Ильяхова Алиса, Б9122-02.03.01сцт

Отчёт по модели Брюсселятора

1. Постановка задачи / Описание модели

Цель исследования:

Изучить динамику автокаталитической химической реакции с помощью классической нелинейной модели **Брюсселятора**, разработанной Ильёй Пригожиным и его коллегами в 1960-х годах. Модель демонстрирует возможность возникновения устойчивых колебаний и предельных циклов даже в однородной химической системе без внешнего воздействия.

Описание модели:

Брюсселятор — это упрощённая математическая модель гипотетической химической реакции, в которой концентрации промежуточных веществ $x(t)$ и $y(t)$ подчиняются следующей системе нелинейных автономных ОДУ:

$dx/dt = A - (B + 1)x + x^2y$,

$dy/dt = Bx - x^2y$,

где:

- $A > 0$ — концентрация исходного реагента (поддерживается постоянной),
- $B > 0$ — концентрация катализатора (также постоянна),
- $x(t)$, $y(t)$ — концентрации промежуточных продуктов.

Переменные и параметры:

Компонент	Обозначение	Тип	Описание
Концентрация x	$x(t)$	Фазовая переменная	Зависимая переменная (промежуточный продукт)
Концентрация y	$y(t)$	Фазовая переменная	Зависимая переменная
Время	t	Независимая	Время (условные единицы)

Параметры	A, B	Константы	Управляющие параметры реакции

Входные данные:

- Начальные условия: $x(0) = 1.0$, $y(0) = 1.0$
- Параметры: $A = 1.0$, $B = 3.0$
- Интервал моделирования: $t \in [0, 50]$

Что представляет собой решение?

Пара функций $x(t)$, $y(t)$, описывающих временную эволюцию концентраций. Аналитическое решение в элементарных функциях отсутствует, но система допускает анализ равновесий и бифуркаций. Численно — это дискретные приближения, полученные методом Рунге–Кутты.

2. Аналитическое исследование системы

Равновесные точки

Найдём стационарное состояние из условий $dx/dt = 0$, $dy/dt = 0$:

$A - (B + 1)x + x^2y = 0,$

$Bx - x^2y = 0.$

Из второго уравнения: $x^2y = Bx \Rightarrow y = B/x$ (при $x \neq 0$).

Подставим в первое: $A - (B + 1)x + Bx = A - x = 0 \Rightarrow x^* = A$, $y^* = B/A$.

Таким образом, единственная положительная равновесная точка:

$(x^*, y^*) = (A, B/A).$

При $A = 1.0$, $B = 3.0$: $(x^*, y^*) = (1.0, 3.0)$.

Анализ устойчивости

Якобиан системы:

$J(x, y) = [\ -(B + 1) + 2xy \quad x^2\ ]$

$[\ B - 2xy \quad -x^2\ ]$

В точке равновесия (A, B/A):

$J^* = [\ B – 1\ \ A^2\ ]$

$[\ –B\ \ –A^2\ ]$

След и определитель:

$tr(J^*) = (B – 1) – A^2$,

$det(J^*) = A^2$.

При $A = 1$: $tr(J^*) = B – 2$, $det(J^*) = 1 > 0$.

Критическое значение: $B_c = 2$.

- При $B < 2$: $tr < 0$ -> устойчивый фокус.
- При $B > 2$: $tr > 0$ -> неустойчивый фокус, рождается **предельный цикл** (бифуркация Андронова–Хопфа).

В нашем случае $B = 3 > 2 \Rightarrow$ система демонстрирует **автоколебания**: траектории стремятся к устойчивому предельному циклу.

3. Численное решение модели

Химическая ситуация:

Рассматривается гипотетическая автокаталитическая реакция в реакторе с постоянным притоком реагентов. Начальные концентрации малы, но за счёт нелинейной обратной связи возникают устойчивые колебания.

Поставленная задача:

Промоделировать поведение системы на интервале $t \in [0, 50]$ и показать переход к предельному циклу при $B = 3$.

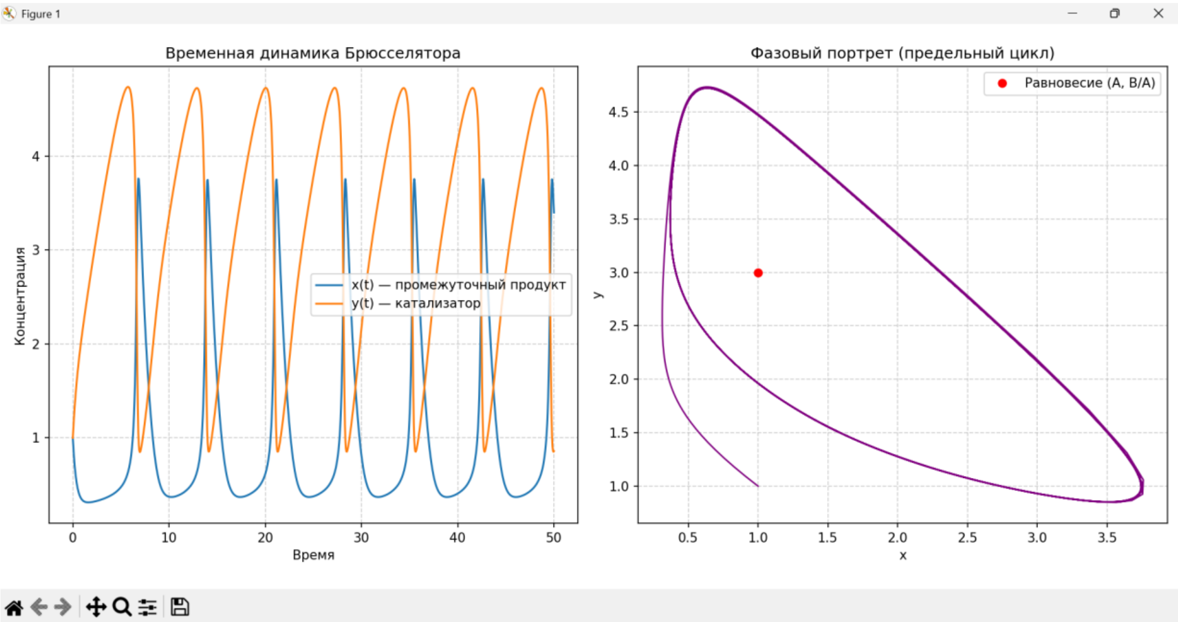
Численное решение:

Использован метод Рунге–Кутты 4–5 порядка (solve_ivp из SciPy).

Результаты:

1. **Временная динамика**:

    a. После начального переходного процесса обе концентрации совершают регулярные колебания с постоянной амплитудой и периодом.
    b. Колебания синхронизированы: пики x(t) опережают пики y(t).
2. **Фазовый портрет**:
    a. Траектория спиралевидно выходит из окрестности равновесия (1, 3) и стремится к замкнутому контуру — предельному циклу.
    b. Это подтверждает наличие автоколебательного режима.



4. Заключение

В ходе работы:

- Изучена и реализована модель **Брюсселятора** — классический пример нелинейной химической системы с автоколебаниями.
- Проведено полное аналитическое исследование: найдена равновесная точка, определено условие бифуркации Хопфа (B > 2).
- Реализовано численное моделирование на Python с использованием SciPy и Matplotlib.
- Построены графики временной динамики и фазового портрета, подтверждающие теоретические выводы.
- Продемонстрировано, как простая химическая система может генерировать самоподдерживающиеся колебания без внешнего сигнала — важный принцип неравновесной термодинамики и синергетики.

Модель Брюсселятора иллюстрирует, что сложное динамическое поведение (включая упорядоченность вдали от равновесия) может возникать даже в детерминированных системах с немногими степенями свободы.

5. Приложение: Код на Python

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from scipy.integrate import solve_ivp

# Параметры модели Брюсселятора
A = 1.0
B = 3.0  # B > 2 => предельный цикл

# Начальные условия
x0 = 1.0
y0 = 1.0

# Временной интервал
t_span = (0, 50)
t_eval = np.linspace(0, 50, 1000)

# Система ОДУ
def brusselator(t, z):
    x, y = z
    dxdt = A - (B + 1) * x + x**2 * y
    dydt = B * x - x**2 * y
    return [dxdt, dydt]

# Численное решение
sol = solve_ivp(brusselator, t_span, [x0, y0],
t_eval=t_eval, method='RK45')
t = sol.t
x = sol.y[0]
y = sol.y[1]

# Равновесная точка
x_eq = A
y_eq = B / A
```

```python
# Визуализация
fig, axs = plt.subplots(1, 2, figsize=(13, 5))

# Динамика во времени
axs[0].plot(t, x, label='x(t) — промежуточный продукт',
color='tab:blue')
axs[0].plot(t, y, label='y(t) — катализатор',
color='tab:orange')
axs[0].set_xlabel('Время')
axs[0].set_ylabel('Концентрация')
axs[0].set_title('Временная динамика Брюсселятора')
axs[0].legend()
axs[0].grid(True, linestyle='--', alpha=0.6)

# Фазовый портрет
axs[1].plot(x, y, color='purple', lw=1.2)
axs[1].plot(x_eq, y_eq, 'ro', label='Равновесие (A, B/A)')
axs[1].set_xlabel('x')
axs[1].set_ylabel('y')
axs[1].set_title('Фазовый портрет (предельный цикл)')
axs[1].legend()
axs[1].grid(True, linestyle='--', alpha=0.6)

plt.tight_layout()
plt.savefig('brusselator.png', dpi=200, bbox_inches='tight')
plt.show()

print(f"Равновесная точка: x* = {x_eq:.2f}, y* =
{y_eq:.2f}")
```