

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ  
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЯДЕРНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ «МИФИ»  
(НИЯУ МИФИ)

# ОТЧЁТ

по дисциплине «Проектная практика»  
на тему «Численное исследование изменения концентраций веществ в  
одной химической реакции Белоусова–Жаботинского с тремя  
активными веществами»

Группа

Б23-215

Студенты

А.Д. Донецков  
В.Д. Бакакин  
Е.М. Жулев

Руководитель работы

К.Е. Шильников

Москва 2024

## Аннотация

Отчёт посвящён реализации численных методов для решения задачи Коши. Решалась задача исследования изменения концентраций веществ в одной химической реакции Белоусова–Жаботинского с тремя активными веществами.

## Содержание

1.	Постановка задачи . . . . .	3
2.	Общие методы решения . . . . .	3
3.	Реализация решения . . . . .	3
4.	Полученные результаты . . . . .	4
5.	Анализ результатов . . . . .	11
6.	Заключение . . . . .	11

# 1. Постановка задачи

Изменения концентраций веществ в химической реакции Белоусова–Жаботинского с тремя активными веществами описывается следующей системой дифференциальных уравнений:

$$\begin{cases} x' = -0.04x + 10^4 yz \\ y' = 0.04x - 10^4 yz - 3 * 10^7 y^2 \\ z' = 3 * 10^7 y^2 \end{cases}$$

При этом:

$$0 \leq t \leq 1000, x(0) = 1, y(0) = 0, z(0) = 0$$

Требуется построить следующие графики:  $x(y)$ ,  $y(z)$ ,  $z(x, y)$ .

## 2. Общие методы решения

Решаемая нами задача является системой обыкновенных дифференциальных уравнений, которая может быть решена численными методами такими, как метод Эйлера и метод Рунге-Кутты. Данные методы аппроксимируют функции, являющиеся корнями рассматриваемого уравнения набором их значений в конечном числе точек. Оба метода используют идею предсказания изменения функции при малом изменении параметра с помощью вычисления из производных, что делается с помощью использования разложения в ряд Тейлора.

В нашей работе использовались следующие методы: явный метод Эйлера, модифицированный метод Эйлера с пересчётом, метод Рунге-Кутты четвёртого порядка.

## 3. Реализация решения

Во всех использованных нами методов для решения задачи использовалась следующая логика: задаётся величина изменения параметра  $t$  т. е.  $dt$  далее с помощью данной системы уравнений и значений  $x y z$  на предыдущем шаге алгоритма метод предсказывает приращение функции в данной точке, используя для этого значение производных по переменным в данной точке и разложение в ряд Тэйлора.

Метод Эйлера — самый простой из использованных нами методов, аппроксимирует функцию-корень с помощью кусочно заданной функции, исходя из предположения, что рассматриваемая функция при достаточно малых  $dt$  ведёт себя как линейная функция с коэффициентом наклона равным производной функции в данной точке.

Другим использованным нами методом стал модифицированный метод Эйлера с пересчётом. Он, как и классический метод Эйлера находит значение функции при следующем значении параметра, а затем уточняет свою начальную оценку найдя производную в ранее полученной точке.

Метод Рунге-Кутты вычисляет значение функции уже с помощью четырёх последовательных оценок.

## 4. Полученные результаты

Все использованные нами методы при  $dt = 10^{-4}$  имеют визуально не отличимый результат, поэтому далее представлены графики полученные с помощью применения метода Рунге-Кутты.

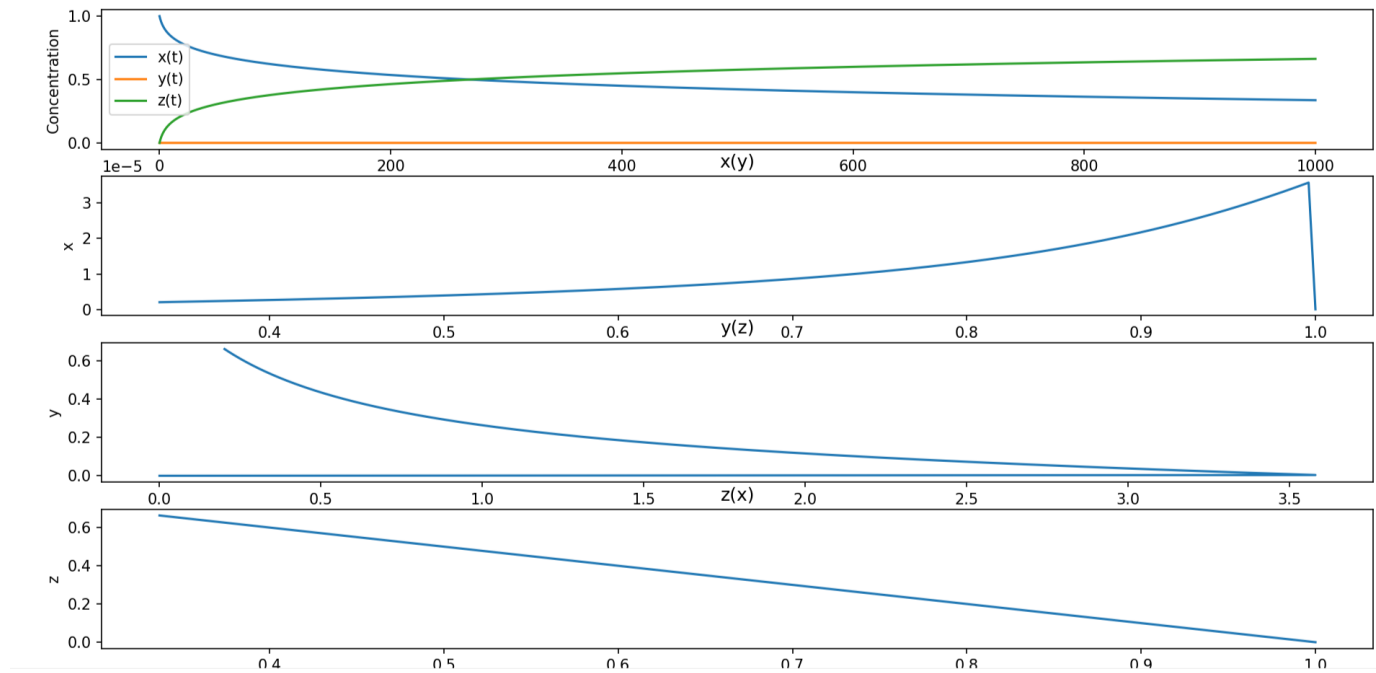


Рис. 1. Графики  $x(t)$ ,  $y(t)$ ,  $z(t)$ ,  $x(y)$  и  $y(z)$ . Начальные условия  $\{1, 0, 0\}$

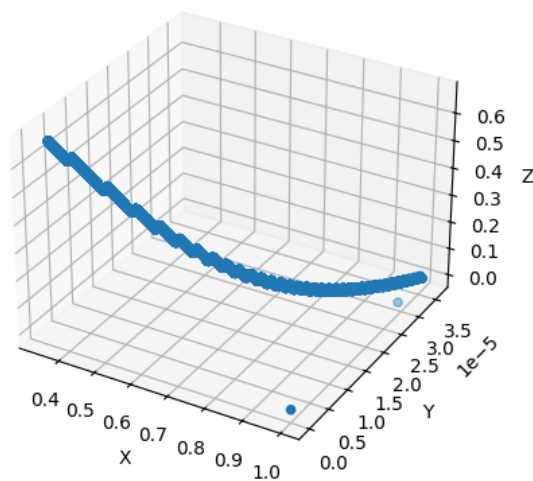


Рис. 2. График  $z(x, y)$  при начальных условиях

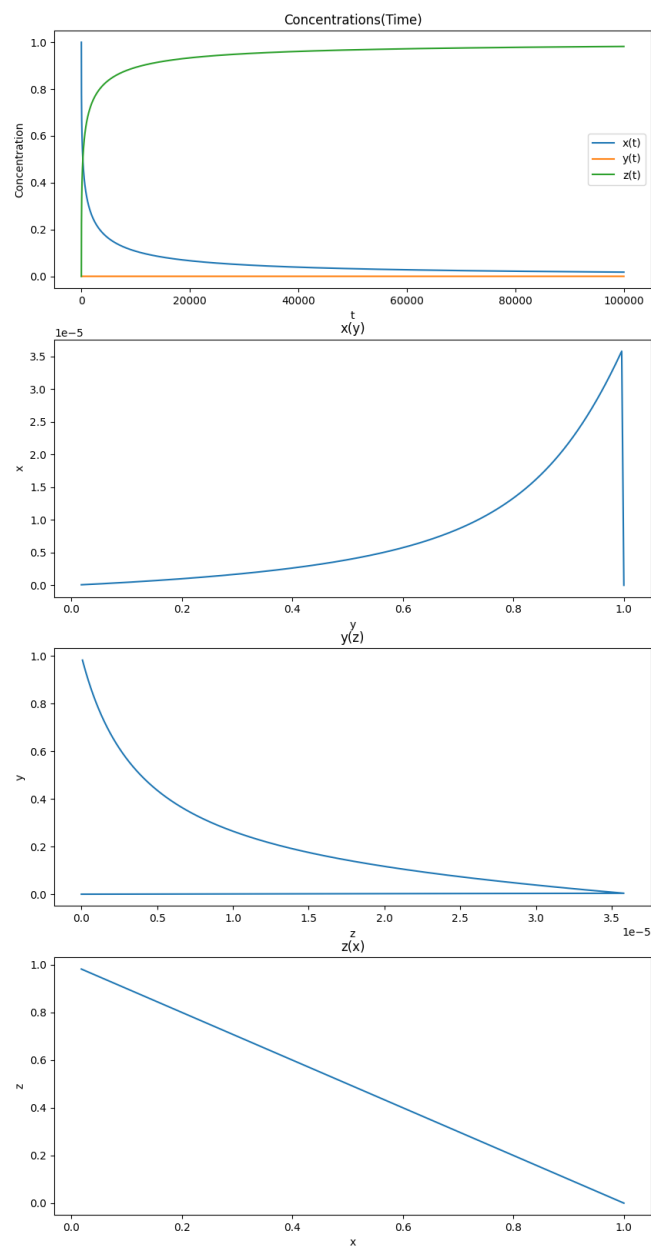


Рис. 3. Графики  $x(t)$ ,  $y(t)$ ,  $z(t)$ ,  $x(y)$  и  $y(z)$ . При  $t$  до 10000

Для исследования поведения системы нами были также рассмотрены другие начальные условия, а именно:

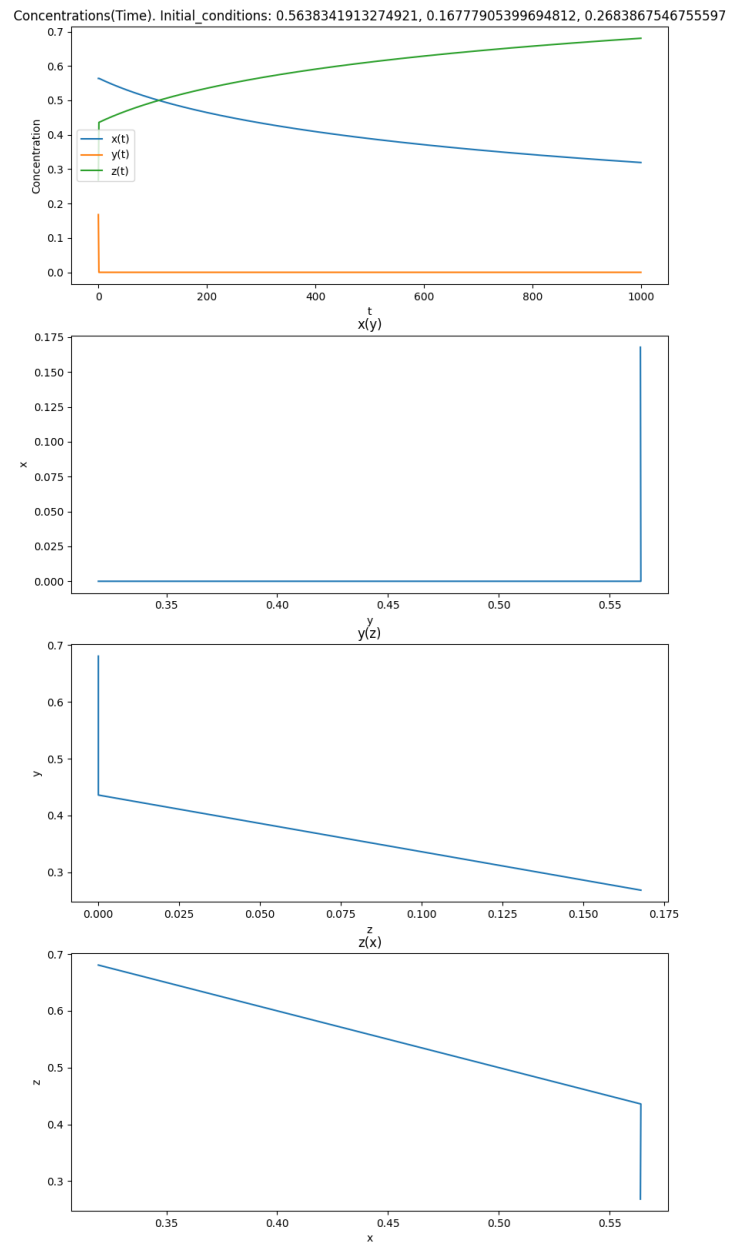


Рис. 4. Графики  $x(t)$ ,  $y(t)$ ,  $z(t)$ ,  $x(y)$  и  $y(z)$ . Начальные условия  $\{0.56, 0.17, 0.27\}$

Concentrations(Time). Initial\_conditions: 0.325091544906227, 0.3252788497957911, 0.3496296052979819

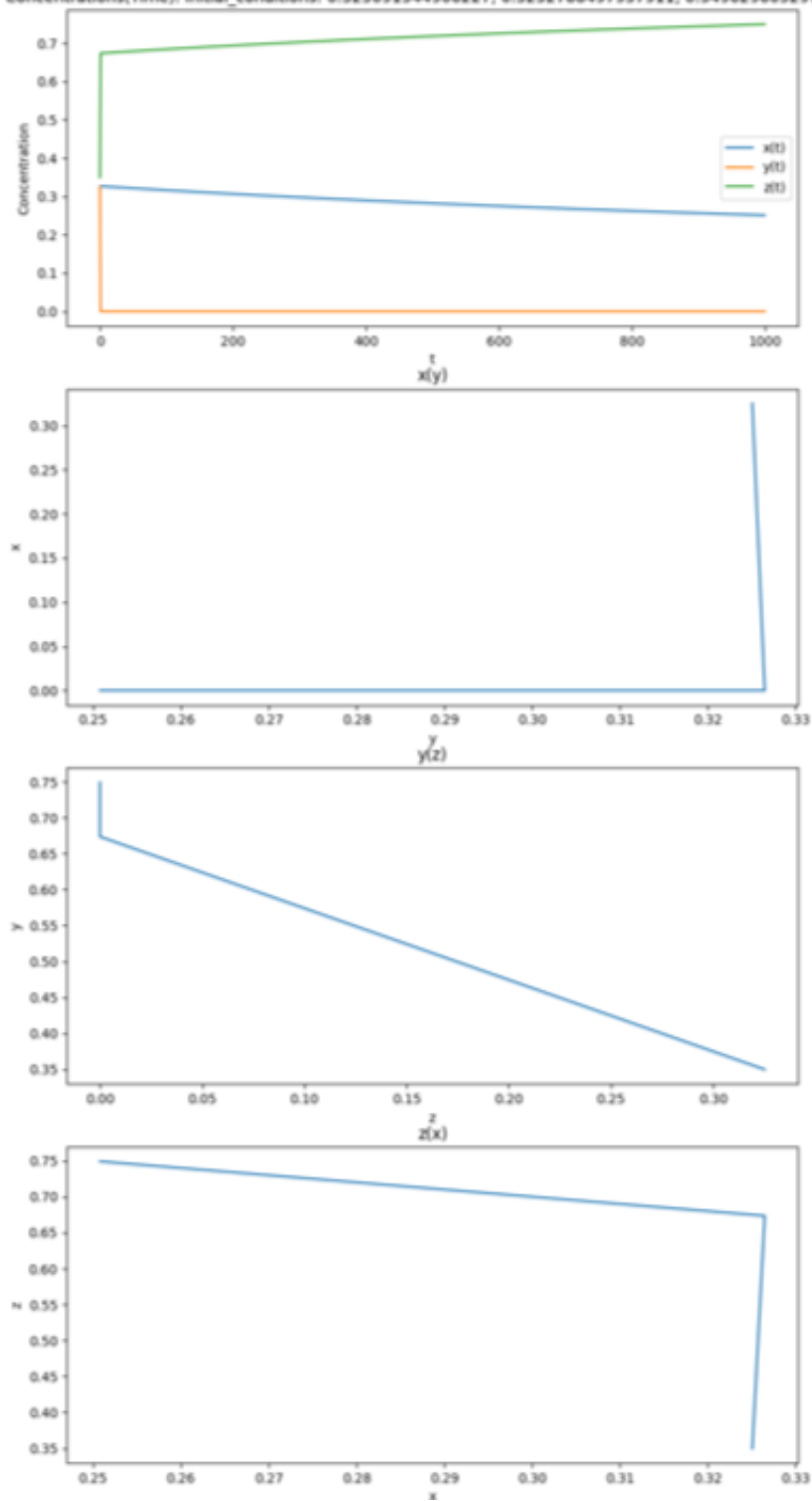


Рис. 5. Графики  $x(t)$ ,  $y(t)$ ,  $z(t)$ ,  $x(y)$  и  $y(z)$ . Начальные условия  $\{0.32, 0.32, 0.35\}$

Concentrations(Time). initial\_conditions: 0.8198771246107917, 0.1677399099635285, 0.9151002599526152

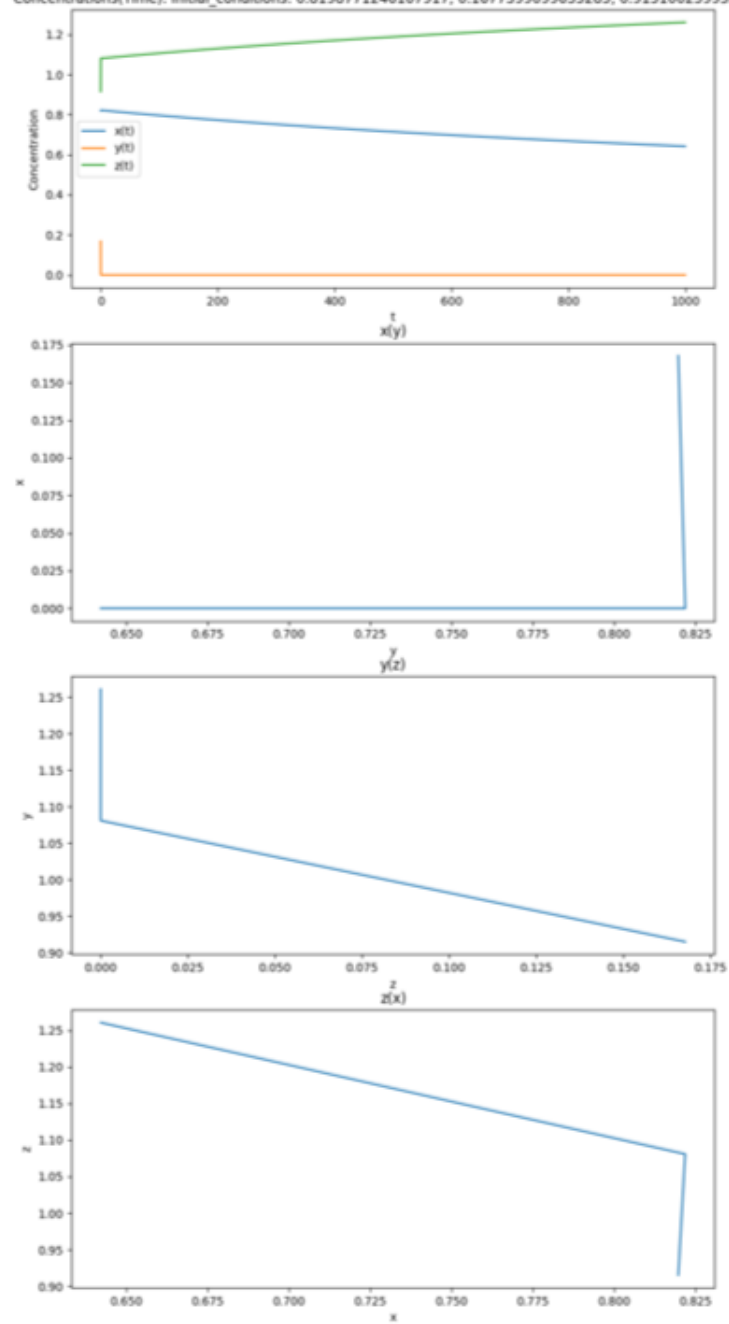


Рис. 6. Графики  $x(t)$ ,  $y(t)$ ,  $z(t)$ ,  $x(y)$  и  $y(z)$ . Начальные условия  $\{0.82, 0.17, 0.92\}$



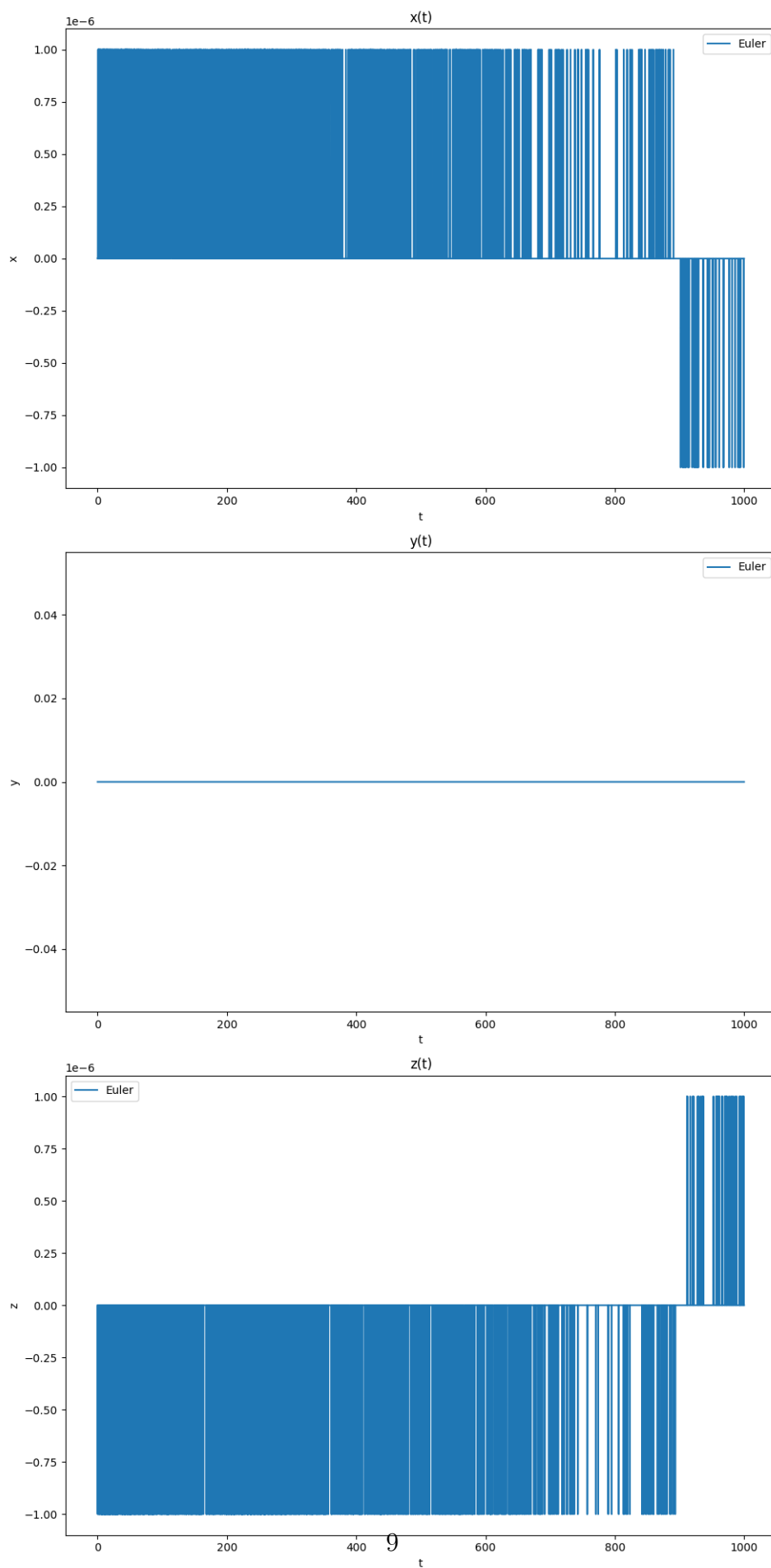


Рис. 7. Разница значений между методом РК и методом Эйлера

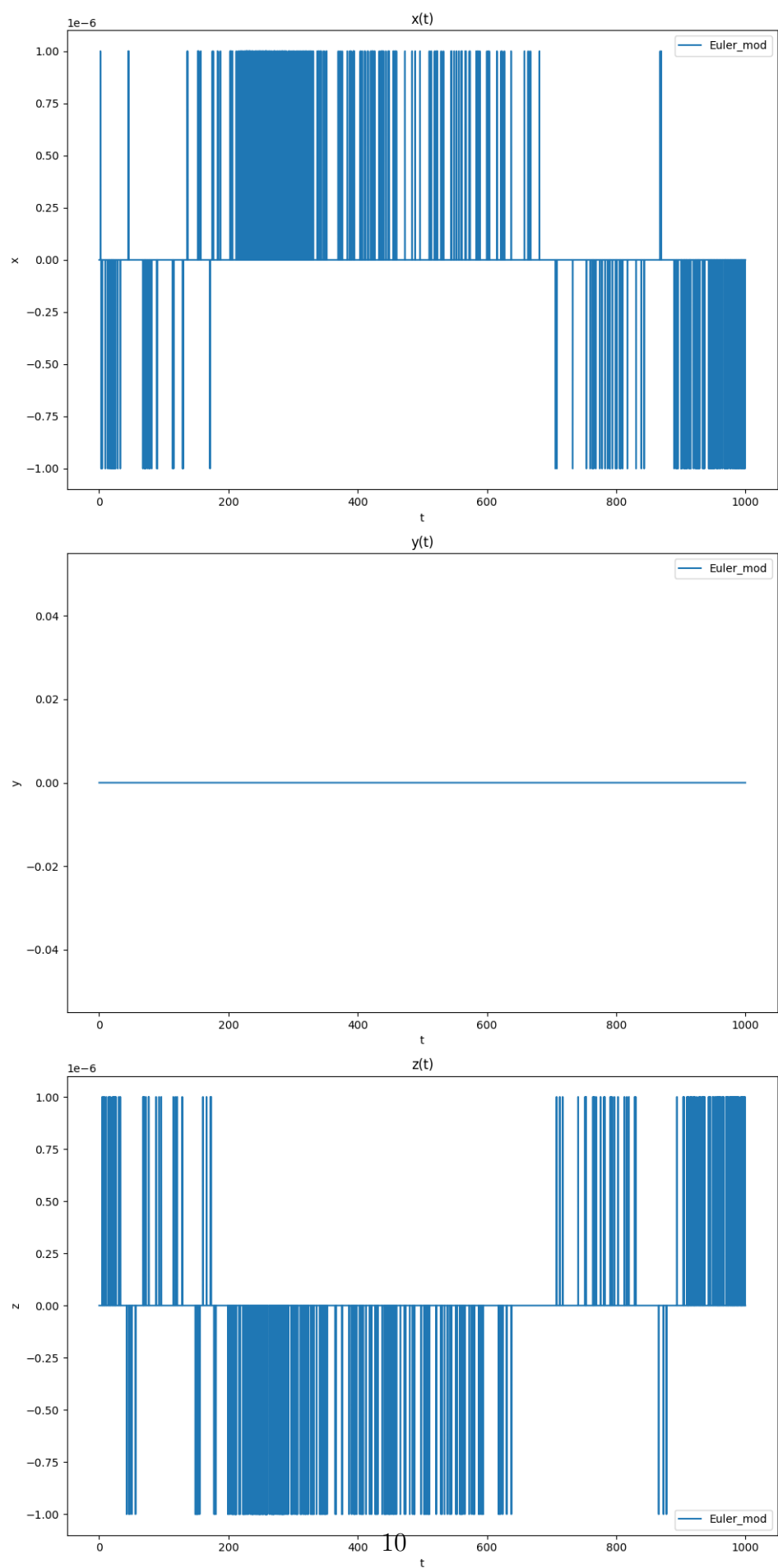


Рис. 8. Разница значений между методом РК и модифицированным методом Эйлера

## 5. Анализ результатов

Из графиков номер 7 и номер 8 видно, что при достаточно малом  $dt$  все рассмотренные нами методы дают результат отличающийся не более чем на  $10^{-6}$  друг от друга, что можно считать погрешностью. Из этого также следует, что все применённые нами методы подходят для решения задачи.

Как мы видим в изначальной задаче, концентрация вещества  $y$  не велика — в начале хода реакции оно равно  $2 \cdot 10^{-5}$  и уменьшается до  $2 \cdot 10^{-6}$  при  $t = 1000$ , из этого следует (это также видно на графике  $z(x)$ ), что сумма веществ  $x$  и  $z$  практически постоянна. Более того: концентрация вещества  $x$  постоянно убывает, а вещества  $z$  — возрастает. Как мы можем видеть из графика номер 3 при дальнейшем течении времени концентрация вещества  $x$  стремиться к нулю.

Нами также были исследованы другие начальные условия, кроме  $\{1, 0, 0\}$ , а именно:  $\{0.56, 0.17, 0.27\}$  (график 4) и  $\{0.32, 0.32, 0.35\}$  (график 5). Во всех рассмотренных нами случаях концентрация первого и второго вещества стремиться к нулю, а концентрация последнего возрастает до единицы. Действительно если взглянуть на систему уравнений, то видно, что в точке  $M(0, 0, 1)$  все производные равны нулю — система стабильна.

Нами не рассматривались подробно поведение системы при суммарной начальной концентрации не равной единице, так как это не имеет физического смысла. Но как видно из графика номер 6 общие закономерности сохраняются и в этом случае.

## 6. Заключение

Нами была рассмотрена система дифференциальных уравнений, описывающая реакцию Белоусова–Жаботинского, и с помощью таких численных методов, как метод Эйлера, метод Эйлера с пересчётом и метод Рунге-Кутты, функция-корень аппроксимирована набором значений в конечном числе точек, что сделало возможным построение её графика и наблюдение поведения. Нами также было рассмотрено поведение системы при других начальных условиях и найдены общие закономерности.

## Список литературы и интернет-ресурсов

- [1] Рябенский, Виктор Соломонович. Введение в вычислительную математику: [учеб. пособие по направлению Прикладные математика и физика]. Россия: Физматлит, 2008.
- [2] Бахвалов, Н. С. Численные методы. Решения задач и упражнения : учебное пособие / Н. С. Бахвалов, А. А. Корнев, Е. В. Чижонков. — 2-е изд. — Москва : Лаборатория знаний, 2016. — 355 с. — ISBN 978-5-93208-205-8 М., МЦНМО, 2003. Доступны исходные тексты этой книги.
- [3] Федоренко, Радий Петрович. Введение в вычислительную физику. Россия: Интеллект, 2008.
- [4] Белоусов Б. П. Периодически действующая реакция и её механизм. Сб.: Автоволновые процессы в системах с диффузией / Под ред. М. Т. Греховой (отв. редактор), — Горький: Институт прикладной физики АН СССР, 1981. — 287 с. — с.76
- [5] Филд, Р. Колебания и бегущие волны в химических системах / Р. Филд, М. Бургер. М. : Мир, 1988. С.49-54. 41. Масао, Тсукада. Органические субстраты, производящие двойную частоту колебаний реакции Белоусова Жаботинского / Масао Тсукада. М. : Хим.лит., 1987