

Universitatea "Al. I. Cuza" Iași
Facultatea de Chimie
Colectivul de Chimie Fizică și Teoretică

PROGRAMA ANALITICĂ A CURSULUI

"Dinamică neliniară"

Cod

Master "Dinamică și analiză în sisteme chimice", an II, semestrul 2

2 ore de curs, o oră de laborator și două de seminar pe săptămână

Anul universitar – 2008-2009

1. Obiectivele cursului:

Cursul de "Dinamică neliniară" prezintă studenților elemente de bază ale dinamicii neliniare și aplicații ale acestora, în principal în cazul sistemelor chimice distribuite spațial. Datorită ecuațiilor neliniare de evoluție și distribuției spațiale, este posibilă apariția ordinii spațiale (structuri Turing) sau spațiotemporale în astfel de sisteme. În plus, pot exista procese caracteristice, de tipul fronturilor, pulsurilor sau trenurilor de unde.

Lucrările practice familiarizează studenții cu principalele metode teoretice utilizate în studiul evoluției sistemelor dinamice. Împreună cu cursul de "Termodinamica evoluției și tratarea numerică a semnalului", cu care se completează, acest curs oferă studenților un punct de vedere unitar asupra unui domeniu de cercetare recent, interdisciplinar și relevant în dinamica actuală a dezvoltării științei. Însă, spre deosebire de cursul menționat anterior, luat drept bază a acestui curs, acesta pune accentul pe sistemele distribuite spațial, ce se remarcă prin complexitate însă oferă o descriere mult mai realistă a sistemelor neliniare.

2. Conținutul de bază:

1. Introducere.

La acest capitol se precizează criteriul de bază al disciplinei (liniaritatea sau neliniaritatea sistemelor dinamice) și se oferă exemple uzuale de sisteme neliniare din chimie și fizică.

1.1. Ecuații liniare și neliniare de evoluție. Exemple de neliniarități.

1.2. Explicarea vitezei de reacție în sisteme deschise și în sisteme în care au loc simultan mai multe reacții.

2. Sisteme dinamice - aspecte generale.

La acest capitol se definesc principalele noțiuni ale disciplinei și se precizează uneltele matematice care vor fi utilizate, iar noțiunile definite sînt ilustrate de exemple.

2.1. Spațiul fazelor. Sisteme conservative și disipative. Atractori. Stabilitate.

2.2. Studiul stabilității soluțiilor staționare ale sistemelor de ecuații diferențiale prin metoda modurilor normale.

2.3. Bifurcații.

3. Modele chimice și electrochimice cu comportament neliniar.

Chimia și electrochimia constituie un câmp predilect de aplicare a dinamicii neliniare, întrucît majoritatea ecuațiilor cinetice, care descriu evoluția în timp a sistemelor reactante, sînt neliniare.

3.1. Reacții chimice în domeniul liniar.

Se arată că, în apropierea echilibrului termodinamic, sistemele reactante nu pot prezenta ruperea simetriei.

3.2. Modelul Lotka-Volterra în sisteme extinse spațial.

Acest model celebru ce descrie dinamica speciilor biologice este influențat într-un mod oarecum neașteptat de extinderea spațială a sistemului: starea staționară devine asimptotic stabilă.

3.3. Modelul trimolecular în sisteme cu extindere spațială infinită. Analiza liniară a stabilității.

Spre deosebire de sistemul punctiform corespunzător, cel extins spațial poate prezenta procese tipice, cum ar fi ruperea simetriei spațiale sau spațio-temporale.

3.4. Modelul trimolecular în sisteme cu extindere spațială finită.

Se analizează influența unei extinderi spațiale finite asupra sistemului de la paragraful anterior.

3.5. Unde călătoare în sisteme cu condiții periodice la frontieră.

Acest fenomen fascinant, tipic sistemelor neliniare, apare și în cazul sistemelor reactante. Se analizează proprietățile undeii călătoare în cazul unui model reactant relativ simplu (Brusselatorul), într-un sistem cu condiții periodice la frontieră.

3.6. Sisteme electrochimice cu comportament neliniar. Bistabilitate. Oscilații de tip ciclu limită în sisteme descrise de două variabile.

4. Oscilații în sistem izoterm închis.

În cazul acestui sistem reactant simplu, apariția ordinii temporale este cauzată de existența autocatalizei: una dintre speciile chimice contribuie la propria sa generare.

5. Oscilații termocinetice în sistem închis.

În acest caz, rolul autocatalizei, de la sistemul anterior, este luat de feedback-ul termic. Descrierea precisă a acestor sisteme este extrem de importantă pentru că multe sisteme catalitice eterogene prezintă o dinamică tipic neliniară.

6. Autocataliză în sisteme deschise cu agitare perfectă: CSTR izoterm.

În ciuda simplității acestui sistem, în cazul unui proces autocatalitic trimolecular, el poate prezenta multistabilitate – comportament tipic neliniar.

7. Reacții autocatalitice în reactoare cu difuzie.

În majoritatea sistemelor reactante reale, reacția chimică este însoțită de procesul de difuzie. Împreună, aceste două fenomene pot contribui la o dinamică neliniară a sistemului.

8. Formarea structurilor Turing în sisteme chimice.

Structurile Turing, numite și structuri spațiale, deși prezise teoretic în anii 50, au fost descoperite experimental abia recent (în anii 90), într-o serie de experimente remarcabile.

9. Unde călătoare: fronturi, pulsuri și trenuri de unde.

Anumite sisteme chimice neliniare prezintă unde călătoare, care constau în propagarea frontului de reacție în mediul reacțional. Se analizează condițiile de apariție a acestui fenomen, în cazul unui model reacțional simplu.

3. Sistemul de evaluare a studentului: examen scris.

4. Discipline care trebuie parcurse în prealabil: sînt recomandate "Analiza matematică" și "Fizică generală".

5. Bibliografie curs:

1. A. Bîrzu, G. Bourceanu, L. Onel, *Dinamică neliniară*, MATRIX ROM, 2003.
2. G. Nicolis, *Introduction to nonlinear science*, Cambridge University Press, 1995.
3. S. Strogatz, *Nonlinear dynamics and chaos*, Addison Wesley, 1994.
4. H. G. Schuster, W. Just, *Deterministic Chaos*, Wiley, 2005.
5. P. Gray, S. K. Scott, *Chemical oscillations and instabilities*, Clarendon Press, 1990.

6. Tematica lucrărilor de laborator și a seminarilor:

L1,2. Metode de studiu și caracterizare a dinamicii sistemelor neliniare.

L3,4. Elemente de analiză numerică, aplicate în studiul sistemelor dinamice: integrarea sistemelor de ecuații diferențiale ordinare.

S1,2. Metoda modurilor normale pentru sisteme dinamice punctiforme: aplicații.

S3,4. Metoda modurilor normale pentru sisteme dinamice distribuite spațial.

S5,6. Bifurcații.

S7,8. Metode perturbative aplicate în studiul sistemelor dinamice.

S9,10. Seminarii recapitulative.

7. Bibliografie laborator și seminar:

1. G. Bourceanu, A. Bîrzu, *Termodinamica evoluției și dinamică neliniară*, MATRIX ROM, 2003.

2. H. Korsch, H. Jodl, *Chaos - a program collection for the PC*, Springer, 1994.

3. H. Kantz, T. Schreiber, *Nonlinear time series analysis*, Cambridge University Press, 1997.

4. S. Lynch, *Dynamical Systems with Applications using MATLAB*, Birkhäuser, Boston, 2004.

25.09.2008

Titular de curs

Conf.dr. Adrian Bîrzu