

一混沌模型系综模拟研究

屈 军

(芜湖师范专科学校物理系, 芜湖 241008)

摘 要: 用随机模拟方法研究了化学混沌模型的介观动力学。对该混沌模型的系综模拟发现, 在这种不稳定运动中存在强烈的内部涨落, 然而由于混沌运动整体上的稳定性, 使得系综中的代表点被限制在混沌吸引子上, 并且单个代表点形成的随机轨道很好地保持了确定性混沌吸引子的基本特征。

关键词: 混沌; 随机模拟; 主方程

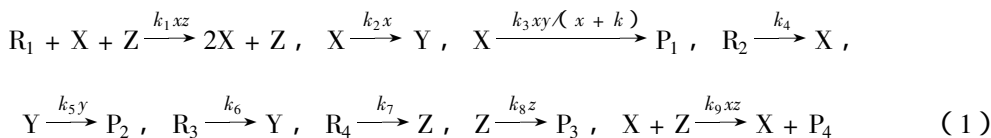
中图分类号: O59 文献标识码: A

1 前 言

确定性动力系统中的低维混沌在过去 20 多年中已有了较充分的研究, 人们对混沌这种一般性运动的基本规律也有了深入的认识。在混沌动力学系统中, 存在一类由唯象宏观方程描述的混沌运动, 如电学、流体力学、以及化学中的混沌等。从统计物理的观点看, 这些唯象动力学方程描述的宏观混沌运动有其分子运动基础, 即它们来源于体系大量分子之间的无规则运动。因此, 离开简单的宏观描述, 从更为基本的介观观点或微观观点来考察由这些唯象动力学方程描述的宏观混沌运动, 特别是始终存在于实际系统中的内部涨落行为, 是很有意义的^[1]。众所周知, 混沌是一种全局稳定而局部不稳定的运动, 其最大李氏指数大于零, 对外界的扰动具有敏感性。这种不稳定的运动的内部涨落行为已经引起了一些研究者的兴趣^[2-4]。本文报道一化学混沌模型中的内部涨落行为。我们采用介观层次上的主方程描述, 用系综模拟的方法研究了化学反应的马尔科夫过程, 获得了关于反应主方程的直接消息, 并将结果同宏观方程进行了比较。

2 模型与方法

本文考察的化学混沌模型由以下基元反应过程构成^[5]



其中, 第三步反应为物质 Y 对 X 催化的 Michaelis - Menten 生化反应, 物质 R_i ($i = 1, 2, 3, 4$) 和 P_i ($i = 1, 2, 3, 4$) 的浓度保持恒定, 以使体系远离平衡态, k_i ($i = 1, 2, \dots, 9$) 为包含了浓度恒定物质 R_i 的反应速率常数。物质 X、Y、Z 的反应速率方程为:

$$\begin{aligned}
 \dot{x} &= k_1xz - k_2x - k_3xy/(x + K) + k_4 \\
 \dot{y} &= k_2x - k_5y + k_6 \\
 \dot{z} &= k_7 - k_9xz - k_8z
 \end{aligned}
 \tag{2}$$

上述方程支持非平衡定态、极限环和混沌。

由化学反应的随机理论,在充分搅拌和热平衡条件下,上述反应可以很好地用马尔科夫过程来描述,这样整个反应动力学由主方程完全确定。由于反应网络(1)的复杂性,其主方程无法解析地求解。为了考察该模型在混沌区的内部涨落,我们采用数值模拟的方法,直接模拟反应网络(1)形成的马尔科夫过程。该方法与主方程所描述的动力学是完全等价的^[6]。为了得到反应在主方程所包含的关于涨落的直接信息,我们采用系综模拟,即同时模拟一群代表点的运动。这样,由系综的运动可以直接得到平均值以及涨落性质。

3 结果与讨论

在方程的稳定不动点以及极限环参数区,模拟结果表明,确定性宏观方程的结果与模拟得到的系综平均值十分相符,并且围绕平均值的涨落很小。图 1 所示为在方程(2)的极限环条件下的模拟结果。图 1a 所示为系综代表点各不同时刻在浓度空间中分布的时间序列。这些代表点在相空间中基本保持不分散地沿着确定性周期极限环运动,这表明此时系统的内部涨落比较小,系综模拟平均值与速率方程结果一致(如图 1b 所示)。

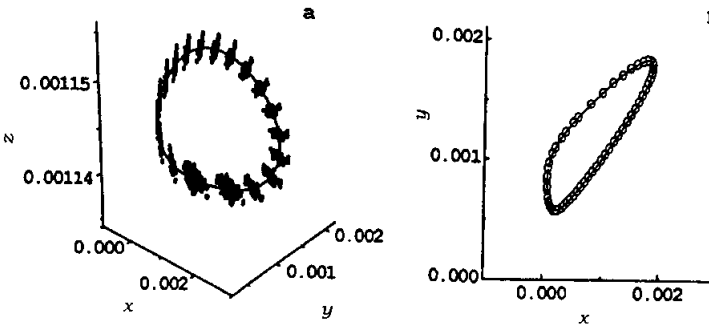


图 1 极限环条件下的模拟结果

- a. 系综代表点的时间序列在相空间中围绕确定性极限环的分布,
- b. 系综平均值(圆点)与确定方程式结果(实线)的比较。

$k_1 = 1000, k_2 = 0.4, k_3 = 1.0, k_4 = 2.996 \times 10^{-4}, k_5 = 0.5,$
 $k_6 = 0.0002, k_7 = 1.0 \times 10^{-5}, k_8 = 0.0068, k_9 = 2, K = 0.0001.$

Fig.1 Ensemble simulation of a limit cycle

- a. A series of phase space distributions of points in the ensemble curve is the limit cycle determined by eq.(1),
- b. The agreement between the deterministic limit cycle and the simulation path formed by ensemble mean values of concentrations.

图 2 所示为在方程(2)的混沌区模拟得到的三个不同时刻系综代表点在相空间中的分布情况。与极限环的情形不同,这些代表点随着时间的推移会发散开来,并最后遍布在整个混沌吸引子上。图 2 最左边图中的背景轨道即为方程(2)的奇怪吸引子。这个结果表明,在宏观方

程的混沌区,系统内部存有强烈的内部涨落,并且系综为一极其延展的分布,系综的平均值及

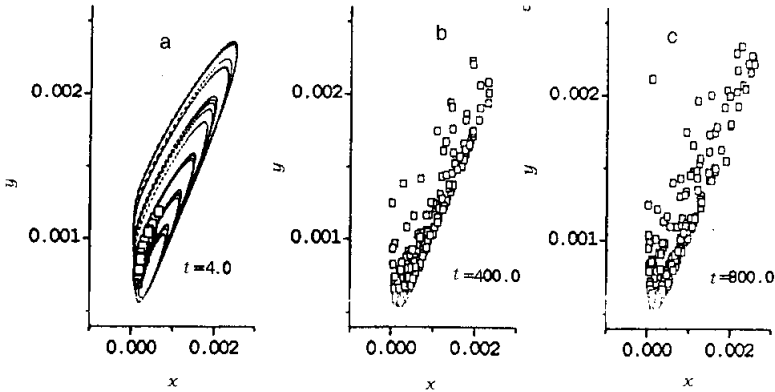


图 2 混沌条件下系综模拟代表点在三个不同时刻在相空间中的分布情形
起始时密集在一起的代表团点随时间的演化逐渐离散开来,左图中的轨
线为混沌吸引子的一段。反应条件除 $k_4 = 2.7124 \times 10^{-4}$ 外其余同图 1。

Fig.2 Ensemble simulation in the chaotic regime of eq.(1)

a, b and c depict the population distributions of ensemble at different times, showing dispersion behavior, the background trajectory in (a) is a fraction of the deterministic chaotic attractor. Simulation parameters are the same as those in Fig. 1, except $k_4 = 2.7124 \times 10^{-4}$.

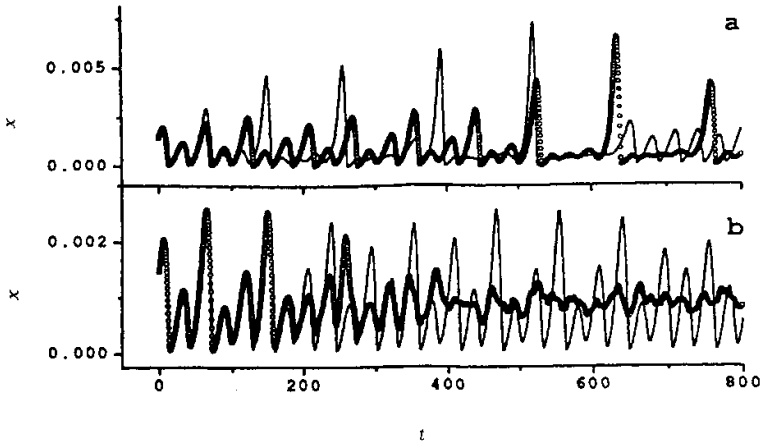


图 3 混沌条件下模拟结果

a. 系综中两条模拟轨道的快速分离, b. 系综平均值
(圆点)同速率方程结果(b)的比较。反应常数同图 2。

Fig.3 a. Time evolution of variable x of two sample simulation runs showing fast separation
b. The solid curve is obtained from eq.(1), the dots are values of ensemble averaged concentration for variables x , parameters are the same as in Fig.2

最可几值不能用来描述整个系统而失去意义。图 3a 所示为两相邻模拟轨道随时间的快速分

离,此时,确定性唯象方程的宏观变量也不再与系综平均值对应(图 3b)。在系综代表点中,我们还考察了单个代表点的运动。随着时间的演化,单个代表点会在相空间中形成一条随机“轨道”,即马尔科夫过程的一次模拟实现。通过对比长时间的随机轨道与确定性混沌轨道发现,随机轨道与确定性混沌吸引子具有很好的一致性,如图 4 所示。它们的相空间分布密度,以及相空间结构特征上都具有很好的一致性。其他研究者对 Williamowski - Rossler 模型^[3]以及化学 Lorenz 模型^[7]的模拟研究中也发现了同样的结果。

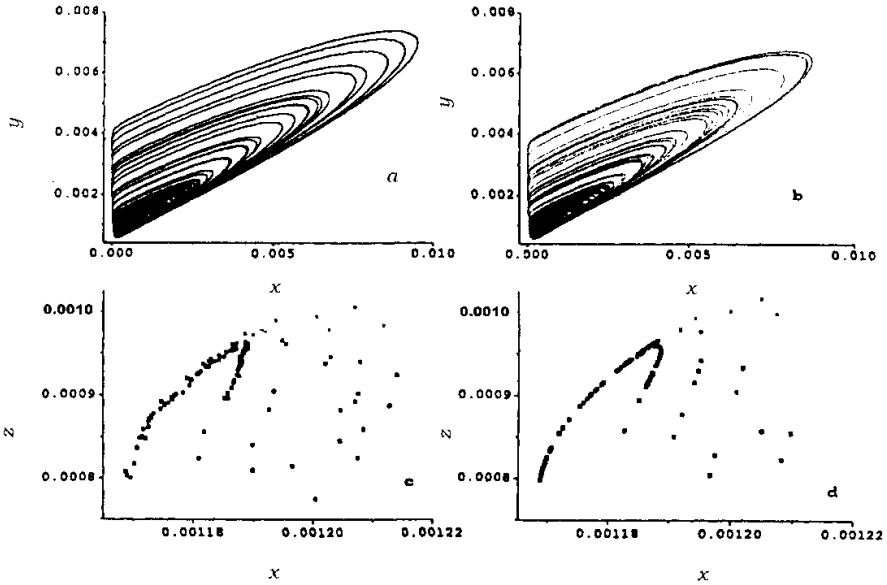


图 4 单条模拟轨道(a)同确定性方程混沌吸引子(b)的比较

c、d:用平面 $y = 1.0 \times 10^{-3}$ 截图 a、b 得到的彭加莱截面。

Fig.4 Comparison in phase space of an individual simulation run (a) with the deterministic chaotic attractor (b)

The cross section (c) taken from the flow in (a) and that (d) taken from (b) at plane $y = 1.0 \times 10^{-3}$ also agree well, parameters are the same as in Fig.2

化学混沌这种不稳定运动同其他不稳定性具有类似性质,即都存在强烈的内部涨落,然而又具有其特点。强烈的内部涨落虽然使得系综代表点发散开来,从而导致系综的统计平均值不再能够代表整个系综。另一方面,由于混沌运动整体上的稳定性,系综代表点的运动仍然被限制在混沌吸引子上,并且每个代表点形成的随机轨道保持了确定性混沌轨道的基本特征。以上介观层次上对混沌系统的系综模拟显示了宏观混沌的确定性图像与其对应的介观图像具有对应性。数值确定的宏观混沌轨道依赖于具体的数值算法以及截断误差等不定因素,在一定意义上具有一定的“随机性”。这种确定性的“随机性”与马尔科夫过程的单次实现得到的“轨迹”的随机性形成了有趣的对应。

致谢:本文在写作过程中,得到北京大学物理系王宏利老师的大力帮助,在此谨表谢意。

参 考 文 献

[1] Keizer J, Tilden J. *J. Phys. Chem.*, 1989, **93**:2811

- [2] Xu X G , Kapral R. *Phys. Rev. Lett.* , 1993 , **70** : 1940
- [3] Geysmans P , Baras F. *J. Chem. Phys.* , 1996 , **105** : 1402
- [4] Wang H , Xin H. *J. Chem. Phys.* , 1997 , **107** : 6681
- [5] Hudson J L , Rossler O E , Killery H. *Chem. Eng. Commun.* , 1986 , **46** : 1599
- [6] Gillespie D T. *J. Phys. Chem.* , 1977 , **81** : 2340
- [7] Wang H , Li Q. *J. Phys. Chem. A* , 2000 , **104** : 472

Ensemble Simulation Study of a Chaos Model

Qu Jun

(*Department of Physics , Wuhu Normal College , Wuhu 241008*)

Abstract The mesoscopic dynamics of a chemical chaos model was studied by stochastic simulations. Ensemble simulations of the model showed that there are intensive intrinsic fluctuations in the unstable motion. However, due to the globally stable character of deterministic chaos, the ensemble points were limited to distribute overall the chaotic attractor. Furthermore, individual simulation runs keep quantitative character of the deterministic chaos.

Key words Chaos, Main equations, Stochastic simulation