) = \lim_{x \rightarrow c^-} f(x).$$

Τότε η σειρά

$$\sum_n c_n y_n(x), \quad c_n = \int_0^1 r(x) f(x) y_n(x) dx, \quad n = 1, 2, \dots$$

συγκλίνει στο  $\frac{f(x^+) + f(x^-)}{2}$  σε κάθε σημείο  $x$  του ανοικτού διαστήματος  $0 < x < 1$ , όπου η  $f$  είναι ασυνεχής και στην  $f(x)$ , σε κάθε σημείο  $x$  του ανοικτού διαστήματος  $0 < x < 1$ , όπου η  $f$  είναι συνεχής.

Αν η συνάρτηση  $f$  είναι συνεχής στο  $0 \leq x \leq 1$  και η σύγκλιση συμβαίνει σε κάθε σημείο του διαστήματος  $0 \leq x \leq 1$  τότε η  $f$  πρέπει να ικανοποιεί τις συνοριακές συνθήκες (59) στην περίπτωση όπου  $a_2 = 0$ , δηλαδή πρέπει  $f(0) = 0$ , ή  $b_2 = 0$ , που σημαίνει ότι  $f(1) = 0$ , ή  $f(1) = f(0)$  αν  $a_2 = b_2 = 0$ . Σε κάθε άλλη περίπτωση δεν είναι απαραίτητο να ικανοποιεί κάποιες συνοριακές συνθήκες.

Για μια σύγκριση με τις σειρές Fourier, μια συνεχής συνάρτηση  $f$  αναπτύσσεται σε συνημιτονική σειρά Fourier, χρησιμοποιώντας το σύστημα (68). Μια συνάρτηση  $f$ , που ικανοποιεί τις συνοριακές συνθήκες του προβλήματος Sturm-Liouville

$$\Phi_{xx} + \mu\Phi = 0, \quad (69)$$

$$\Phi(0) = \Phi(1) = 0, \quad (70)$$

(οι (70) ονομάζονται συνοριακές συνθήκες Dirichlet) γράφεται σε ημιτονική σειρά Fourier, αφού οι ιδιοσυναρτήσεις του (69)-(70), βρίσκονται να είναι  $\Phi(x) \propto \sin n\pi x$ , ενώ με κατάλληλες συνοριακές συνθήκες (περιοδικές) κατασκευάζονται πλήρεις σειρές Fourier (δηλαδή σειρές με ημιτονικούς και συνημιτονικούς όρους).

**Διάχυση θερμότητας σε ράβδο με μονωμένα άκρα** Η θεωρία επίλυσης των προβλημάτων Sturm-Liouville και των σειρών Fourier συναντά άμεση εφαρμογή στην επίλυση μερικών διαφορικών εξισώσεων. Θα αναφερθούμε στην επίλυση της εξίσωσης θερμότητας με *συνοριακές συνθήκες τύπου Neumann*

$$\alpha^2 u_{xx} = u_t, \quad 0 < x < L, \quad t > 0, \quad (71)$$

$$u_x(0, t) = u_x(L, t) = 0, \quad t \geq 0, \quad (72)$$

$$u(x, 0) = f(x), \quad 0 \leq x \leq L. \quad (73)$$

Οι συνθήκες (72) είναι οι συνοριακές συνθήκες (δηλαδή οι συνθήκες στα άκρα του διαστήματος  $[0, L]$ ). Η φυσική ερμηνεία των συνοριακών συνθηκών (72) είναι ότι δεν υπάρχει ροή θερμότητας στα άκρα της ράβδου (μοναδιαίου μήκους), δηλαδή η ράβδος έχει άκρα μονωμένα. Η *αρχική συνθήκη* (73), περιγράφει την αρχική κατανομή της θερμότητας στη ράβδο τη χρονική στιγμή  $t = 0$ .

Το πρόβλημα (71)-(73) επιλύεται με τη μέθοδο του χωρισμού των μεταβλητών. Αναζητώνται μη-τετριμμένες λύσεις της μορφής

$$u(x, t) = X(x)T(t) \neq 0, \quad (74)$$

οπότε, από τις (71) και (74), λαμβάνεται ότι

$$\alpha^2 X_{xx}T = XT_t, \quad (75)$$

η οποία, ισοδύναμα, γράφεται:

$$\frac{X_{xx}}{X} = \frac{1}{\alpha^2} \frac{T_t}{T} \quad (76)$$

Με αυτό τον τρόπο έχει επιτευχθεί ο διαχωρισμός των μεταβλητών, καθώς το αριστερό μέλος της (76) εξαρτάται μόνο από τη μεταβλητή  $x$ , ενώ το δεξί της μέλος εξαρτάται μόνο από τη μεταβλητή  $t$ .

Για να ισχύει η ισότητα (76), θα πρέπει να υπάρχει μια σταθερά  $-\mu \in \mathbb{R}$  για την οποία ισχύει

$$\frac{X_{xx}}{X} = \frac{1}{\alpha^2} \frac{T_t}{T} = -\mu. \quad (77)$$

Η σταθερά αυτή ονομάζεται *σταθερά διαχωρισμού* των ανεξάρτητων μεταβλητών  $x$  και  $t$ . Συμβολίζεται δε με  $-\mu$  γιατί, όπως θα φανεί στη συνέχεια, θα προκύψει πράγματι αρνητική (δηλ.  $\mu > 0$ ).

Από την εξίσωση (77) προκύπτουν δύο συνήθεις διαφορικές εξισώσεις

$$X_{xx} + \mu X = 0, \quad (78)$$

$$T_t + \alpha^2 \mu T = 0. \quad (79)$$

με  $t > 0$  και  $0 < x < L$ .

Για την (78), χρησιμοποιώντας τις συνοριακές συνθήκες (72) και την έκφραση της λύσης (74), προκύπτει ένα πρόβλημα Sturm-Liouville του τύπου (56)-(57) (στο (56)-(57) έχουμε  $L = 1$ ), για τη συνάρτηση  $X(x)$ , δηλαδή

$$X_{xx} + \mu X = 0, \quad (80)$$

$$X_x(0) = X_x(L) = 0. \quad (81)$$

Οι περιπτώσεις  $\mu = 0$  και  $\mu = -k^2 < 0$  οδηγούν στην τετριμμένη λύση του προβλήματος (80)-(81). Η μόνη επιλογή που οδηγεί σε μη-τετριμμένη λύση, είναι για  $\mu = k^2 > 0$ . Τότε, λαμβάνονται ιδιοτιμές και ιδιοσυναρτήσεις αντίστοιχες του συστήματος(63) (ή του ορθοκανονικού συστήματος (68)). Δηλαδή,

$$\begin{aligned} \mu &= \mu_n = k^2(n), \quad k(n) = \frac{n\pi}{L}, \\ X(x) &= X_{k(n)}(x) \propto \cos\left(\frac{n\pi}{L}x\right), \quad n = 1, 2, 3, \dots, \end{aligned} \quad (82)$$

Με τις τιμές  $\mu$  που δίδονται από την (82), η εξίσωση (79) γίνεται

$$T_t + \alpha^2 \frac{n^2 \pi^2}{L^2} T = 0,$$

η οποία δίνει τη λύση

$$T(t) \propto e^{-\alpha^2 \frac{n^2 \pi^2}{L^2} t} \quad (83)$$

Με αυτό τον τρόπο και χρησιμοποιώντας την (74), λαμβάνεται το παρακάτω θεμελιώδες σύστημα (γραμμικά ανεξάρτητων) λύσεων

$$\begin{aligned} u_0(x, t) &= 1, \quad n = 0 \\ u_n(x, t) &= e^{-\alpha^2 \frac{n^2 \pi^2}{L^2} t} \cos\left(\frac{n\pi}{L} x\right), \quad n = 1, 2, 3, \dots, \end{aligned} \quad (84)$$

Δεν ελήφθησαν υπόψη οι σταθερές αναλογίας από τις (82) και (83), καθώς θα χρησιμοποιηθεί η αρχή της υπέρθεσης: Επειδή η διαφορική εξίσωση και οι συνοριακές συνθήκες είναι γραμμικές και ομογενείς, ένας πεπερασμένος γραμμικός συνδυασμός του θεμελιώδους συστήματος λύσεων (84) αποτελεί επίσης λύση. Στο σημείο αυτό αποδεικνύεται ιδιαίτερα κρίσιμο το θεώρημα Fourier. Γενικεύοντας την αρχή της υπέρθεσης θεωρούμε ότι αυτό συμβαίνει για άπειρου πλήθους γραμμικό συνδυασμό των θεμελιώδους συστήματος λύσεων ο οποίος συγκλίνει (δηλαδή μια συγκίνουσα σειρά). Έτσι υποθέτουμε ότι η λύση έχει τη μορφή

$$\begin{aligned} u(x, t) &= \frac{c_0}{2} u_0(x, t) + \sum_{n=1}^{\infty} c_n u_n(x, t) \\ &= \frac{c_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} c_n e^{-\alpha^2 \frac{n^2 \pi^2}{L^2} t} \cos\left(\frac{n\pi}{L} x\right) \end{aligned} \quad (85)$$

Στη συνέχεια, για τη σειρά (85), θα χρησιμοποιείται και ο συμβολισμός

$$u(x, t) = \sum_k c_k e^{\nu t} X_k, \quad \nu = \nu(k^2) = -\alpha^2 \frac{n^2 \pi^2}{L^2} < 0. \quad (86)$$

Οι σταθερές  $c_n$ ,  $n = 0, 1, 2, 3, \dots$ , προσδιορίζονται από την απαίτηση η λύση (85) να ικανοποιεί την αρχική συνθήκη (73). Έτσι, θέτοντας  $t = 0$  στην (85), λαμβάνεται ότι

$$u(x, 0) = \frac{c_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} c_n \cos \frac{n\pi}{L} x = f(x). \quad (87)$$

Η αρχική, δηλαδή, συνθήκη  $f(x)$  αναπτύσσεται σε συνημιτονική σειρά Fourier. Οι συντελεστές υπολογίζονται από τη σχέση

$$c_n = \frac{2}{L} \int_0^1 f(x) \cos\left(\frac{n\pi}{L}x\right) dx, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Από την έκφραση της λύσης (85), προκύπτει ότι

$$\lim_{t \rightarrow \infty} u(x, t) = \frac{c_0}{2} := u_{as}. \quad (88)$$

Παρατηρείται, λοιπόν, ότι η λύση (85) μπορεί να θεωρηθεί ως άθροισμα της στάσιμης (steady-state) λύσης  $u_{as}$ , (ή, αλλιώς, του ασυμπτωτικά ευσταθούς σημείου ισορροπίας  $u_{as}$ , λόγω της (88) ) και της συνημιτονικής σειράς. Το τμήμα της λύσης που αναπαριστά η σειρά μπορεί να θεωρηθεί ως «παροδική» (transient) κατανομή θερμότητας, καθώς τείνει στο μηδέν για  $t \rightarrow \infty$ . Η παρατήρηση αυτή συμφωνεί με τη φυσική του προβλήματος, καθώς τα άκρα της ράβδου είναι μονωμένα και δεν επιτρέπεται απώλεια θερμότητας. Για το λόγο αυτό, λόγω θερμικής αγωγιμότητας, θα πρέπει η αρχική κατανομή θερμότητας να «εξομαλυνθεί» κατά τέτοιο τρόπο έτσι ώστε η κατανομή της θερμότητας μετά από κάποιο χρόνο να γίνει

$$u_{as} = \frac{c_0}{2} = \frac{1}{L} \int_0^1 f(x) dx.$$

Ως προς τη φυσική ερμηνεία της  $u_{as}$ , θα πρέπει να αναφερθεί ότι αυτή είναι η μέση τιμή της αρχικής κατανομής θερμότητας.

Η εξίσωση θερμότητας θα μπορούσε να επιλυθεί με συνοριακές συνθήκες Dirichlet  $u(0, t) = u(L, t) = 0$  αντί των (72). Σε αυτή την περίπτωση, θα παρατηρούσαν ότι

$$\lim_{t \rightarrow \infty} u(x, t) = 0, \quad (89)$$

για οποιαδήποτε αρχική συνθήκη, σε συμφωνία και πάλι τη φυσική διαίσθηση του προβλήματος.

Αυτή η *ασυμπτωτική συμπεριφορά των λύσεων* της εξίσωσης θερμότητας ως προς το χρόνο, η οποία οφείλεται στην παρουσία του εκθετικού παράγοντα με αρνητικό εκθέτη, δηλαδή του  $e^{\nu t}$ ,  $\nu < 0$ , θα καθορίσει τη διαδικασία για τη μαθηματική περιγραφή του μηχανισμού αστάθειας Turing.

Υπενθυμίζεται ότι η γραφή της λύσης του προβλήματος (85) ως άθροισμα της στάσιμης λύσης  $u_{as}$  και της «παροδικής» κατανομής θερμότητας, θυμίζει

τη γραφή της λύσης που κατασκευάστηκε κατά την απόδειξη του Θεωρήματος διακλάδωσης Hopf: αναζητήθηκαν λύσεις του συστήματος συνήθων διαφορικών εξισώσεων, που να έχουν τη μορφή αθροίσματος του (ασταθούς) στάσιμου σημείου και ενός περιοδικού τμήματος (το οποίο, κατά τη διακλάδωση Hopf, δεν είναι «παροδικό»).

#### 4.2.4 Μελέτη του γραμμικοποιημένου συστήματος που αντιστοιχεί στο σύστημα Brusselator παρουσία διάχυσης

Με βάση την ανάλυση της παραγράφου 4.2.3 και λόγω της μορφής της εξίσωσης (53), το σύστημα (53) θεωρείται ως ένα σύστημα «εξισώσεων θερμότητας». Το πρώτο βήμα της μελέτης μας είναι η μελέτη του προβλήματος ιδιοτιμών

$$\mathbf{w}_{xx} + k^2 \mathbf{w} = 0 \quad (90)$$

$$\mathbf{w}_x(0) = \mathbf{w}_x(1) = 0. \quad (91)$$

Το πρόβλημα ιδιοτιμών (90)-(91) είναι φανερό ότι αποτελεί ένα σύστημα προβλημάτων Sturm-Liouville της μορφής (56)-(57), αφού κάθε ένα από τα  $w_1, w_2$  ικανοποιεί το (56)-(57). Σε αναλογία, λοιπόν, με τη μελέτη του προβλήματος (56)-(57), το σύστημα ιδιοτιμών και ιδιοσυναρτήσεων του (90)-(91) βρίσκεται ότι είναι:

$$\begin{aligned} k(n) &= n\pi, \\ \mathbf{w}_{k(n)}(x) &\propto \cos(n\pi x), \quad n = 1, 2, 3, \dots \end{aligned} \quad (92)$$

**Η βασική ιδέα για την περιγραφή του μηχανισμού αστάθειας λόγω διάχυσης.** Η λύση του συστήματος (53)-(55) αναμένεται να έχει ανάλογη έκφραση με τη λύση (85) της εξίσωσης θερμότητας με συνοριακές συνθήκες Neumann, (71)-(73). Με βάση το συμβολισμό που υποδεικνύεται από τη (86), αναζητώνται λύσεις της μορφής

$$\mathbf{w}(x, t) = \sum_k c_k e^{\lambda t} \mathbf{w}_k(x) \quad (93)$$

όπου, όπως στην περίπτωση της λύσης (86) ο παράγοντας  $\nu = \nu(k^2)$  εξαρτάται από τις ιδιοτιμές  $k^2(n)$  που δίδονται από τη σχέση (82), έτσι και στην περίπτωση που εξετάζεται τώρα, ο παράγοντας  $\lambda$  εξαρτάται από τις ιδιοτιμές  $k^2(n)$  που δίδονται από την (92).

Οι συντελεστές  $c_k$  υπολογίζονται με ανάλογο τρόπο όπως και στην περίπτωση της εξίσωσης θερμότητας (71)-(73). Είναι, δηλαδή, οι συντελεστές Fourier οι οποίοι υπολογίζονται σύμφωνα με τον τύπο που δίνεται από το θεώρημα 4.2,

χρησιμοποιώντας τις αρχικές συνθήκες (55).

Το ότι για κάθε ιδιοτιμή  $k^2$  ισχύει ότι  $\nu(k^2) < 0$ , εξηγεί την ασυμπτωτική ευστάθεια της στάσιμης λύσης για το πρόβλημα (71)-(73), γεγονός που είναι σε απόλυτη συμφωνία με τη φυσική ερμηνεία για τη θερμική αγωγιμότητα.

Το φαινόμενο αστάθειας Turing, το οποίο περιγράφει την ενδεχόμενη αστάθεια του χωρικά ομογενούς στάσιμου σημείου  $(u_s, v_s)$  λόγω της παρουσίας διάχυσης, επιβάλλει την ακόλουθη μαθηματική διατύπωση για το φαινόμενο αυτό:

Υπάρχουν κάποιες ιδιοτιμές  $k^2$  για τις οποίες ο παράγοντας  $\lambda(k^2) > 0$  ή  $\text{Re}\lambda(k^2) > 0$ ;

Υπάρχει κάποιο εύρος για τις ιδιοτιμές  $k^2$ , έτσι ώστε αν  $k_1^2 < k^2 < k_2^2$ , να ισχύει  $\lambda(k^2) > 0$  ή  $\text{Re}\lambda(k^2) > 0$ ;

Σε αυτή την περίπτωση, η λύση του γραμμικοποιημένου προβλήματος (53)-(55) θα συμπεριφερόταν ως

$$\mathbf{w}(x, t) \sim \sum_{k_1}^{k_2} c_k e^{\lambda(k^2)t} \mathbf{w}_k(x),$$

για μεγάλους χρόνους, γεγονός που θα εξηγεί την αστάθεια του χωρικά ομογενούς στάσιμου σημείου  $(u_s, v_s)$ .

Με την προϋπόθεση, λοιπόν, ότι η παραπάνω σειρά συγκλίνει, παραγωγίζοντας ως προς  $t$  τη σχέση

$$\mathbf{w}(x, t) = \sum_k c_k e^{\lambda t} \mathbf{w}_k(x), \quad (94)$$

προκύπτει ότι:

$$\frac{\partial \mathbf{w}(x, t)}{\partial t} = \lambda \sum_k c_k e^{\lambda t} \mathbf{w}_k(x) \quad (95)$$

Επίσης, έχουμε:

$$\begin{aligned} D\mathbf{w}_{xx} &= D\left(\sum_k c_k e^{\lambda t} \mathbf{w}_k\right)_{xx} \\ &= D \sum_k c_k e^{\lambda t} (\mathbf{w}_k)_{xx} \end{aligned}$$

η οποία, μέσω της (90) γίνεται:

$$D\mathbf{w}_{xx} = -D \sum_k c_k e^{\lambda t} k^2 \mathbf{w}_k(x) \quad (96)$$



Από τις σχέσεις (53), (94), (95) και (96), έχουμε ότι :

$$\lambda \sum_k c_k e^{\lambda t} \mathbf{w}_k(x) = A \sum_k c_k e^{\lambda t} \mathbf{w}_k(x) - D \sum_k c_k e^{\lambda t} k^2 \mathbf{w}_k(x)$$

Οπότε, εξισώνοντας τους όρους για κάθε  $k$ , προκύπτει ότι

$$\lambda \mathbf{w}_k = A \mathbf{w}_k - D k^2 \mathbf{w}_k$$

ή

$$\lambda \mathbf{w}_k = (A - D k^2) \mathbf{w}_k, \quad \forall k$$

Δηλαδή, για κάθε  $k$ , θα πρέπει το  $\lambda$  να είναι ιδιοτιμή του πίνακα  $A - D k^2$ .

Στην περίπτωση που εξετάζουμε,

$$D = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & d \end{pmatrix} \text{ και } A = \begin{pmatrix} b-1 & a \\ -b & -a \end{pmatrix}$$

Οπότε,

$$A - D k^2 = \begin{pmatrix} b-1-k^2 & a \\ -b & -a-dk^2 \end{pmatrix} = M$$

Οι ιδιοτιμές του πίνακα  $M$ , ως συναρτήσεις του  $k$ , αποτελούν τις ιδιοτιμές που αντιστοιχούν στον όρο της διάχυσης και βρίσκονται από τις ρίζες του χαρακτηριστικού πολυωνύμου

$$\lambda^2 - \text{tr}M\lambda + \det M$$

Έχουμε ότι :

$$\text{tr}M = b-1-k^2 - a - dk^2 = -(a-b+1) - (d+1)k^2$$

Για να είναι το στάσιμο σημείο  $(1, b/a)$  ευσταθές απουσία διάχυσης, έχει βρεθεί ότι θα πρέπει να ισχύει ότι  $b < a+1$ . Επομένως, θα είναι  $a-b+1 > 0$ . Θέτοντας  $\delta^2 = a-b+1$  έχουμε

$$\text{tr}M = -\delta^2 - (d+1)k^2$$

Εξάλλου,

$$\begin{aligned} \det M &= (b-1-k^2)(-a-dk^2) + ab \\ &= -ab - bdk^2 + a + dk^2 + ak^2 + dk^4 + ab \\ &= dk^4 + ak^2 - (b-1)dk^2 + a \\ &= dk^4 + \left( a - (b-1)d \right) k^2 + a \end{aligned}$$

Επομένως, το χαρακτηριστικό πολυώνυμο με ρίζες τις ιδιοτιμές του  $M$  είναι :

$$\lambda^2 + \left(k^2(d+1) + \delta^2\right)\lambda + \left(dk^4 + \left(a - (b-1)d\right)k^2 + a\right)$$

ή

$$\lambda^2 + \left(k^2(d+1) + a - b + 1\right)\lambda + \left(dk^4 + \left(a - (b-1)d\right)k^2 + a\right) \quad (97)$$

Αν  $\text{Re}\lambda(k^2) < 0$ , δηλαδή οι ιδιοτιμές του πίνακα  $M$  έχουν αρνητικό πραγματικό μέρος, τότε για τη λύση θα ισχύει ότι

$$\mathbf{w}(x, t) = \sum_k c_k e^{\lambda t} \mathbf{w}_k(x) \rightarrow 0, \quad t \rightarrow \infty$$

Αυτό σημαίνει ότι η ευστάθεια του στάσιμου σημείου  $(1, b/a)$  δεν μεταβάλλεται εξαιτίας της παρουσίας διάχυσης αφού το τμήμα της λύσης που αντιστοιχεί στη διάχυση εξαφανίζεται καθώς  $t \rightarrow \infty$ .

Για να γίνει το στάσιμο σημείο ασταθές σε χωρική διαταραχή, παρουσία της διάχυσης, θα πρέπει να ισχύει ότι

$$\text{Re}\lambda(k^2) > 0, \quad \text{για } k \neq 0$$

Ένα τριώνυμο της μορφής  $x^2 + \alpha x + \beta$  έχει ρίζα με  $\text{Re}(x) > 0$  αν  $\alpha < 0$  ή  $\beta < 0$ . Κατά συνέπεια, η ανισότητα  $\text{Re}\lambda(k^2) > 0$  είναι δυνατό να ισχύει στις εξής δύο περιπτώσεις :

1. Ο συντελεστής του  $\lambda$  να είναι αρνητικός, δηλαδή  $k^2(d+1) + a - b + 1 < 0$ . Αυτό, όμως, στη συγκεκριμένη περίπτωση δεν μπορεί να ισχύει διότι για να είναι το στάσιμο σημείο ευσταθές απουσία διάχυσης είδαμε ότι θα πρέπει  $a - b + 1 > 0$ .
2. Να ισχύει ότι :

$$h(k^2) = dk^4 + \left(a - (b-1)d\right)k^2 + a < 0 \quad (98)$$

Αυτό μπορεί να συμβεί στην περίπτωση που ισχύει ότι

$$a - (b-1)d < 0 \Rightarrow d \neq 1 \quad (99)$$

(Για  $d = 1$  θα είχαμε  $a - b + 1 < 0$ , κάτι το οποίο, όπως είδαμε, δεν μπορεί να ισχύει στην περίπτωση που το στάσιμο σημείο είναι ευσταθές απουσία διάχυσης).

Για  $b \neq 1$ , από τη σχέση (99) προκύπτει ότι

$$d > \frac{a}{b-1}, \quad (100)$$

η οποία, λόγω της απαίτησης  $a - b + 1 > 0$  ή  $a > b - 1$ , δίνει τελικά ότι

$$d > 1 \quad (101)$$

Η συνθήκη (99) είναι αναγκαία αλλά όχι ικανή για να είναι  $\text{Re}\lambda > 0$ . Επειδή η  $h$  είναι συνάρτηση του  $k^2$ , μπορεί να υπάρχει μη μηδενικό  $k^2$  για το οποίο η συνάρτηση  $h(k^2)$  να γίνεται αρνητική. Μια νέα, λοιπόν, συνθήκη είναι το ελάχιστο της  $h(k^2)$ ,  $h_{min}$ , να είναι αρνητικό.

Παραγωγίζοντας ως προς  $k^2$  την  $h(k^2)$  έχουμε:

$$\begin{aligned} h'(k^2) &= 2dk^2 + a - (b-1)d \\ h'(k^2) = 0 &\Rightarrow k_m^2 = -\frac{a - (b-1)d}{2d} \end{aligned} \quad (102)$$

Επομένως,

$$\begin{aligned} h_{min} &= h(k_m^2) \\ &= h\left(-\frac{a - (b-1)d}{2d}\right) \\ &= d\left(-\frac{a - (b-1)d}{2d}\right)^2 + (a - (b-1)d)\left(-\frac{a - (b-1)d}{2d}\right) + a \\ &= \frac{1}{4d}(a - (b-1)d)^2 - \frac{1}{2d}(a - (b-1)d)^2 + a \end{aligned}$$

Δηλαδή,

$$h_{min} = a - \frac{1}{4d}(a - (b-1)d)^2 \quad (103)$$

Κατά συνέπεια, για να είναι  $h_{min} < 0$ , για κάποιο  $k^2 \neq 0$ , αρκεί να ισχύει ότι

$$\frac{1}{4d}(a - (b-1)d)^2 > a \quad (104)$$

Το σημείο όπου  $h_{min} = 0$  αποτελεί ένα *σημείο διακλάδωσης*, αφού για  $h_{min} < 0$  έχουμε αστάθεια στο χώρο ( $\text{Re}\lambda > 0$ ), ενώ για  $h_{min} > 0$  έχουμε ευστάθεια ( $\text{Re}\lambda < 0$ ). Στο σημείο  $h_{min} = 0$ , από τη σχέση (103), έχουμε ότι:

$$\frac{1}{4d}(a - (b-1)d)^2 = a \quad (105)$$

Από την επίλυση της εξίσωσης αυτής μπορεί να υπολογιστεί η «κρίσιμη» τιμή του  $d(> 1)$ , η οποία συμβολίζεται με  $d_c$ , για τη μεταβολή της ευστάθειας του

συστήματος παρουσία της διάχυσης.  
Από την (105), προκύπτει ότι:

$$(b-1)^2 d_c^2 - 2a(b+1)d_c + a^2 = 0$$

Οπότε, για  $b \neq 1$ , έχουμε ότι:

$$d_{c1,2} = \frac{a(b+1) \pm 2a\sqrt{b}}{(b-1)^2} \quad (106)$$

Εάν προκύψει λύση  $d_c \leq 1$ , τότε αυτή απορρίπτεται διότι, όπως είδαμε, πρέπει να ισχύει  $d > 1$ .

Η «κρίσιμη» τιμή του  $k$ , δηλ. η  $k_c$ , προκύπτει από τη σχέση (102), θέτοντας  $k_c = k_m$  και  $d_c = d$ , οπότε

$$k_c^2 = -\frac{a - (b-1)d_c}{2d_c} \quad (107)$$

Επειδή, όμως, στο σημείο μεταβολής της ευστάθειας ισχύει και η (105), θα έχουμε τελικά

$$k_c^2 = \sqrt{\frac{a}{d_c}} \quad (108)$$

Το σχήμα (24) δείχνει πώς μεταβάλλεται το  $h(k^2)$  σε σχέση με το  $k^2$ , για  $d < d_c$ ,  $d = d_c$ ,  $d > d_c$ .

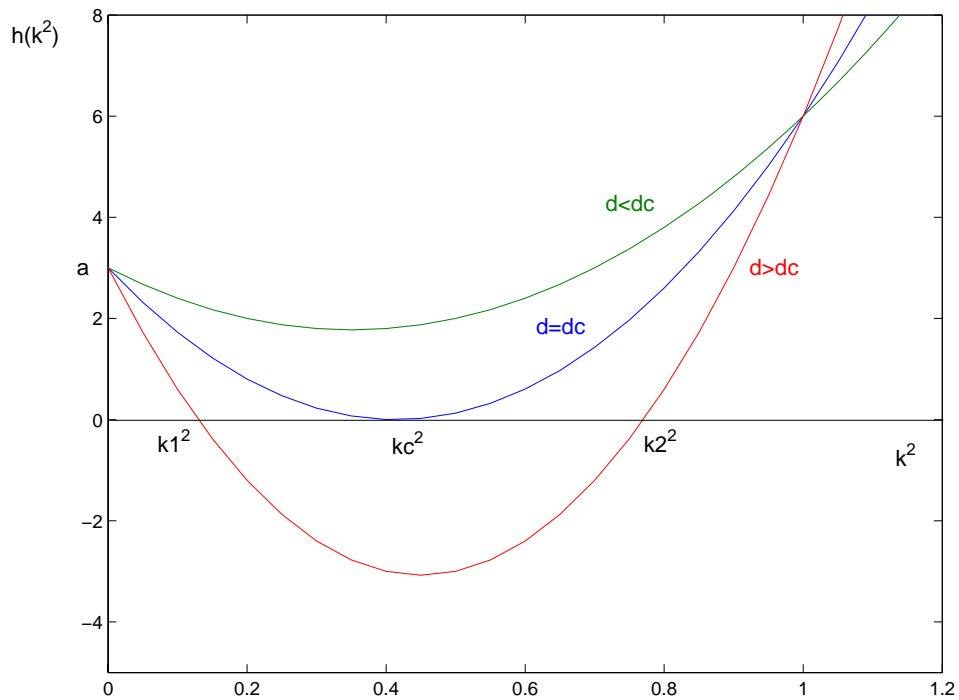
Όταν  $h(k^2) < 0$ , η σχέση (97) έχει θετική λύση για το ίδιο εύρος ιδιοτιμών για τις οποίες  $h(k^2) < 0$ . Έτσι, για  $d > d_c$ , έχουμε αστάθεια όταν

$$k_1^2 < k^2 < k_2^2$$

Δηλαδή,

$$\begin{aligned} L = k_1^2 &= \frac{-(a - (b-1)d) - \sqrt{(a - (b-1)d)^2 - 4ad}}{2d} < k^2 \\ &< \frac{-(a - (b-1)d) + \sqrt{(a - (b-1)d)^2 - 4ad}}{2d} = k_2^2 = M \end{aligned} \quad (109)$$

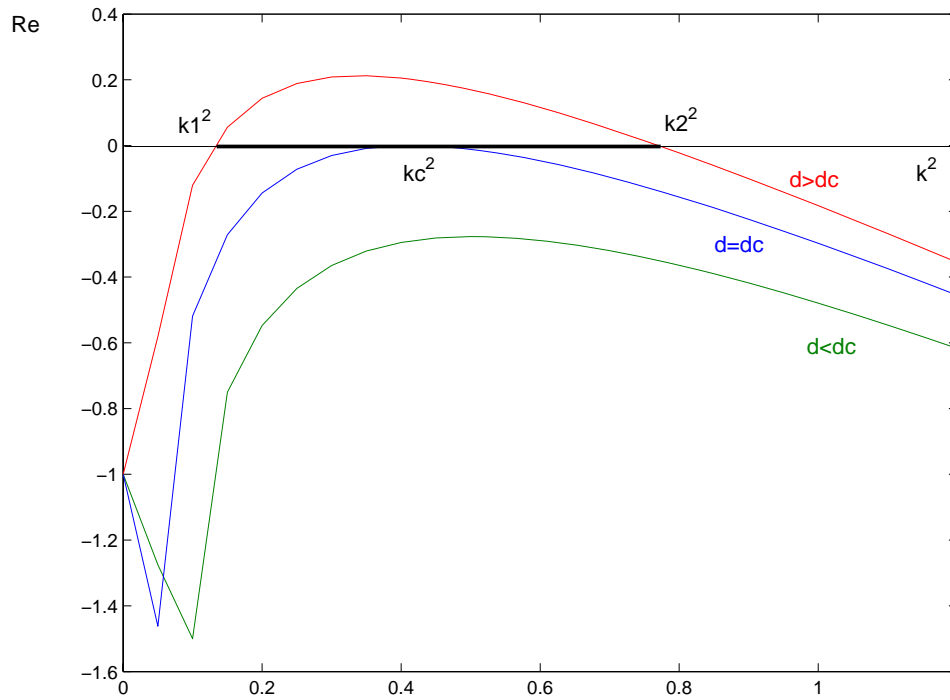
όπου  $k_1^2, k_2^2$  οι λύσεις της (97) όταν  $h(k^2) < 0$ .



Σχήμα 24: Γραφική απεικόνιση, ως προς  $k^2$ , της συνάρτησης  $h(k^2)$ , που δίνεται από τον τύπο  $h(k^2) = dk^4 + (a - (b - 1)d)k^2 + a$ , με  $b < a + 1$ , για  $d < d_c$ ,  $d = d_c$ ,  $d > d_c$ . (Στη συγκεκριμένη περίπτωση,  $a = 3$ ,  $b = 2$ ,  $d_c = 9 + 6\sqrt{2}$  (όπως προκύπτει από τη σχέση (106)),  $d = 10 < d_c$ ,  $d = 30 > d_c$ ).

Στο σχήμα (25) απεικονίζεται μια τυπική ιδιοτιμή  $\lambda(k^2)$ , σε σχέση με το  $k^2$ , για  $d < d_c$ ,  $d = d_c$ ,  $d > d_c$ . Η έκφραση  $\lambda = \lambda(k^2)$  στη βιβλιογραφία συναντάται, συνήθως, με την ονομασία *σχέση διασποράς (dispersion relation)*.

Οι γραφικές παραστάσεις, τόσο του σχήματος (25) όσο και του (24), έχουν κατασκευαστεί με το πρόγραμμα Matlab, για τις εξής τιμές των παραμέτρων:  $a = 3$ ,  $b = 2$ ,  $d_c = 9 + 6\sqrt{2}$  (όπως προκύπτει από τη σχέση (106) ),  $d = 10 < d_c$ ,  $d = 30 > d_c$ .



Σχήμα 25: Γραφική απεικόνιση, ως προς  $k^2$ , της μεγαλύτερης από τις ιδιοτιμές  $\lambda(k^2)$  που προκύπτουν από τη λύση της εξίσωσης (97), με  $b < a + 1$ , για  $d < d_c$ ,  $d = d_c$ ,  $d > d_c$ . (Στη συγκεκριμένη περίπτωση,  $a = 3$ ,  $b = 2$ ,  $d_c = 9 + 6\sqrt{2}$  (όπως προκύπτει από τη σχέση (106)),  $d = 10 < d_c$ ,  $d = 30 > d_c$ ).

## Α΄ ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ

Στο Παράρτημα αυτό δίνονται οι ορισμοί μερικών βασικών εννοιών της θεωρίας των Δυναμικών Συστημάτων στο χώρο  $\mathbb{R}^2$ , στις οποίες γίνεται συχνή αναφορά στην παρούσα εργασία. Δίνεται, επίσης, η διατύπωση (χωρίς απόδειξη) του θεωρήματος γραμμικοποίησης, του θεωρήματος ύπαρξης και μοναδικότητας, καθώς και του θεωρήματος πεπλεγμένης συνάρτησης που χρησιμοποιείται στην απόδειξη του θεωρήματος Hopf.

### ΟΡΙΣΜΟΣ ΣΗΜΕΙΟΥ ΙΣΟΡΡΟΠΙΑΣ :

Έστω  $f : U \subset \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$ , όπου  $U$  είναι μια ανοικτή περιοχή του  $\mathbb{R}^2$  κι έστω το αυτόνομο σύστημα  $\dot{v} = f(v)$ .

Ένα σημείο  $v_s \in \mathbb{R}^2$  λέγεται *σημείο ισορροπίας* ή *στάσιμο σημείο* του συστήματος  $\dot{v} = f(v)$ , αν  $f(v_s) = 0$ .

### ΟΡΙΣΜΟΣ ΠΕΡΙΟΔΙΚΗΣ ΛΥΣΗΣ :

Η λύση  $\varphi(t, x_0)$  του συστήματος  $\dot{v} = f(v)$  λέγεται *περιοδική λύση* με περίοδο  $T > 0$ , αν  $\varphi(t + T, x_0) = \varphi(t, x_0)$ , για κάθε  $t \in \mathbb{R}$ .

### ΟΡΙΣΜΟΣ ΕΥΣΤΑΘΟΥΣ, ΑΣΥΜΠΤΩΤΙΚΑ ΕΥΣΤΑΘΟΥΣ ΚΑΙ ΑΣΤΑΘΟΥΣ ΣΗΜΕΙΟΥ ΙΣΟΡΡΟΠΙΑΣ :

Το σημείο ισορροπίας  $v_s$  ενός αυτόνομου συστήματος

$$\dot{v} = f(v)$$

στο επίπεδο, λέγεται *ευσταθές* αν, για κάθε  $\epsilon > 0$ , υπάρχει  $\delta > 0$ , το οποίο εξαρτάται μόνο από το  $\epsilon$ , τέτοιο ώστε για κάθε  $v_0$  για το οποίο ισχύει  $\|v_s - v_0\| < \delta$  να έχουμε  $\|\varphi(t, v_0) - v_s\| < \epsilon$ , για κάθε  $t \geq 0$ .

Το σημείο ισορροπίας  $v_s$  λέγεται *ασυμπτωτικά ευσταθές* εάν είναι ευσταθές και επιπλέον, αν υπάρχει  $\delta > 0$  τέτοιο ώστε για κάθε  $v_0$  που ικανοποιεί τη σχέση  $\|v_s - v_0\| < \delta$ , να ισχύει  $\lim_{t \rightarrow \infty} \|\varphi(t, v_0) - v_s\| = 0$ .

Τέλος, το σημείο ισορροπίας  $v_s$  λέγεται *ασταθές* αν υπάρχει κάποιο  $\eta > 0$ , τέτοιο ώστε για κάθε  $\delta > 0$  να υπάρχει  $v_0$  με  $\|v_s - v_0\| < \delta$  και  $t_{v_0} > 0$  έτσι ώστε  $\|\varphi(t, v_0) - v_s\| > \eta$ , για κάθε  $t \geq t_{v_0}$ .



### ΟΡΙΣΜΟΣ ΓΡΑΜΜΙΚΟΠΟΙΗΣΗΣ ΣΥΣΤΗΜΑΤΟΣ ΣΤΟ ΣΗΜΕΙΟ ΙΣΟΡΡΟΠΙΑΣ :

Εάν  $\mathbf{v}_s$  είναι ένα σημείο ισορροπίας του συστήματος

$$\dot{\mathbf{v}} = \mathbf{f}(\mathbf{v}),$$

τότε το γραμμικό σύστημα

$$\dot{\mathbf{v}} = D\mathbf{f}(\mathbf{v}_s)\mathbf{v},$$

όπου  $D\mathbf{f}(\mathbf{v}_s)$  ο ιακωβιανός πίνακας της  $\mathbf{f}$  στο σημείο  $\mathbf{v}_s$ , ονομάζεται *γραμμικοποίηση* του συστήματος  $\dot{\mathbf{v}} = \mathbf{f}(\mathbf{v})$ , στο σημείο ισορροπίας  $\mathbf{v}_s$ .

### ΘΕΩΡΗΜΑ ΓΡΑΜΜΙΚΟΠΟΙΗΣΗΣ :

Έστω  $\mathbf{f}$  μια  $C^1$ -συνάρτηση. Αν όλες οι ιδιοτιμές του πίνακα  $D\mathbf{f}(\mathbf{v}_s)$  έχουν αρνητικά πραγματικά μέρη, τότε το σημείο ισορροπίας,  $\mathbf{v}_s$ , της  $\dot{\mathbf{v}} = \mathbf{f}(\mathbf{v})$  είναι ασυμπτωτικά ευσταθές. Αν μία από τις ιδιοτιμές του  $D\mathbf{f}(\mathbf{v}_s)$  έχει θετικό πραγματικό μέρος, τότε το σημείο ισορροπίας είναι ασταθές.

### ΘΕΩΡΗΜΑ ΥΠΑΡΞΗΣ ΚΑΙ ΜΟΝΑΔΙΚΟΤΗΤΑΣ :

Έστω  $\mathbf{f} : U \rightarrow \mathbb{R}^n$ , όπου  $U$  είναι μια ανοικτή περιοχή στο  $\mathbb{R} \times \mathbb{R}^n$ . Θεωρούμε το πρόβλημα αρχικών τιμών:

$$\begin{aligned}\dot{\mathbf{v}} &= \mathbf{f}(t, \mathbf{v}), \\ \mathbf{v}(t_0) &= \mathbf{v}_0\end{aligned}$$

1. Εάν  $\mathbf{f} \in C^0(U, \mathbb{R}^n)$ , τότε υπάρχει λύση του προβλήματος αρχικών τιμών, η οποία ορίζεται για κάθε  $t$ , σε ένα μέγιστο διάστημα ύπαρξης  $(\alpha_{t_0, \mathbf{v}_0}, \beta_{t_0, \mathbf{v}_0})$ .
2. Για κάθε κλειστό και φραγμένο σύνολο  $W \subset U$ , υπάρχει  $\delta > 0$ , το οποίο εξαρτάται από το  $W$ , έτσι ώστε  $(t, \varphi(t, t_0, \mathbf{v}_0)) \notin W$  για  $t \notin (\alpha_{t_0, \mathbf{v}_0} + \delta, \beta_{t_0, \mathbf{v}_0} - \delta)$ .
3. Εάν  $\mathbf{f} \in C^k(U, \mathbb{R}^n)$ , με  $k \geq 1$ , τότε υπάρχει μοναδική λύση  $\varphi(t, t_0, \mathbf{v}_0)$  του προβλήματος αρχικών τιμών, που ορίζεται σε ένα μέγιστο διάστημα ύπαρξης. Επιπλέον, η  $\varphi$  είναι  $C^k$  στο  $(t, t_0, \mathbf{v}_0)$ .

Θεωρούμε, τώρα, το πρόβλημα αρχικών τιμών με παράμετρο :

$$\begin{aligned}\dot{\mathbf{v}} &= \mathbf{f}(\lambda, t, \mathbf{v}), \\ \mathbf{v}(t_0) &= \mathbf{v}_0,\end{aligned}$$

όπου  $\lambda$  είναι παράμετρος που ανήκει στο ανοιχτό υποσύνολο  $\Lambda$  του  $\mathbb{R}^m$ .  
Εάν  $\mathbf{f} \in C^k(\Lambda \times U, \mathbb{R}^n)$ , με  $k \geq 1$ , τότε η λύση  $\varphi(t, t_0, \mathbf{v}_0)$  του προβλήματος αρχικών τιμών με παράμετρο είναι  $C^k$  συνάρτηση στο  $(\lambda, t, t_0, \mathbf{v}_0)$ .

### **ΘΕΩΡΗΜΑ ΠΕΠΛΕΓΜΕΝΗΣ ΣΥΝΑΡΤΗΣΗΣ :**

Έστω  $U$  μια ανοικτή περιοχή στο  $\mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^n$  κι έστω  $\mathbf{f} : U \rightarrow \mathbb{R}^n$  μια  $C^k$  συνάρτηση με  $k \geq 1$ . Θεωρούμε ένα σημείο  $(\bar{\mathbf{x}}, \bar{\mathbf{y}}) \in U$ , όπου  $\bar{\mathbf{x}} \in \mathbb{R}^m$  και  $\bar{\mathbf{y}} \in \mathbb{R}^n$ , με  $\mathbf{f}(\bar{\mathbf{x}}, \bar{\mathbf{y}}) = \mathbf{c}$ . Εάν ο  $n \times n$  πίνακας μερικών παραγώγων  $D_{\mathbf{y}}\mathbf{f}(\bar{\mathbf{x}}, \bar{\mathbf{y}})$  είναι αντιστρέψιμος, τότε υπάρχουν ανοιχτά σύνολα  $V_m \subset \mathbb{R}^m$  και  $V_n \subset \mathbb{R}^n$  με  $(\bar{\mathbf{x}}, \bar{\mathbf{y}}) \in V_m \times V_n \subset U$  και μια μοναδική  $C^k$  συνάρτηση  $\psi : V_m \rightarrow V_n$ , έτσι ώστε  $\mathbf{f}(\mathbf{x}, \psi(\mathbf{x})) = \mathbf{c}$  για όλα τα  $\mathbf{x} \in V_m$ . Επιπλέον,  $\mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \neq \mathbf{c}$  εάν  $(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \in V_m \times V_n$  και  $\mathbf{y} \neq \psi(\mathbf{x})$ . Η παράγωγος της συνάρτησης  $\psi$  δίνεται από τον τύπο :

$$D\psi(\mathbf{x}) = -[D_{\mathbf{y}}\mathbf{f}(\mathbf{x}, \psi(\mathbf{x}))]^{-1}D_{\mathbf{x}}\mathbf{f}(\mathbf{x}, \psi(\mathbf{x})).$$

## **Β' ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ**

1. Field, R. J., *An introduction to nonlinear chemical dynamics: Oscillations, waves, patterns, and chaos (by I. R. Epstein and J. A. Pojman)*, *J. Chem. Educ.*, 2000, 77 450.
2. Finlyason, A. B. and Merkin, J. H., *Creation of spatial structure by an electric field applied to an ionic cubic autocatalator system*, *Journal of Engineering Mathematics*, 2000, 38, 279-296.
3. Gray, P., Scott, S. K. and Merking, J. H., *The Brusselator model of oscillatory reactions*, *J. Chem. Soc. Faraday Trans.,1* , 1988b, 84, 993-1012.
4. Hale, J. K. and Kocak, H., *Dynamics and Bifurcations*, Springer-Verlag, 1991.
5. Hassard, B. D. and Wan, Y. H., *Bifurcation formulae derived from center manifold Theory*, *J. Math. Anal. Appl.*, 63, 297-312.
6. Καραχάλιος, Ν., *Σημειώσεις του μαθήματος «Δυναμικά Συστήματα»*, Σάμος, 2001.
7. Levenspiel, O., *Chemical Reaction Engineering*, limited 2nd edition, Wiley Eastern.
8. Moore, W. J., *Physical Chemistry*, 5th edition, Longman.
9. Murray, J. D., *Mathematical Biology*, 2nd, corrected edition, Springer-Verlag, 1993.
10. Prigogine, I. and Lefever, R., *Symmetry breaking instabilities in dissipative systems. II*, *J. Chem. Phys.*, 1968, 48, 1695-700.
11. Prigogine, I., *Το τέλος της Βεβαιότητας*, 2η έκδοση επαυξημένη, εκδόσεις ΚΑΤΟΠΤΡΟ, 2003.
12. Ρουμπάνη-Καλαντζοπούλου, Φ., *Χημική Κινητική και Κατάλυση*, Ε.Μ.Π., Αθήνα, 1991.
13. Scott, S. K., *Chemical Chaos*, Clarendon Press, Oxford, 1993.