



МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
«Дальневосточный федеральный университет»
(ДВФУ)

ИНСТИТУТ МАТЕМАТИКИ И КОМПЬЮТЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

Департамент математического и компьютерного моделирования

Лабораторная работа №5

по дисциплине
«Математическое и компьютерное моделирование»

Направление подготовки
02.03.01 «Математика и компьютерные науки»

Выполнила студентка
группы Б9122-02.03.01сцт
Винницкая Д.С.

(ФИО)

(подпись)

« 11 » декабря 20 25 г.

г. Владивосток
2025

1 Цель и задачи лабораторной работы

Цель:

Изучить математическую модель автокаталитической химической реакции — Брюсселятор, — исследовать условия возникновения устойчивых колебаний (автоколебаний) и проанализировать переход от устойчивого равновесия к предельному циклу через бифуркацию Андронова–Хопфа.

Задачи:

1. Записать систему дифференциальных уравнений модели Брюсселятора и объяснить смысл фазовых переменных x, y и управляющих параметров A, B .
2. Найти единственную стационарную точку системы и вывести условие её устойчивости.
3. Провести качественный анализ: показать, что при $B > 1 + A^2$ равновесие теряет устойчивость и возникает устойчивый предельный цикл.
4. Сформулировать вычислительный эксперимент: выбрать параметры для двух режимов — устойчивого равновесия и автоколебаний.
5. Реализовать численное решение системы методом Рунге–Кутты (через `solve_ivp`) при различных начальных условиях.
6. Построить графики временной динамики и фазовые портреты, включая сравнение траекторий из разных начальных точек.
7. На основе результатов подтвердить, что колебания в модели являются автоколебаниями (независимыми от начальных условий), и сделать вывод о роли нелинейности в самоорганизации химических систем.

2 Описание модели

Модель Брюсселятор — это теоретическая схема автокаталитической химической реакции, предложенная в 1960-х годах для описания процессов самоорганизации в открытых неравновесных системах. Несмотря на свою простоту, модель демонстрирует ключевые явления нелинейной динамики: устойчивые колебания, бифуркации и образование предельных циклов.

Система уравнений Брюсселятора имеет вид:

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = A - (B + 1)x + x^2y, \\ \frac{dy}{dt} = Bx - x^2y, \end{cases}$$

где:

- $x(t), y(t) \geq 0$ — концентрации промежуточных химических веществ (фазовые переменные);
- $A > 0$ — концентрация входного реагента (поддерживается постоянной);
- $B > 0$ — концентрация другого входного реагента (также постоянна);
- Все параметры предполагаются положительными и задаются извне.

Система является **открытой**: реагенты A и B непрерывно подаются в реактор, а продукты реакции удаляются, что поддерживает систему вдали от термодинамического равновесия.

Фазовые переменные: $x(t), y(t) \in \mathbb{R}_{\geq 0}$.

Параметры системы: $A, B > 0$ — управляющие параметры внешней среды.

Входные данные: начальные условия (x_0, y_0) и временной интервал $[0, T]$.

Решение: вектор-функция $(x(t), y(t))$, описывающая эволюцию концентраций во времени.

Модель Брюсселятора служит каноническим примером **автоколебательной системы**: при определённых значениях параметров она порождает устойчивые колебания, амплитуда и частота которых определяются только внутренней динамикой, а не начальными условиями.

3 Аналитическое исследование системы

3.1 Равновесные состояния

Стационарные (равновесные) точки системы находятся из условия $\dot{x} = 0, \dot{y} = 0$:

$$\begin{cases} A - (B + 1)x + x^2y = 0, \\ Bx - x^2y = 0. \end{cases}$$

Из второго уравнения: $x(B - xy) = 0$. Рассмотрим два случая.

- Если $x = 0$, то из первого уравнения получаем $A = 0$, что противоречит условию $A > 0$.
- Следовательно, $x \neq 0$, и тогда $xy = B \Rightarrow y = \frac{B}{x}$.

Подставим $y = B/x$ в первое уравнение:

$$A - (B + 1)x + x^2 \cdot \frac{B}{x} = A - (B + 1)x + Bx = A - x = 0 \Rightarrow x = A.$$

Тогда $y = \frac{B}{A}$. Таким образом, система имеет единственную стационарную точку:

$$u^* = \left(A, \frac{B}{A} \right).$$

3.2 Исследование устойчивости

Для анализа устойчивости вычислим матрицу Якоби правой части системы:

$$J(x, y) = \begin{bmatrix} \frac{\partial \dot{x}}{\partial x} & \frac{\partial \dot{x}}{\partial y} \\ \frac{\partial \dot{y}}{\partial x} & \frac{\partial \dot{y}}{\partial y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -(B + 1) + 2xy & x^2 \\ B - 2xy & -x^2 \end{bmatrix}.$$

Подставим равновесие $x = A, y = B/A$:

$$2xy = 2A \cdot \frac{B}{A} = 2B, \quad x^2 = A^2.$$

Получаем:

$$J(u^*) = \begin{bmatrix} -(B+1) + 2B & A^2 \\ B - 2B & -A^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} B-1 & A^2 \\ -B & -A^2 \end{bmatrix}.$$

Характеристическое уравнение:

$$\det(J - \lambda I) = 0 \quad \Rightarrow \quad \begin{vmatrix} B-1-\lambda & A^2 \\ -B & -A^2-\lambda \end{vmatrix} = 0.$$

Раскрывая определитель:

$$(B-1-\lambda)(-A^2-\lambda) + A^2B = 0.$$

После упрощения:

$$\lambda^2 + (A^2 - B + 1)\lambda + A^2(B-1-B) + A^2B = \lambda^2 + (A^2 - B + 1)\lambda + A^2 = 0.$$

Итак, характеристический полином:

$$\lambda^2 + (A^2 - B + 1)\lambda + A^2 = 0.$$

Обозначим коэффициенты:

$$a_1 = A^2 - B + 1, \quad a_2 = A^2 > 0.$$

По критерию Гурвица для уравнения второго порядка устойчивость равновесия эквивалентна условию:

$$a_1 > 0 \quad \Leftrightarrow \quad A^2 - B + 1 > 0 \quad \Leftrightarrow \quad B < 1 + A^2.$$

- Если $B < 1 + A^2$, то $a_1 > 0$, $a_2 > 0 \rightarrow$ оба корня имеют отрицательную вещественную часть \rightarrow равновесие **устойчиво** (фокус или узел).
- Если $B > 1 + A^2$, то $a_1 < 0 \rightarrow$ вещественная часть хотя бы одного корня положительна \rightarrow равновесие **неустойчиво**.
- При $B = 1 + A^2$ вещественная часть корней обращается в ноль \rightarrow чисто мнимые корни \rightarrow в системе происходит **бифуркация Андронова-Хопфа**.

При $B > 1 + A^2$ неустойчивое равновесие окружено **устойчивым предельным циклом**, что приводит к возникновению автоколебаний — регулярных, незатухающих колебаний, амплитуда и частота которых определяются только параметрами A и B , а не начальными условиями.

Таким образом, модель Брюсселятора демонстрирует ключевой механизм самоорганизации в неравновесных системах: при изменении управляющего параметра B система переходит от стационарного состояния к регулярным колебаниям через бифуркацию Хопфа.

4 Результаты моделирования

```
1 import numpy as np
2 import matplotlib.pyplot as plt
3 from scipy.integrate import solve_ivp
4
5 plt.rcParams.update({
6     "font.family": "DejaVu Sans",
7     "axes.spines.top": False,
8     "axes.spines.right": False,
9     "grid.alpha": 0.3,
10    "figure.facecolor": "white",
11    "axes.facecolor": "#f9f9f9",
12    "font.size": 12,
13    "axes.titlesize": 14,
14    "axes.labelsize": 12,
15    "legend.fontsize": 11,
16    "xtick.labelsize": 11,
17    "ytick.labelsize": 11
18 })
19
20
21 def brusselator(t, xy, A, B):
22     x, y = xy
23     dxdt = A - (B + 1) * x + x ** 2 * y
24     dydt = B * x - x ** 2 * y
25     return [dxdt, dydt]
26
27 experiments = [
28     {
29         'name': 'Устойчивое равновесие ( $B < 1 + A$ )',
30         'A': 1.0,
31         'B': 2.0,
32         't_end': 30,
33         'initial': [1.2, 1.8]
34     },
35     {
36         'name': 'Устойчивый предельный цикл ( $B > 1 + A$ )',
37         'A': 1.0,
38         'B': 3.0,
39         't_end': 50,
40         'initial': [1.2, 1.8]
41     },
42     {
43         'name': 'Цикл из другого начального условия',
44         'A': 1.0,
45         'B': 3.0,
46         't_end': 50,
47         'initial': [2.5, 0.5]
48     }
49 ]
50
51 print("=" * 60)
```

```

52 print("МОДЕЛЬ БРЮССЕЛЯТОРА:
    АВТОКОЛЕБАТЕЛЬНАЯ ХИМИЧЕСКАЯ СИСТЕМА ")
53 print("=" * 60)
54
55 cyclic_trajectories = []
56
57 for exp in experiments:
58     name = exp['name']
59     A, B = exp['A'], exp['B']
60     t_end = exp['t_end']
61     z0 = exp['initial']
62
63     t_eval = np.linspace(0, t_end, 5000)
64
65     sol = solve_ivp(
66         fun=lambda t, xy: brusselator(t, xy, A, B),
67         t_span=(0, t_end),
68         y0=z0,
69         t_eval=t_eval,
70         method='RK45',
71         rtol=1e-9,
72         atol=1e-12
73     )
74
75     x, y = sol.y
76     x_eq, y_eq = A, B / A
77
78     print(f"\n {name}")
79     print(f" Параметры : A={A}, B={B} → 1 + 2A = {1 + A ** 2:.1f}")
80     print(f" Равновесие : (x*, y*) = ({x_eq:.2f}, {y_eq:.2f})")
81
82     if "цикл" in name or "Цикл" in name:
83         cyclic_trajectories.append((x, y, z0))
84
85     fig, axes = plt.subplots(1, 2, figsize=(14, 6))
86     fig.suptitle(f'Брюсселятор\n{n{name}}', fontsize=15, fontweight='bold',
87                 y=1.02)
88
89     axes[0].plot(sol.t, x, 'b-', label='x(t)')
90     axes[0].plot(sol.t, y, 'r-', label='y(t)')
91     axes[0].axhline(y_eq, color='orange', linestyle='--', linewidth=1,
92                    label=f'x*, y*')
93     axes[0].set_xlabel('Время')
94     axes[0].set_ylabel('Концентрация')
95     axes[0].set_title('Временная динамика')
96     axes[0].legend()
97     axes[0].grid(True)
98
99     axes[1].plot(x, y, 'm-', linewidth=1.5)
100    axes[1].plot(x_eq, y_eq, 'ko', markersize=8, label='Равновесие')
101    axes[1].set_xlabel('x')
102    axes[1].set_ylabel('y')
103    axes[1].set_title('Фазовый портрет')
104    axes[1].legend()
105    axes[1].grid(True)

```



```

104         plt.tight_layout()
105         filename = f"brusselator_{name.replace(' ', '_').replace('(',
106             ' ').replace(')', '')}.png"
107         plt.savefig(filename, dpi=200, bbox_inches='tight')
108         plt.show()
109
110     if len(cyclic_trajectories) == 2:
111         plt.figure(figsize=(10, 6))
112         for i, (x, y, z0) in enumerate(cyclic_trajectories):
113             plt.plot(x, y, label=f'Начало: {z0}', linewidth=2)
114         plt.plot(1.0, 3.0, 'ko', markersize=8, label='Равновесие (1, 3)')
115         plt.xlabel('x')
116         plt.ylabel('y')
117         plt.legend()
118         plt.grid(True)
119         plt.tight_layout()
120         plt.savefig('brusselator_same_limit_cycle.png', dpi=200,
121             bbox_inches='tight')

```

4.1 Математическая интерпретация реализации

- Функция `brusselator(t, xy, A, B)` реализует систему дифференциальных уравнений:

$$\begin{cases} \dot{x} = A - (B + 1)x + x^2y, \\ \dot{y} = Bx - x^2y, \end{cases}$$

где $x(t)$ и $y(t)$ — концентрации промежуточных веществ в автокатализитической химической реакции, а A и B — управляющие параметры, соответствующие концентрациям постоянных внешних реагентов.

- Параметры выбраны так, чтобы продемонстрировать два качественно различных режима:
 - **Устойчивое равновесие:** $A = 1.0$, $B = 2.0$. Поскольку $1 + A^2 = 2.0$, условие $B \leq 1 + A^2$ выполнено, и система стремится к стационарной точке $(x^*, y^*) = (1.0, 2.0)$.
 - **Автоколебания:** $A = 1.0$, $B = 3.0$. Здесь $B > 1 + A^2$, равновесие теряет устойчивость, и возникает **устойчивый предельный цикл** — замкнутая траектория в фазовом пространстве, соответствующая незатухающим колебаниям.

- Для демонстрации свойства **автоколебательности** запущены две численные траектории при $B = 3.0$ из существенно разных начальных условий: $(1.2, 1.8)$ и $(2.5, 0.5)$. Несмотря на различие в начальных состояниях, обе траектории со временем сходятся к одному и тому же предельному циклу, что подтверждает: амплитуда и форма колебаний определяются только параметрами A и B , а не начальными данными.
- Численное решение выполнено методом Рунге–Кутты 4-5 порядка (RK45) с высокой точностью ($\text{rtol} = 10^{-9}$, $\text{atol} = 10^{-12}$), что необходимо для корректного воспроизведения гладких периодических траекторий без численного затухания или дрейфа.

4.2 Численное интегрирование

Графики строятся в трёхмерном пространстве с помощью Axes3D — это позволяет визуализировать сложную геометрию аттрактора. Для анализа чувствительности используется график расстояния в логарифмическом масштабе, чтобы наглядно продемонстрировать экспоненциальный рост.

4.3 Анализ результатов

- Устойчивое равновесие ($B < 1 + A^2$)
 Параметры: $A=1.0, B=2.0 \rightarrow 1 + A^2 = 2.0$
 Равновесие: $(x^*, y^*) = (1.00, 2.00)$
- Устойчивый предельный цикл ($B > 1 + A^2$)
 Параметры: $A=1.0, B=3.0 \rightarrow 1 + A^2 = 2.0$
 Равновесие: $(x^*, y^*) = (1.00, 3.00)$
- Цикл из другого начального условия
 Параметры: $A=1.0, B=3.0 \rightarrow 1 + A^2 = 2.0$
 Равновесие: $(x^*, y^*) = (1.00, 3.00)$

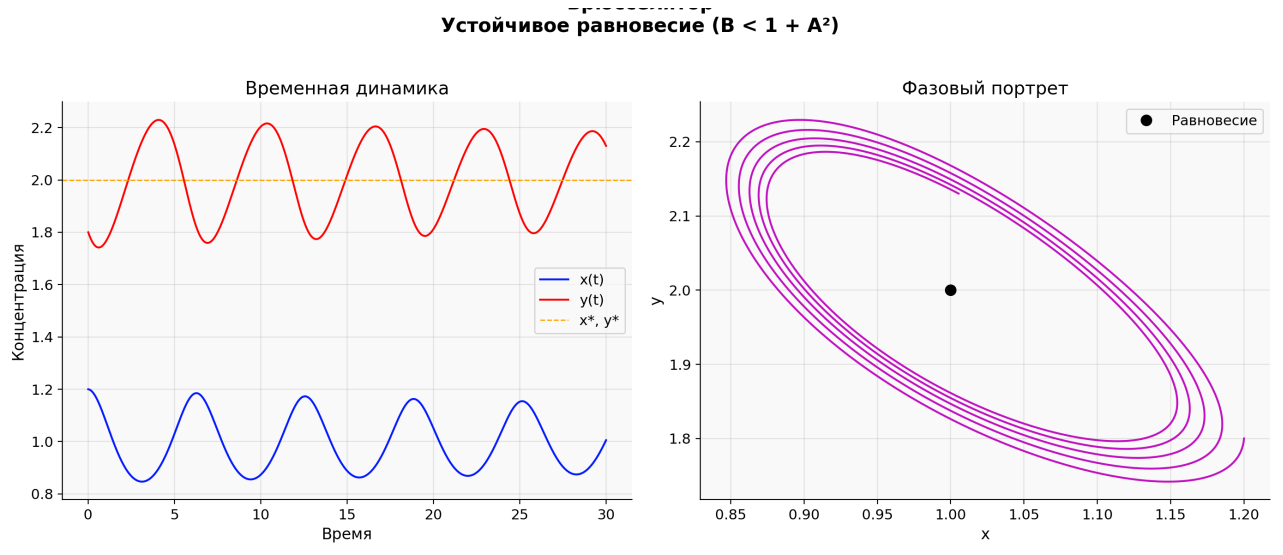


Рис. 1: Режим устойчивого равновесия при $A = 1.0$, $B = 2.0$.

На этом графике показано поведение системы при $B = 2.0$ (что равно $1 + A^2$). На левом графике видно, что колебания концентраций $x(t)$ и $y(t)$ постепенно затухают, и обе переменные стремятся к равновесным значениям $(1.0, 2.0)$. На правом графике — фазовый портрет: траектории «ввинчиваются» в точку равновесия, что соответствует устойчивому фокусу. Это согласуется с аналитическим условием устойчивости: при $B \leq 1 + A^2$ равновесие устойчиво.

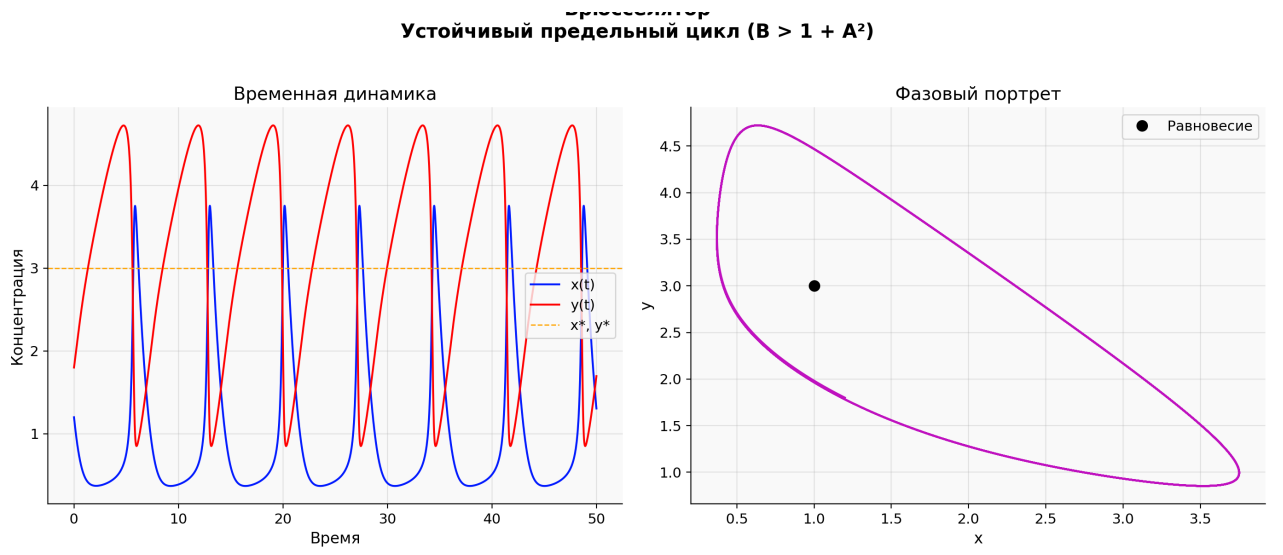


Рис. 2: Устойчивый предельный цикл при $A = 1.0$, $B = 3.0$.

Здесь $B = 3.0 > 1 + A^2 = 2.0$, и система демонстрирует **автоколебания**: на левом графике — незатухающие периодические колебания концентраций; на правом — замкнутая траектория в фазовом пространстве. Это классический признак **бифуркации Андронова–Хопфа**: при превышении критического значения параметра B равновесная точка $(1.0, 3.0)$ теряет устойчивость, и вокруг неё возникает устойчивый предельный цикл.

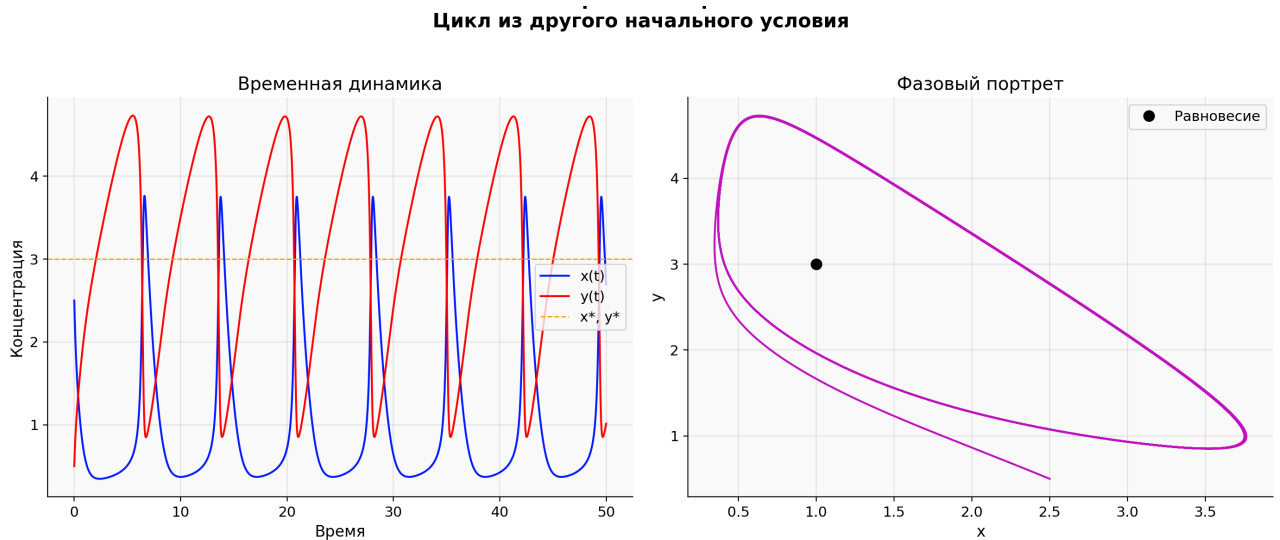


Рис. 3: Тот же предельный цикл, но из другого начального условия $(2.5, 0.5)$.

Этот график подтверждает ключевую черту автоколебательных систем: ****независимость формы и амплитуды колебаний от начальных условий****. Несмотря на то, что траектория начинается в точке $(2.5, 0.5)$, сильно удалённой от равновесия, она быстро «захватывается» предельным циклом и совпадает с предыдущей траекторией. Это — явление самоорганизации: система сама «выбирает» свой режим колебаний.

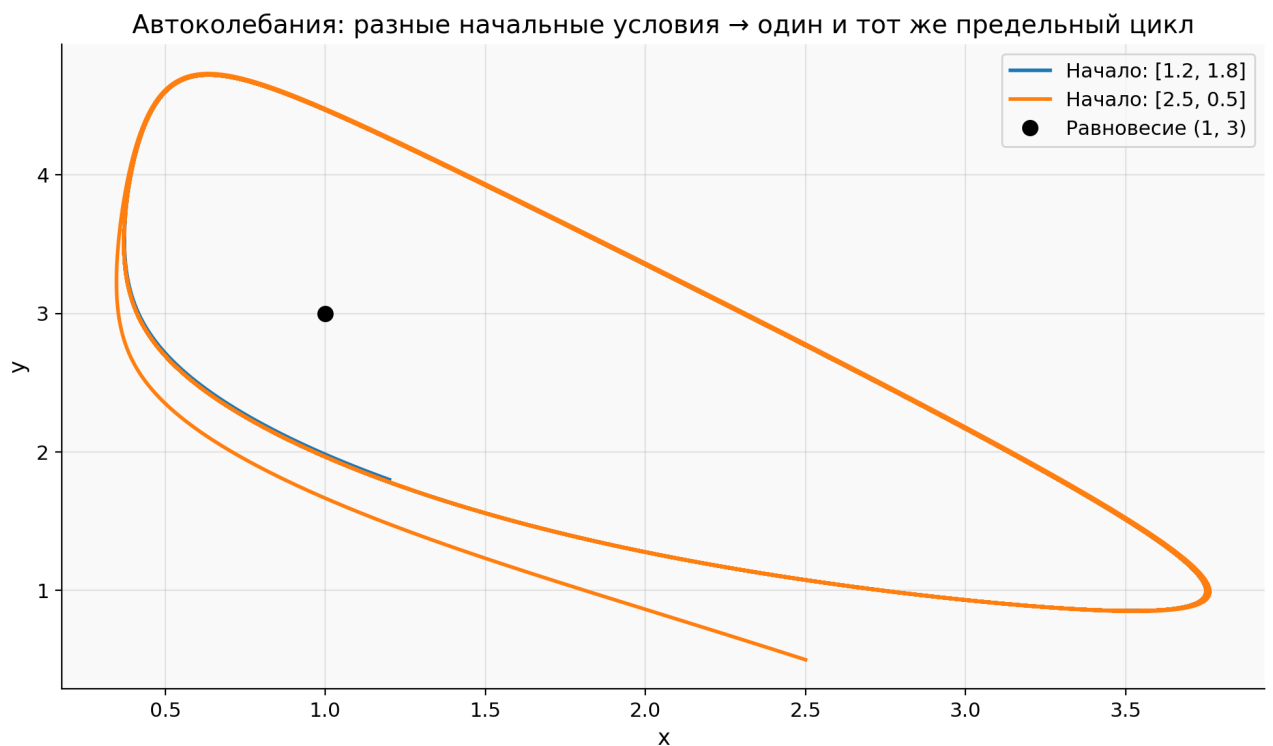


Рис. 4: Сравнение двух траекторий при $B = 3.0$: разные начальные условия → один и тот же предельный цикл.

На этом графике наглядно показано, что две траектории — синяя $([1.2, 1.8])$ и оранжевая $([2.5, 0.5])$ — после короткого переходного процесса сливаются в одну и ту же замкнутую кривую. Это является прямым доказательством того, что колебания в модели Брюсселятора являются **автоколебаниями**, а не вынужденными или затухающими.

4.4 Выводы

Модель Брюсселятора является каноническим примером химической системы, способной к самоорганизации. На основе численных экспериментов можно сделать следующие выводы:

- При $B \leq 1 + A^2$ система имеет единственную устойчивую точку равновесия — все траектории сходятся к ней.
- При $B > 1 + A^2$ происходит бифуркация Хопфа: равновесие становится неустойчивым, и возникает устойчивый предельный цикл — регулярные незатухающие колебания.
- Колебания являются автоколебаниями: их амплитуда и частота не зависят от начальных условий — это свойство самоорганизации.
- Модель демонстрирует, как простая детерминированная система может порождать сложное поведение без внешнего воздействия — это фундаментальный принцип нелинейной динамики.