MSC 80A30

АНАЛИЗ КРИТИЧЕСКОЙ ПОВЕРХНОСТИ В ПРОСТРАНСТВЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ СТОХАСТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ БИНАРНОЙ РЕАКЦИИ С ФАЗОВЫМ ПЕРЕХОДОМ

Фам Минь Туан, Ю.П. Вирченко

Белгородский государственный университет,
ул. Победы, 85, Белгород, 308015, Россия, e-mail: virch@bsu.edu.ru

Аннотация. Изучается трехпараметрическая стохастическая модель бинарной циклической химической реакции на основе уравнений химической кинетики со стохастическим возмущением. В общем случае, при всех допустимых значениях параметров, исследуется критическая поверхность, которая разделяет в пространстве параметров системы качественно различные стационарные динамические режимы: с унимодальной и бимодальной плотностями распределения концентраций химических реагентов.

Ключевые слова: критическая поверхность, уравнения химической кинетики, стохастическая модель, уравнение Фоккера-Планка, плотность распределения, фазовый переход, бифуркация.

1. Введение. В работе [1] нами анализировалась стохастическая модель химической кинетики, введенная ранее в работах [2, 3]. Эта модель описывает протекание автокаталитических химических реакций определенного типа между двумя реагентами с учетом тепловых флуктуаций одного из параметров. В рамках этой модели эволюция во времени относительной доли $\tilde{x}_t$ концентрации одного реагента описывается посредством стохастического дифференциального уравнения

$$d\tilde{x}_t = [\alpha - \tilde{x}_t + \lambda\tilde{x}_t(1-\tilde{x}_t)]\, dt + \sigma\tilde{x}_t(1-\tilde{x}_t)d\tilde{w}_t\,, \qquad (1)$$

со свободными параметрами модели $\lambda \in \mathbb{R}$, $\sigma > 0$, $\alpha \in [0,1]$ и с мультипликативным белым шумом $d\tilde{w}_t/dt$. Стохастический дифференциал $d\tilde{w}_t$ в этом уравнении понимается по Стратоновичу. Таким образом, эволюция системы представляет собой неоднородный диффузионный марковский случайный процесс в пространстве относительных концентраций. Известно [1-3], что этот процесс обладает финальной плотностью распределения $p(x)$ для случайной величины $\tilde{x}_t$, которая, в зависимости от указанных выше допустимых значений трех параметров $\langle\lambda, \sigma^2, \alpha\rangle$ модели является либо унимодальной, либо бимодальной. Это положение соответствует двум качественно различным стационарным динамическим режимам поведения системы. Переход между этими двумя режимами при изменении (достаточно медленным) параметров системы представляет собой, с физической точки зрения, фазовый переход между двумя «фазами»: унимодальной и бимодальной. Значения наборов параметров $\langle\lambda, \sigma^2, \alpha\rangle$, соответствующие каждой из фаз, образуют области в пространстве параметров системы, которые разделены между собой некоторой поверхностью, называемой «критической». Таким образом, для описания фазового перехода, необходима полная информация о геометрии этой поверхности. Полному исследованию этой геометрии посвящена настоящая работа. Ранее нами в работах [4, 5] были исследованы сечения критической поверхности при исключительных значениях параметра $\alpha = 0, 1/2, 1$.

2. Уравнение критической поверхности. Финальная плотность распределения случайных значений x_t, сосредоточенная на отрезке $[0,1]$, определяется явной формулой (см. [1])

$$p(x) = \frac{A}{x(1-x)}\left(\frac{x}{1-x}\right)^{\beta} \exp\left\{\frac{2}{\sigma^2}\left(\frac{\alpha-1}{1-x} - \frac{\alpha}{x}\right)\right\}, \tag{2}$$

$$A = \frac{1}{2}\exp\left\{\frac{2}{\sigma^2} + \beta\ln\sqrt{\frac{1-\alpha}{\alpha}}\right\}\left[K_{-\beta}\left(-\frac{4}{\sigma^2}\sqrt{\alpha(1-\alpha)}\right)\right]^{-1},$$

где $K_{-\beta}(\cdot)$ – модифицированная функция Бесселя второго рода с показателем $(-\beta)$ и $\beta = 2(2\alpha+\lambda-1)/\sigma^2$. Переход от унимодальной плотности к бимодальной происходит при пересечении *критической поверхности* Σ в пространстве параметров $\langle\lambda, \sigma^2, \alpha\rangle$. Уравнение этой поверхности получается из условия одновременного обращения в нуль производных $p'(x) = p''(x) = 0$, что приводит к необходимости существования двойного корня полинома

$$Q(x) \equiv \alpha - x + \lambda x(1-x) - \frac{\sigma^2}{2}x(1-x)(1-2x)\,, \qquad x \in [0,1]\,. \tag{3}$$

то есть должно иметь место одновременное обращение в нуль $Q(x)$ и производной $Q'(x) = 0$. Для эквивалентности же условий $p'(x) = p''(x) = 0$ и $Q(x) = Q'(x) = 0$ нужно дополнительно потребовать, чтобы двойной корень x_* полинома $Q(x)$ находился на интервале $[0,1]$. В работе [4] показано, что точками бифуркации плотности распределения не могут быть концы интервала ее определения.

Таким образом, нам нужно изучить ситуацию с существованием двойного корня у полинома $Q(x)$. Для возможности существования такого двойного корня нужно потребовать, чтобы остаток от его деления на $Q'(x)$ должен обратиться в нуль. Применяя алгоритм Евклида для полиномов $Q(x)$ и $Q'(x)$ находится явный вид этого уравнения для параметров модели (см. [1]), которому удовлетворяют точки критической поверхности в пространстве параметров модели

$$P(\lambda,\sigma^2,\varepsilon) \equiv \lambda^4 + \lambda^2\Big(1-5\sigma^2-\sigma^4/2\Big) - \lambda(9\sigma^4+18\sigma^2-4\lambda^2)\varepsilon - 4\sigma^2\Big(1-\sigma^2/4\Big)^3 - 27\sigma^4\varepsilon^2 = 0\,, \tag{4}$$

где $\varepsilon = \alpha - 1/2$. Однако, не все многообразие решений этого уравнения относится к критической поверхности. Точки критической поверхности выделены дополнительным условием, которое состоит в том, что ее точки определяют те значения параметров, при которых решения x_* полинома (3) находятся внутри интервала $[0,1]$. Это условие формулируется в виде следующего неравенства (см. [5])

$$G_+(\lambda,\sigma^2,\varepsilon)G_-(\lambda,\sigma^2,\varepsilon) \ge 0\,,$$

где функции $G_{\pm}(\lambda, \sigma^2, \varepsilon)$ даются формулами

$$G_{\pm}(\lambda, \sigma^2, \varepsilon) \equiv (2\sigma^2 + 1 \pm 2\lambda)^2 - (\sigma^2 + 2(4 \mp 9\varepsilon))^2 + 4(4 \mp 9\varepsilon)^2 - 1\,. \tag{5}$$

Следовательно, допустимая область для расположения точек критической поверхности представляет собой пересечение областей, границами которых являются соответственно гиперболы $G_{\pm}(\lambda, \sigma^2, \varepsilon) = 0$. Случай, когда одновременно $G_{\pm}(\lambda, \sigma^2, \varepsilon) < 0$ является нефизическим, так как при этом $\sigma^2 < 0$.

На это обстоятельство не было обращено должного внимания в предшествующих работах [2, 3]. По этой причине, критическая поверхность Σ является, вообще говоря, только одной связной частью поверхности, определяемой уравнением (4).

3. Аналитическое описание фазовой диаграммы. Будем исследовать критическую поверхность Σ посредством ее сечений. Такой подход оправдан тем, что практическое изучение фазовых переходов в физике осуществляется на основе *фазовых диаграмм*, которые как раз и представляют собой сечения критической поверхности в пространстве параметров системы плоскостями, кривые пересечения которых представляют зависимости между двумя физическими параметрами, изменяющимися в секущей плоскости при фиксированных значениях всех остальных. В нашем случае мы будем фиксировать значение параметра $\varepsilon \in [-1/2,\, 1/2]$. Известно (см. [1]), что поверхность Σ расположена вне эллиптического цилиндра с образующей вдоль оси ε, который определяется уравнением

$$\Delta \equiv 4\lambda^2 + 3\sigma^4 - 12\sigma^2 = 0\,, \tag{6}$$

имея с этой цилиндрической поверхности общие точки. Эти точки являются точками соприкосновения двух поверхностей.

Координаты $\langle \lambda_*(\varepsilon), \sigma_*^2(\varepsilon)\rangle$ точек соприкосновения (здесь явно указано, что λ_* и σ_*^2 зависят от зафиксированного значения ε) находятся из совместного решения уравнений $P(\lambda_*, \sigma_*^2, \varepsilon) = 0$ и $4\lambda_*^2 + 3\sigma_*^4 - 12\sigma_*^2 = 0$. В результате, получаем (см. [1])

$$\lambda_* = -\frac{9\varepsilon\sigma_*^2}{1 + 2\sigma_*^2}\,, \tag{7}$$

Возводя в квадрат и выразив λ_*^2 и подставляя это выражение в уравнение цилиндра, получим уравнение, определяющее зависимость σ_*^2 от ε,

$$(4 - \sigma_*^2)(1 + 2\sigma_*^2)^2 = 108\varepsilon^2\sigma_*^2\,, \quad \sigma^2 \neq 0\,. \tag{8}$$

Это уравнение имеет одно вещественное решение $\sigma_*^2(\varepsilon) \geq 1$, что устанавливается следующим образом.

Из формы уравнения (8) легко установить, что оно эквивалентно уравнению

$$4(\sigma_*^2 - 1)^3 = 27\sigma_*^2(1 - 4\varepsilon^2)\,. \tag{9}$$

В правой части этого уравнения стоит линейная функция, а в левой – выпуклая при $\sigma_*^2 > 1$. (При $\sigma_*^2 < 1$ уравнение не имеет решений, так как $|\varepsilon| < 1/2$.) Тогда имеется не более двух вещественных решений. С другой стороны, правая часть – линейная функция больше левой при $\sigma_*^2 = 1$, то есть находится выше выпуклой кривой. Следовательно, имеется только одно пересечение этой прямой с выпуклой левой частью. Это пересечение, как видно из (8) должно происходить при $\sigma_*^2 < 4$. Заметим также, что равенство $\sigma_*^2 = 1$ возможно только при $|\varepsilon| = 1/2$.

Зафиксируем значение параметра ε. Для анализа характера поведения поверхности Σ вблизи точек соприкосновения, вычислим, сначала, частные производные первого порядка

$$-\frac{\partial P}{\partial \sigma^2} = (5+\sigma^2)\lambda^2 + 18(\sigma^2+1)\varepsilon\lambda + 54\varepsilon^2\sigma^2 + 4(1-\sigma^2)\Big(1-\frac{\sigma^2}{4}\Big)^2,$$

$$\frac{\partial P}{\partial \lambda} = 4\lambda^3 + 12\varepsilon\lambda^2 + \lambda(2-10\sigma^2-\sigma^4) - 9\varepsilon\sigma^2(\sigma^2+2)\,.$$

Непосредственной подстановкой значений $\langle \lambda_*(\varepsilon), \sigma_*^2(\varepsilon)\rangle$ из формулы (7) в вычисленные выражения для частных производных находим, что

$$\left(\frac{\partial P}{\partial \lambda}\right)_{\lambda_*,\sigma_*^2} = 0\,, \quad \left(\frac{\partial P}{\partial \sigma^2}\right)_{\lambda_*,\sigma_*^2} = 0\,.$$

Вычислим теперь производные второго порядка

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2 P}{\partial \sigma^2 \partial \lambda} &= -2\lambda(5+\sigma^2) - 18\varepsilon(\sigma^2+1)\,,\\
\frac{\partial^2 P}{\partial \lambda^2} &= 12\lambda^2 + 2(1-5\sigma^2-\sigma^4/2) + 24\varepsilon\lambda\,,\\
\frac{\partial^2 P}{\partial (\sigma^2)^2} &= -\lambda^2 - 18\varepsilon\lambda - 54\varepsilon^2 + 3(2-\sigma^2)\Big(1-\frac{\sigma^2}{4}\Big)\,.
\end{aligned} \tag{10}$$

После исключения ε, используя уравнение (7), находим

$$\left(\frac{\partial^2 P}{\partial \sigma^2 \partial \lambda}\right)_{\lambda_*,\sigma_*^2} = \frac{2\lambda_*}{\sigma_*^2}(\sigma_*^2-1)^2\,, \quad \left(\frac{\partial^2 P}{\partial \lambda^2}\right)_{\lambda_*,\sigma_*^2} = -6(\sigma_*^2-1)^2\,, \quad \left(\frac{\partial^2 P}{\partial (\sigma^2)^2}\right)_{\lambda_*,\sigma_*^2} = -\frac{2\lambda_*^2}{3\sigma_*^4}(\sigma_*^2-1)^2.$$

В уравнении $P(\lambda, \sigma^2, \varepsilon) = 0$ произведем замену

$$\lambda = \lambda_* + \rho\cos\varphi\,, \quad \sigma^2 = \sigma_*^2 + \rho\sin\varphi\,,$$

Разложим, далее, полипом $P(\lambda, \sigma^2, \varepsilon)$ в ряд Тейлора около точки $\langle \lambda_*(\varepsilon), \sigma_*^2(\varepsilon), \varepsilon\rangle$ по степеням $(\lambda - \lambda_*)$ и $(\sigma^2 - \sigma_*^2)$ с указанной подстановкой. В силу того, что полином $P(\lambda, \sigma^2, \varepsilon)$ имеет четвертую степень, то это разложение обрывается на четвертой степени по ρ. Используя явные выражения для частных производных по λ и σ^2 первого и второго порядка в точке $\langle \lambda_*, \sigma_*^2\rangle$ и выражения для производных третьего порядка в этой же точке

$$\left(\frac{\partial^3 P}{\partial (\sigma^2)^3}\right)_{\lambda_*,\sigma_*^2} = \frac{3}{2}(\sigma_*^2-3)\,, \quad \left(\frac{\partial^3 P}{\partial\lambda \partial (\sigma^2)^2}\right)_{\lambda_*,\sigma_*^2} = \frac{2\lambda_*}{\sigma_*^2}(1+\sigma_*^2)\,,$$

$$\left(\frac{\partial^3 P}{\partial\lambda^2\partial\sigma^2}\right)_{\lambda_*,\sigma_*^2} = -2(5+\sigma_*^2)\,, \quad \left(\frac{\partial^3 P}{\partial\lambda^3}\right)_{\lambda_*,\sigma_*^2} = \frac{8\lambda_*}{3\sigma_*^2}(7\sigma_*^2-1)\,,$$

а также, учитывая, что согласно (10) производные четвертого порядка являются постоянными, т.е. не зависят от точки на эллипсе, находим

$$P(\lambda,\sigma^2,\varepsilon) = -3\rho^2(\sigma_*^2-1)^2\sin^2\varphi S_2(z) + \frac{1}{6}\rho^3\sin^3\varphi S_3(z) + \frac{1}{16}\rho^4\sin^4\varphi S_4(z)\,, \tag{11}$$

где $z = \mathrm{ctg}\varphi$, $z_* = \mathrm{ctg}\varphi_* = \lambda_*/3\sigma_*^2$,

$$S_2(z) = (z-z_*)^2 \geq 0\,, \quad S_3(z) = 8z_*(7\sigma_*^2-1)z^3 - 6(\sigma_*^2+5)z^2 + 18z_*(1+\sigma_*^2)z + \frac{3}{2}(\sigma_*^2-3)\,,$$

$$S_4(z) = (4z^2-1)^2 \geq 0\,.$$

Мы здесь ввели переменную z, заметив, что $\mathrm{ctg}\varphi \neq \infty$, $\varphi \neq 0, \pi$. Это связано с тем, что, в противном случае, уравнение $P(\lambda,\sigma^2,\varepsilon) = 0$ при фиксированном ε должно было иметь решение $\lambda \neq \lambda_*$ при $\sigma^2 = \sigma_*^2$. А это невозможно, так как при фиксированном значении ε и σ_*^2, обязательно, из (6) и (8) следует выражение (7) для значения λ.

Заметим, что число z_*, которое является функцией от ε, принадлежит интервалу $[-1/2, 1/2]$. Это следует из того, что точка $\langle\lambda_*, \sigma_*^2\rangle$ лежит на эллипсе (6), и поэтому $z_*^2 = \lambda_*^2/9\sigma_*^4 = (4-\sigma_*^2)/12\sigma_*^2 \leq 1/4$ при $\sigma_*^2 \geq 1$.

Из (11) находим аналитическое выражение, определяющее фазовою диаграмму («критическую кривую», по которой происходит пересечение критической поверхности с плоскостью с фиксированным значением ε). В уравнении $P(\lambda,\sigma^2,\varepsilon) = 0$, исключив из рассмотрения двукратный корень $\rho^2 = 0$, который является точкой соприкосновения фазовой диаграммы с эллипсом (6), то есть поделив уравнение на $\rho^2\sin^2\varphi$, получаем квадратное уравнение относительно ρ,

$$\frac{1}{16}\rho^2\sin^2\varphi S_4(z) + \frac{1}{6}\rho\sin\varphi S_3(z) - 3(\sigma_*^2-1)^2 S_2(z) = 0\,. \tag{12}$$

Дискриминант этого уравнения $\sin^2\varphi\big(S_3^2(z) + 27(\sigma_*^2-1)^2 S_4(z)S_2(z)\big)/36$ неотрицателен. Поэтому уравнение всегда имеет два решения, то есть две однозначных функции

$$\rho_\pm(\varphi) = \frac{4}{3\sin\varphi S_4(z)}\Big(-S_3(z) \pm \sqrt{S_3^2(z) + 27(\sigma_*^2-1)^2 S_4(z)S_2(z)}\,\Big)\,. \tag{13}$$

Это означает, что кривая четвертого порядка, определяемая уравнением $P = 0$, распадается на две кривых, определяемых решениями $\rho_\pm(\varphi)$ при тех значениях φ, при которых они принимают неотрицательные значения. Ввиду неотрицательности дискриминанта функция $\rho_+(\varphi)$ неотрицательна при $\sin\varphi \geq 0$. Тогда $\rho_+(\varphi)$ определяет кривую при $\varphi \in [0, \pi]$. Она может обращаться в нуль только при $S_2(z) = 0$, либо при $S_4(z) = 0$. Наоборот, кривая $\rho_-(\varphi)$ может обращаться в нуль только в исключительном случае, когда $S_3(z) = 0$ и либо $S_2(z) = 0$, либо $S_4(z) = 0$. Эти случаи реализуются только при $\varepsilon = \pm 1/2$. Таким образом, при $|\varepsilon| \neq 1/2$ функция $\rho_-(\varphi)$ неотрицательна и она определяет кривую только при $\sin\varphi < 0$, то есть $\varphi \in (-\pi, 0)$.

Выявленные нами две кривых, при фиксированном значении ε, могут пересекаться только при равенстве нулю дискриминанта, то есть только при $|\varepsilon| = 1/2$, так как они расположены в разных полуплоскостях. При $|\varepsilon| = 1/2$ их пресечение возможно только при $\varphi = 0, \pi$. В дальнейшем, этот случай мы не рассматриваем, так как он уже был детально исследован в более ранней публикации [5].

Заметим, далее, что справедлива

Лемма 1. *Связные кривые $\rho_\pm(\varphi)$ не пересекают гипербол $G_\pm = 0$, ограничивающих разрешенную для расположения точек бифуркации область значений пар $\langle \lambda, \sigma^2 \rangle$, за исключением, может быть, точек, лежащих на эллипсе $\Delta = 0$.*

□ Совместные решения – пары $\langle \lambda(\varepsilon), \sigma^2(\varepsilon) \rangle$ двух уравнений $P = 0$ и $G_\pm = 0$ при фиксированном ε приводят к тому, что полином $Q(x)$ может иметь такой двойной корень, который равен 0 при знаке $(+)$ и 1 при знаке $(-)$. Непосредственная подстановка этих значений в $Q(x)$ (см. (3)) приводит к тому, что это возможно только при $\varepsilon = \mp 1/2$. ■

Заметим, что приведенные рассуждения неверны при $\Delta = 0$, либо при $\sigma^2 = 0$, что вытекает непосредственно из метода получения условия $G_+(\lambda, \sigma^2, \varepsilon) G_-(\lambda, \sigma^2, \varepsilon) \geq 0$ для существования двойного корня $Q(x) = 0$ внутри интервала $[0, 1]$ (см. [4]). Поэтому эти случаи должны быть рассмотрены отдельно. При $\sigma^2 = 0$ имеем $Q(x) = \varepsilon + 1/2 - x + \lambda x(1-x)$ и $P = \lambda^2(\lambda^2 - 4\varepsilon\lambda + 1)$. Тогда, если $|\varepsilon| \neq 1/2$, то совместное решение уравнений $P = 0$ и $Q(x) = 0$ дает $\lambda = 0$ и $x = \varepsilon + 1/2$. Следовательно, при $|\varepsilon| \neq 1/2$ имеет место $x \neq 0, 1$. Таким образом, и в этом случае пересечение кривой, которая является проекцией критической поверхности с гиперболами $G_\pm = 0$ невозможно.

Наконец, если $\sigma^2 \neq 0$, но $\Delta = 0$, что происходит в точках соприкосновения кривых $\rho_\pm(\varphi)$ с эллипсом $\Delta = 0$, то такое пересечение возможно только в точках $\langle \lambda_*(\varepsilon), \sigma_*^2(\varepsilon) \rangle$.

Лемма 2. *При $|\varepsilon| \neq 1/2$ кривая $\rho_+(\varphi)$ не пересекает гипербол $G_\pm = 0$, которые ограничивают область значений пар $\langle \lambda, \sigma^2 \rangle$, допустимых для точек бифуркации, а кривая $\rho_-(\varphi)$ пересекает обе гиперболы $G_\pm = 0$ одновременно в точке $\langle 0, 0 \rangle$, лежащей на эллипсе $\Delta = 0$, но при этом она остается в области запрещенной для нахождения точек бифуркации.*

□ Кривые $\rho_\pm(\varphi)$ могут пересекаться эллипсом $\Delta = 0$ только в случае $\rho_\pm(\varphi) = 0$, либо в точке луча с $\sigma^2 = 0$. В последнем случае, как было указано выше, обязательно $\lambda = 0$.

Если $\rho_-(\varphi) = 0$, то, как было показано выше, это возможно только при $\varepsilon = \pm 1/2$. Так как мы считаем, что $\varepsilon \neq \pm 1/2$, то этот случай мы исключаем из анализа. Рассмотрим возможность пересечения гипербол ветвью $\rho_+(\varphi) = 0$. С этой целью перейдем в равенствах $G_\pm = 0$ к полярным координатам с началом в точке $\langle \lambda_*(\varepsilon), \sigma_*^2(\varepsilon) \rangle$, в которой функция $\rho_+(\varphi)$ обращается в нуль. Тогда

$$G_\pm(\lambda_* + \rho\cos\varphi, \sigma_*^2 + \rho\sin\varphi, \varepsilon) =$$

$$= \rho^2\Big[4(1 \pm \sin 2\varphi) - \sin^2\varphi\Big] + 2\rho\Big[\pm 2\cos\varphi\Big(2(\sigma_*^2 \pm \lambda_*) + 1\Big) + \sin\varphi(3\sigma_*^2 \pm 4\lambda_* - 6 \pm 18\varepsilon)\Big],$$

где учтено, что $G_\pm(\lambda_*, \sigma_*^2, \varepsilon) = 0$.

Плоскость $\langle \lambda, \sigma^2 \rangle$ разделена па две части кривой $\rho_+(\varphi) = 0$. Тогда, точкам пересечения кривой $\rho_+(\varphi) = 0$ и одной из кривых $G_\pm = 0$ соответствуют такие решения уравнения $G_\pm = 0$, которые, в окрестности точки $\rho = 0$, при непрерывном изменении угла φ переходят из одной области плоскости в другую. Поэтому тривиальное решение $\rho = 0$ уравнений $G_\pm = 0$, как неопределяющее никакой кривой, нужно исключить. Исследуем решения, которые имеют эти уравнения после деления их па ρ. Эти решения определяют кривые $\rho^{(\pm)}(\varphi)$ при непрерывном изменении φ. Поделим на $\sin\varphi$ уравнения, которые получились после деления па ρ, и обозначим посредством $z_0^{(\pm)}$ предельные значения $\mathrm{ctg}\varphi$, когда φ стремится соответственно к таким значениям $\mathrm{arcctg}\, z_0^{(\pm)}$, при которых $\rho^{(\pm)}(\varphi)$ обращаются в нуль. Величины $z_0^{(\pm)}$ удовлетворяют уравнениям

$$\pm 2z_0^{(\pm)} \Big[2(\sigma_*^2 + \lambda_*) + 1 \Big] + 3(\sigma_*^2 - 2) \pm 4\lambda_* \pm 18\varepsilon = 0\,.$$

Исключим, используя формулу (6), величину λ_*,

$$\pm z_0^{(\pm)} \Big[2(2\sigma_*^2 + 1)^2 \mp 36\varepsilon\sigma_*^2 \Big] + 3(\sigma_*^2 - 2)(2\sigma_*^2 + 1) \pm 18\varepsilon = 0\,.$$

После деления на $(2\sigma_*^2 + 1)$ и учета, что $z_* = -3\varepsilon/(1 + 2\sigma_*^2)$, получим окончательно уравнение, определяющее $z_0^{(\pm)}$ в следующем виде:

$$\pm z_0^{(\pm)} \Big[2(2\sigma_*^2 + 1) \pm 12\sigma_*^2 z_* \Big] + 3(\sigma_*^2 - 2) \mp 6z_* = 0\,. \tag{14}$$

Заметим, что имеет место $(2\sigma_*^2 + 1) \pm 6\sigma_*^2 z_* > 0$, в силу очевидного неравенства

$$z_*^2 = \frac{4 - \sigma_*^2}{12\sigma_*^2} < \left(\frac{2\sigma_*^2 + 1}{6\sigma_*^2} \right)^2,$$

которое сводится к квадратному неравенству $7\sigma_*^4 - 8\sigma_*^2 + 1 > 0$, выполняющемуся всегда при $\sigma_*^2 > 1$.

Покажем, что решение

$$z_0^{(+)} = -\frac{3(\sigma_*^2 - 2) - 6z_*}{2(2\sigma_*^2 + 1) + 12\sigma_*^2 z_*}$$

уравнения (13) удовлетворяет неравенству $z_0^{(+)} < z_*$, умножив его на выражение, стоящее в знаменателе. В результате, получим

$$12\sigma_*^2 z_*^2 + 4z_*(\sigma_*^2 - 1) + 3(\sigma_*^2 - 2) > 0\,.$$

Заменив здесь $z_*^2 = (4 - \sigma_*^2)/12\sigma_*^2$, сводим это неравенство к очевидному

$$(1 + 2z_*)(\sigma_*^2 - 1) > 0 \quad \text{при} \quad \sigma_*^2 > 1\,.$$

Точно также имеет место неравенство $z_0^{(-)} > z_*$, где

$$z_0^{(-)} = \frac{3(\sigma_*^2 - 2) + 6z_*}{2(2\sigma_*^2 + 1) - 12\sigma_*^2 z_*}\,.$$

Оно эквивалентно очевидному неравенству

$$(1-2z_*)(\sigma_*^2-1)>0 \quad \text{при} \quad \sigma_*^2>1\,,$$

так как $z_* \in (-1/2, 1/2)$.

Из доказанных неравенств $z_0^{(+)} < z_* < z_0^{(-)}$ следует, что при достаточно малом изменении z, вдоль кривой $\rho_+(\varphi)$ в окрестности точки с полярными координатами $\langle 0, \varphi_* \rangle$ и вдоль кривых $\rho^{(\pm)}(\varphi)$ в окрестности соответственно точек $\langle 0, \mathrm{arcctg} z_0^{(\pm)} \rangle$, эти неравенства сохраняются. Следовательно, каждая из кривых $\rho^{(\pm)}(\varphi)$ не пересекает кривую $\rho_+(\varphi)$ в точке ее каспа, где происходит их соприкосновение.

Исследуем теперь возможность пересечения гипербол $G_\pm = 0$ с кривой $\rho_-(\varphi)$ в точке $\langle 0, 0 \rangle$, так как обе эти гиперболы проходят через эту точку. Непосредственно из формулы (13) и выражений для $S_2(z)$, $S_3(z)$, $S_4(z)$ проверяется, что кривая $\rho_-(\varphi)$ проходит через нулевую точку, так как значение функции $\rho_-(\varphi)$ равно расстоянию между нулевой точкой и точкой соприкосновения $\langle \lambda_*, \sigma_*^2 \rangle$ кривой $\rho_+(\varphi)$ с эллипсом $\Delta = 0$, в которую помещен центр полярных координат. При этом полярный угол φ_0 нулевой точки определяется как $\mathrm{ctg}\varphi_0 = \lambda_*/\sigma_*^2 = z_0$, то есть имеет место равенство $\rho_-(\varphi_0) = (\lambda_*^2 + \sigma_*^4)^{1/2}$. Таким образом, $\rho_-(\varphi)$ пересекает обе гиперболы $G_\pm = 0$ при указанном значении φ_0. Покажем, что это пересечение таково, что точки кривой $\rho_-(\varphi)$ находятся внутри области, определяемой неравенством $G_+G_- < 0$ при $\varphi \neq \varphi_0$.

В силу утверждения Леммы 1, кривая $\rho_-(\varphi)$ будет обладать указанным свойством во всех точках, если это свойство для нее имеет место в окрестности нулевой точки. Поэтому выполнимость неравенства $G_-G_+ < 0$ достаточно проверить для точек кривой $\rho_-(\varphi)$, находящихся сколь угодно близко к $\langle 0, 0 \rangle$. Для этого воспользуемся тем, что точки кривой $\rho_-(\varphi)$ удовлетворяют уравнению $P(\lambda, \sigma^2, \varepsilon) = 0$ в окрестности нулевой точки, в то время как это не имеет места для точек кривой $\rho_+(\varphi)$. Определим направление касательной кривой $\rho_-(\varphi)$ в точке φ_0, исходя из этого уравнения. Так как

$$\left(\frac{\partial P}{\partial \sigma^2}\right)_{\langle 0,0 \rangle} = -4\,, \quad \left(\frac{\partial P}{\partial \lambda}\right)_{\langle 0,0 \rangle} = 0\,,$$

то отсюда по теореме о неявной функции следует, что $(d\sigma^2/d\lambda)_{\langle 0,0 \rangle} = 0$, то есть касательная к кривой $\rho_-(\varphi)$ в нулевой точке определяется уравнением $\sigma^2 = 0$.

Вычислим, теперь касательные к кривым $G_\pm = 0$ в нулевой точке, рассматривая эти кривые в окрестности этой точки как функции $\sigma_\pm^2(\lambda)$. Исходя из выражений (5) для гипербол $G_\pm = 0$, находим

$$\frac{\partial G_\pm}{\partial \lambda} = 4(2\sigma^2 + 1 \pm 2\lambda)\,, \quad \left(\frac{\partial G_\pm}{\partial \lambda}\right)_{\langle 0,0 \rangle} = 4\,,$$

$$\frac{\partial G_\pm}{\partial \sigma^2} = 6\sigma^2 - 12(1 \mp 3\varepsilon) \pm 8\lambda\,, \quad \left(\frac{\partial G_\pm}{\partial \sigma^2}\right)_{\langle 0,0 \rangle} = -12(1 \mp 3\varepsilon)\,.$$

Следовательно, по теореме о неявной функции,

$$\left(\frac{d\sigma_\pm^2}{d\lambda}\right)_{\langle 0,0 \rangle} = [3(1 \mp 3\varepsilon)]^{-1} \neq 0\,.$$

Тогда для точек касательной $\sigma^2 = 0$ к кривой $\rho_-(\varphi)$ в нулевой точке при подстановке ее координат $\langle\lambda, 0\rangle$ в выражения для $G_\pm$ имеем, $G_\pm(\lambda, 0, \varepsilon) \sim \pm 4\lambda + O(\lambda^2)$ при $\lambda \to 0$. Следовательно, на точках касательной выполняется неравенство $G_+G_- < 0$ при $\lambda \neq 0$. Следовательно, такое же неравенство имеет место для точек кривой $\rho_-(\varphi)$, достаточно близких к нулевой точке. ■

Теорема. *Кривая, которая разделяет области существования бимодальной и унимодальной фаз стохастической динамической системы (1), являющая решением уравнения $P(\lambda, \sigma^2, \varepsilon) = 0$ и подчиняющаяся неравенству $G_+(\lambda, \sigma^2, \varepsilon)G_-(\lambda, \sigma^2, \varepsilon) > 0$, при $|\varepsilon| < 1/2$, параметрически определяется функцией $\rho_+(\varphi)$ при $0 < \varphi < \pi$.*

□ Утверждение теоремы следует непосредственно утверждений лемм 1 и 2 и проведенного выше анализа. ■

4. Исследование фазовой диаграммы.

Лемма 3. *Каждая из кривых $\rho_\pm(\varphi)$ стремится к бесконечности при $z \to \pm 1/2$.*

□ Из явных формул для коэффициентов $S_2(z)$, $S_3(z)$, $S_4(z)$ следует, что функции $\rho_\pm(\varphi)$, определяемые (12), остаются ограниченными при $z \to \pm\infty$. В самом деле, при $z \to \pm\infty$, то есть при $\varphi \to 0, \pi$, выполняются асимптотические формулы $S_4(z) \sim 16z^4$, $S_2(z) \sim z^2$ и $S_3(z) \sim 8z_*(7\sigma_*^2 - 1)z^3$. Так как функции $\rho_\pm(\varphi)$ удовлетворяют уравнению (12), то умножая его на $\sin^2\varphi$ и переходя к пределу $\varphi \to 0$ ($\varphi \to \pi$) получим, что предельные значения $\rho_\pm$ функций $\rho_\pm(\varphi)$ при таком предельном переходе удовлетворяют, соответственно, уравнениям (Предельное значение $\cos\varphi_\infty$ не может обратиться в нуль, так как это противоречит условию $z \to \infty$.)

$$\rho_\pm^2 + \frac{4}{3}z_*(7\sigma_*^2 - 1)\rho_\pm - 3(\sigma_*^2 - 1)^2 = 0 \quad \left(\rho_\pm^2 - \frac{4}{3}z_*(7\sigma_*^2 - 1)\rho_\pm - 3(\sigma_*^2 - 1)^2 = 0\right),$$

то есть эти предельные значения конечны. [2]

Исследуем возможность принимать функциями $\rho_\pm(\varphi)$ сколь угодно большие значения. В этом случае, как следует из приведенного рассуждения, величина z должна оставаться ограниченной, то есть должны оставаться ограниченными значения функций $S_2(z)$, $S_3(z)$, $S_4(z)$, которые являются полиномами. Тогда, как следует из формулы (13), функции $\rho_\pm(\varphi)$ могут стремиться к ∞ только в том, случае, когда $S_4(z) \to 0$, то есть $z \to \pm 1/2$, то есть $\sin\varphi \to \pm 2\sqrt{5}/5$, и, в этих условиях, числитель в этой формуле стремится к ненулевому значению. Вычисление числа $S_3(\pm 1/2)$ на основе выражения (7) для λ_* и $z_* = \lambda_*/3\sigma_*^2$ приводят к формуле $S_3(\pm 1/2) = -12(1 \pm 2\varepsilon) < 0$. Ввиду отрицательности этой величины $\rho_+(\varphi) > 0$. В результате, имеем следующую асимптотическую формулу

$$\rho_+(\varphi) \sim \frac{\sqrt{5}(1 \pm 2\varepsilon)}{(z \mp 1/2)^2} \quad \text{при} \quad z \to \pm\frac{1}{2}.$$

Для функции $\rho_-(\varphi)$ аналогичные рассуждения, ввиду $-S_3(\pm 1/2) > 0$, приводят к выполнимости такой же асимптотической формуле, то есть $\rho_+(\varphi) \sim \rho_-(\varphi)$ при $z \to \pm 1/2$. ■

---

[2] Эти предельные значения определяют расстояния от центра полярной системы координат до точек, в которых кривые $\rho_\pm(\varphi)$ имеют горизонтальные касательные.

Исследуем поведение кривой $\rho_+(\varphi)$ в окрестности точки ее соприкосновения с эллипсом $\Delta = 0$, то есть вблизи точки $\rho = 0$, $z = z_*$ ($\varphi = \varphi_*$) при $\sigma_*^2 \ne 1$ (случай $\sigma_*^2 = 1$ соответствует $|\varepsilon = 1/2|$, что изучено в работе [5]). Покажем, что фазовая диаграмма имеет «касп» в этой точке при $\varepsilon \ne \pm 1/2$. С этой целью, найдем асимптотическое выражение кривой $\rho_+(\varphi)$ в окрестности точки $\langle \lambda_*, \sigma_*^2 \rangle$ при малых значениях $(z - z_*)$.

Заметим, сначала, что в точке $z = z_*$ выполняется неравенство

$$S_3(z_*) = \frac{8}{9\sigma_*^4}(\sigma_*^2 - 1)^3 > 0\,.$$

Оно получается подстановкой выражения z_* в $S_3(z_*)$ с учетом связи λ_* и σ_* посредством формулы (7), то есть $z_*^2 = (4 - \sigma_*^2)/12\sigma_*^2$. Тогда, по непрерывности, $S_3(z) > 0$ в окрестности точки соприкосновения при $\rho_+(\varphi) \to 0$ (естественно, если $\sigma_*^2 > 1$).

Рассмотрим, теперь, асимптотическую формулу для квадратного корня, который связан с формулой (13),

$$\sqrt{1 + 27(\sigma_*^2 - 1)^2 \frac{S_4(z) S_2(z)}{S_3^2(z)}} = 1 + \frac{27 S_4(z_*) S_2(z)}{2 S_3^2(z_*)}(\sigma_*^2 - 1)^2 + O((z - z_*)^3)\,,$$

которая выполняется в силу $S_3(z_*) > 0$ и так как $S_2(z) = (z - z_*)^2$. Тогда, на основании (13),

$$\rho_+(\varphi) = 18\frac{(\sigma_*^2 - 1)^2}{\sin\varphi_*}\frac{S_2(z)}{S_3(z_*)} + O((z - z_*)^3)\,.$$

Учитывая, что $\sin\varphi_* = (1 + z_*^2)^{-1/2}$ и явное выражение для $S_3(z_*)$, эта формула преобразуется к виду

$$\rho_+(\varphi) = \frac{3\sigma_*^2}{1 - 4\varepsilon^2}(\sigma_*^2 - 1)^2(1 + z_*^2)^{1/2}(z - z_*)^2 + O((z - z_*)^3)\,. \qquad (14)$$

Из полученной асимптотической формулы следует, что кривая $\rho_+(\varphi)$ имеет «касп», симметрично расположенный относительно оси $\varphi = \varphi_*$. Этот факт устанавливается переходом в локальные декартовы координаты $\langle u, v \rangle$ с центром в точке $\langle \lambda_*, \sigma_*^2 \rangle$ и азимутальной осью, направленной под углом φ_*. В терминах таких координат кривая $\rho_+(\varphi)$, локально, представляется уравнением $u^2 + v^2 = C^2 \mathrm{arctg}^4(v/u)$, $u > 0$, где $\rho = (v^2 + u^2)^{1/2}$, $\varphi - \varphi_* = \mathrm{arctg}(v/u)$. Из этого уравнения следует, что при $u, v \to 0$, с необходимостью, для координат кривой должно выполняться условие $v/u \to 0$. Следовательно, имеет место асимптотическая эквивалентность $u^2 + v^2 \sim C^2(v/u)^4$. В свою очередь, это приводит к тому, что $u^6 \sim C^2 v^4$, то есть $v \sim \pm C^{-1} u^{3/2}$. Такой тип асимптотической зависимости при $u, v \to 0$ указывает на то, что в окрестности нулевой точки (начала координат на эллипсе $\Delta = 0$) кривая $\rho_+(\varphi)$ имеет особенность типа «каспа» с острием в нулевой точке. Таким образом, обнаруженное нами асимптотическое поведение фазовой диаграммы вблизи $\langle \lambda_*, \sigma_*^2 \rangle$ описывает «касп» с острием в этой точке.

Заметим, что полученная асимптотика в окрестности точки соприкосновения фазовой диаграммы с эллипсом совпадает с той, которая была получена в работе [4] в случае $\varepsilon = 0$, с той лишь разницей, что смысл координат должен быть изменен, $u \Rightarrow v$, $v \Rightarrow -u$.

Литература

1. Фам Минь Туан, Вирченко Ю.П. Анализ стохастической модели химической кинетики бинарной автокаталитической реакции // Belgorod State University Scientific Bulletin Mathematics & Physics. – 2013. – 11(154);31. – С.130-146.
2. Arnold L., Horsthemke W., Lefever R. White and coloured external noise and transition phenomena in nonlinear systems // Zs. Phys. – 1978. – B29. – P.367-373.
3. Хорстхемке В., Лефевр Р. Индуцированные шумом переходы: Теория и применение в физике, химии и биологии / Пер. с англ. /М.: Мир, 1987. – 400 с.
4. Фам Минь Туан, Вирченко Ю.П. Анализ фазовой диаграммы в стохастической модели химической кинетики бинарной циклической реакции // Belgorod State University Scientific Bulletin Mathematics & Physics. – 2013. – 26(169);33. – С.57-63.
5. Фам Минь Туан, Вирченко Ю.П. Исследование критической поверхности стохастической модели химической кинетики бинарной автокаталитической реакции. Сильно асимметричный случай // Belgorod State University Scientific. Bulletin Mathematics & Physics. – 2014. – 5(176);34. – С.103-111.

ANALYSIS OF CRITICAL SURFACE IN THERMODYNAMIC PARAMETERS SPACE OF BINARY REACTION STOCHASTIC MODEL WITH PHASE TRANSITION

Pham Minh Tuan, Yu.P. Virchenko

Belgorod State University,
Pobedy St., 85, Belgorod, 308015, Russia, e-mail: virch@bsu.edu.ru,

Abstract. Three-parametric stochastic model of binary cyclic chemical reaction is studied on the basis of chemical kinetics equations with stochastic perturbation. At all allowable values of parameters, the critical surface in thermodynamic parameters space is investigated in general case. The surface divides qualitatively different stationary dynamic regimes in the parameter space of the system. These regimes correspond to unimodal and bimodal distribution densities of chemical reagents concentrations.

Key words: critical surface, chemical kinetics equations, stochastic model, Fokker-Plank's equation, distribution density, phase transition, bifurcation.