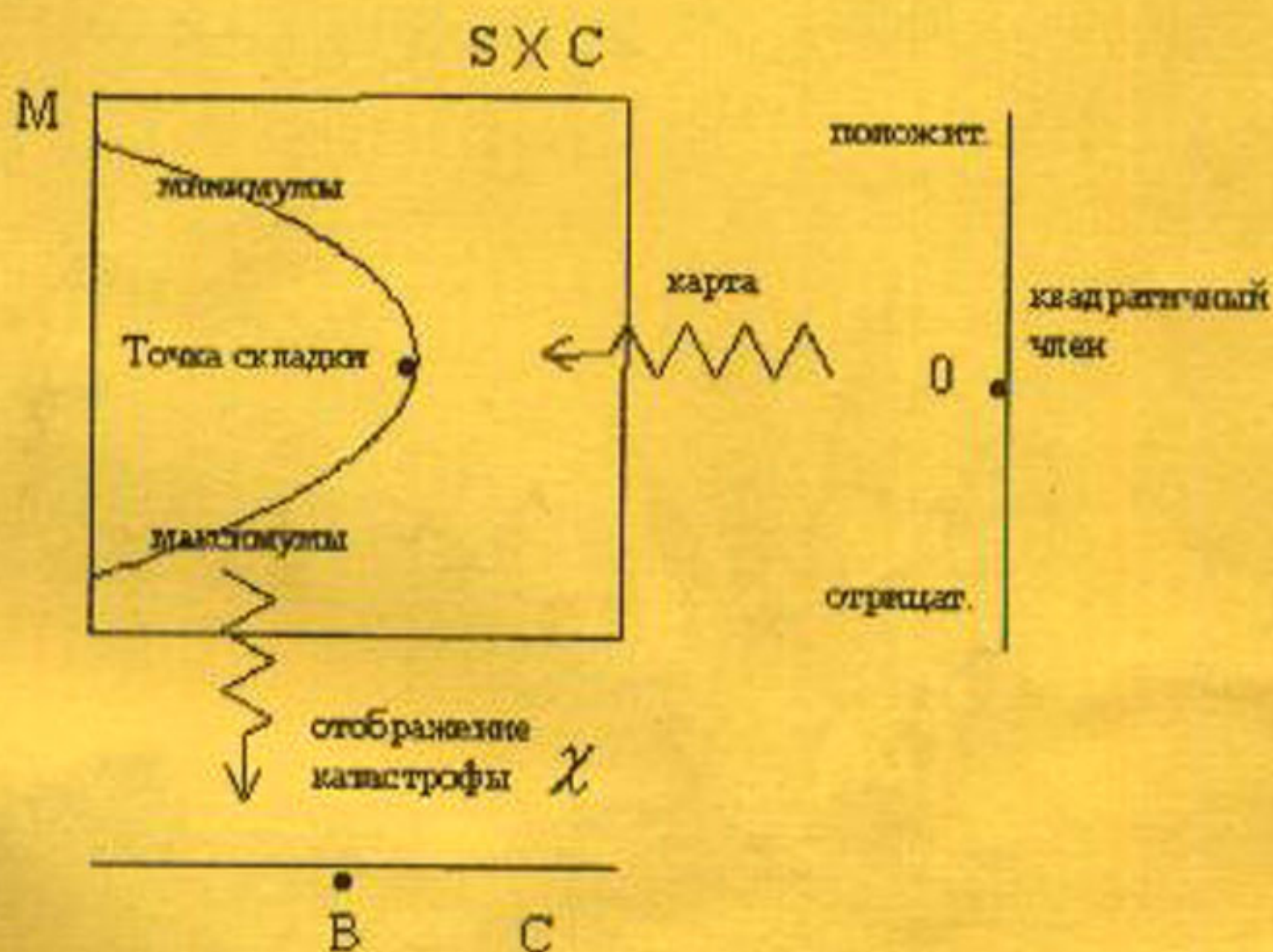


Ф.К. Шмидт

Математические основы теории катастроф и её приложение в физической химии



Иркутск - 2003

Министерство образования Российской Федерации
Государственное образовательное учреждение высшего
профессионального образования
Иркутский государственный университет

Ф.К. Шмидт

Математические основы теории катастроф и её приложение в физической химии

Учебное пособие

Допущено Советом по химии УМО по классическому университетскому образованию в качестве учебного пособия для студентов, обучающихся по специальности 011000 – Химия и по направлению 515000 – Химия

Иркутск – 2003

Печатается по решению научно-методического совета Иркутского государственного университета

УДК 517.5. 517.51. 541.1. 544.333

Рецензент – доктор химических наук, профессор Ткач В.С.

Шмидт Ф.К. Математические основы теории катастроф и её приложение в физической химии: Учеб. пособие. – Иркутск: Иркутский ун-т, 2003. – 153 с.

В учебном пособии изложены математические основы теории катастроф: многомерная геометрия и анализ, теория особенностей дифференциальных отображений, теория катастроф, теория конечной определённости и деформации. Подробно изложены геометрии катастроф складки, сборки и ласточкина хвоста. Рассмотрено приложение теории катастроф в термодинамике и химической кинетике.

Учебное пособие предназначено для студентов химических и других естественных факультетов, а также для аспирантов, преподавателей и научных сотрудников, работающих в области физической химии, термодинамики, химической кинетики и катализе. Учебное пособие может быть рекомендовано научным сотрудникам, использующим в своей работе новые подходы в исследовании динамических систем.

Назв. 30. Илл. 83.

© Ф.К. Шмидт, 2003

© Иркутский государственный университет

Теория катастроф – математический инструментарий. Как и всякий другой инструментарий, его можно употреблять и неправильно. Он является мощным средством, способным пролить свет на решение самых разнообразных проблем, но требует осторожности и умелого обращения.

Т. Постон, И. Стюарт

Введение. Предмет теории катастроф.

Каждый исследователь в области естественных и технических наук, инженер, врач еще обучаясь в вузе, либо в своей практической деятельности сталкивается с постепенными и (или) внезапными изменениями между зависимыми величинами. Например, движение планет вокруг Солнца происходит плавно и регулярно. Примером внезапного, скачкообразного изменения являются закипание воды, землетрясения, взрывы, разрушения агрегатов в механических системах, заболевание человека и т.д. Математически природные и искусственные процессы и явления описываются непрерывно и (или) дискретно. Важно отметить, что внезапные изменения обычно происходят при плавном, непрерывном (гладком) изменении каких-то параметров, характеризующих процесс, состояние системы или окружающей среды. Раздел математики, в котором анализируются функции описывающие скачкообразные, разрывные и качественно изменяющиеся зависимости между величинами, характеризующими систему или процесс, протекающий в системе, получил название теории катастроф. Название этого математического направления «катастрофы» было предложено французским математиком Рене Томом, разработавшим основные методы исследования таких «катастрофических» функций [1,2]. Для описания динамических систем используется набор функций, которые определяются уравнениями движения. Вид этих уравнений, а также значения конкретных параметров, характеризующих систему определяют изменение функций во времени. Например, поведение автономной динамической системы задается системой дифференциальных уравнений,

$$\frac{dX}{dt} = F(x, \alpha) \quad (0.1),$$

x - вектор переменных, α - вектор параметров.

При варьировании параметров α , происходят не только количественные, но и качественные изменения в поведении системы. Это утверждение демонстрируется простейшим примером поведения системы в одномерном фазовом пространстве

$$\frac{dX}{dt} = \sqrt{x^2 + \alpha} \quad (0.2)$$

Если $\alpha > 0$, то траектория системы проходит через каждую точку фазового пространства. Однако, при $\alpha < 0$ в области $|x| < \sqrt{-\alpha}$ не может

быть ни одной траектории. Более того, при $\alpha > 0$ система никогда не достигнет равновесного состояния, тогда как при $\alpha < 0$ могут реализоваться два состояния равновесия: $x_{1,2} = \pm\sqrt{-\alpha}$. Из приведенного примера следует, что даже при плавном изменении параметров может произойти резкое, качественное изменение поведения системы. В математике и в естественных науках такие изменения свойств и поведения системы называются бифуркацией. Бифуркация – это математическое понятие, отражающее приобретение динамической системой нового качества при изменении ее параметров. Слово «бифуркация» происходит от латинского *furca* – вилка и означает «раздвоение». Значения параметров при которых происходит бифуркация называются бифуркационными значениями. В приведенном примере $\alpha = 0$ соответствует бифуркационному значению параметра α . Очевидно, бифуркационные значения параметров будут определяться при анализе правых частей уравнений (0.1), когда

$$F(x, \alpha) = 0 \quad (0.3)$$

Анализ и классификация действительных корней уравнений (0.3) является предметом математической теории катастроф.

В понимании обывателя слово «катастрофа» означает какое-то резкое изменение ситуации, бедствие. Например, падение самолета, наводнение, пожар, землетрясение и т.п. В математическом смысле теория катастроф и ее применения в естественных и технических науках разумеется не несет такого оттенка бедствия. В предлагаемой вниманию читателей – естественников и в первую очередь физико-химиков, изложены основы элементарной теории катастроф и ее применения к системам, в которых вследствие изменения внешних или управляющих параметров изменяется какая-либо потенциальная функция, при этом некоторые локальные минимумы исчезают внезапно и скачкообразно, что собственно и дало основание назвать это направление теорией катастроф.

Основополагающие идеи теории катастроф сформулированы в работах Хасслера Уитни по каноническим формам особенностей гладких отображений и в работах А. Пуанкаре, А. Ляпунова, А.А. Андропова и его школы по теории устойчивости и бифуркаций динамических систем. Отсюда в литературе можно найти диаметрально противоположные мнения, что теория катастроф является частью теории особенностей и, наоборот, теория особенностей включает теорию катастроф. Как отмечает в своей книге академик РАН В.И. Арнольд, внесший большой вклад в развитие математики, в том числе и того направления о котором здесь идет речь, такой подход скорее следует отнести к схоластическим спорам и он относит к «катастрофистам» тех, кто сам заявляет, что его работа относится к теории катастроф, предоставляя тем самым свободный выбор между терминами «особенности», «бифуркации» и «катастрофы» самим