Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова
Факультет Вычислительной Математики и Кибернетики
Кафедра математической физики

Отчет

“Исследование устойчивости стационарных состояний нелинейных систем второго порядка. Построение параметрического портрета системы. Автоколебания и множественность стационарных решений.”

Выполнила:
Студентка 601 группы
Зимина Ольга Николаевна

Описание задачи

Рассматривается автокаталитическая химическая реакция, происходящая на поверхности катализатора и основанная на кинетической схеме Ленгмюра-Хиншельвуда:

$$\frac{dx}{dt} = k_1 z - k_{-1} x - k_3{}^0 (1-x)^\alpha xy, \tag{1}$$

$$\frac{dy}{dt} = k_2 z^2 - k_{-2} y^2 - k_3{}^0 (1-x)^\alpha xy \tag{2}$$

Здесь

$$z = 1 - x - y,\ 0 \le x \le 1,\ 0 \le y \le 1,\ 0 \le x + y \le 1$$

Базовый набор параметров в модели №6:

$$\alpha = 18,\ k_1 = 0.012,\ k_{-1} = 0.01,\ k_{-2} = 10^{-9},\ k_3{}^0 = 10,\ k_2 = 0.012$$

Однопараметрический анализ по k_2

Стационарные состояния удовлетворяют системе уравнений:

$$k_1 z - k_{-1} x - k_3{}^0 (1-x)^\alpha xy = 0 \tag{3}$$

$$k_2 z^2 - k_{-2} y^2 - k_3{}^0 (1-x)^\alpha xy = 0 \tag{4}$$

Из уравнения (1) выразим переменную y через x и подставим в уравнение (2). Из получившегося уравнения выразим k_2:

$$k_2 = \frac{k_3{}^0 (1-x)^\alpha xy + k_{-2} y^2}{1-x-y},$$

Где

$$y = \frac{k_{-1}x - k_1(1-x)}{-k_1 - k_3{}^0(1-x)^{\alpha}x}$$

Пробегая с некоторым шагом весь диапазон значений переменной x от 0 до 1, по полученным формулам найдем соответствующие значения переменной y и k_2.

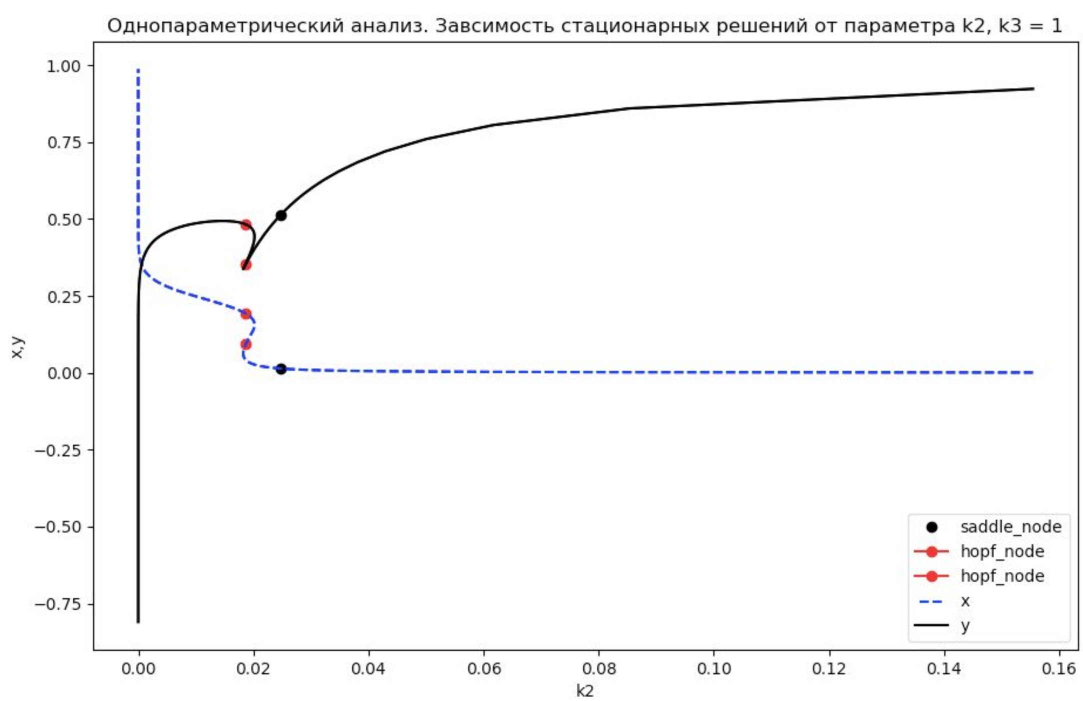
Для исследования устойчивости стационарных решений, необходимо

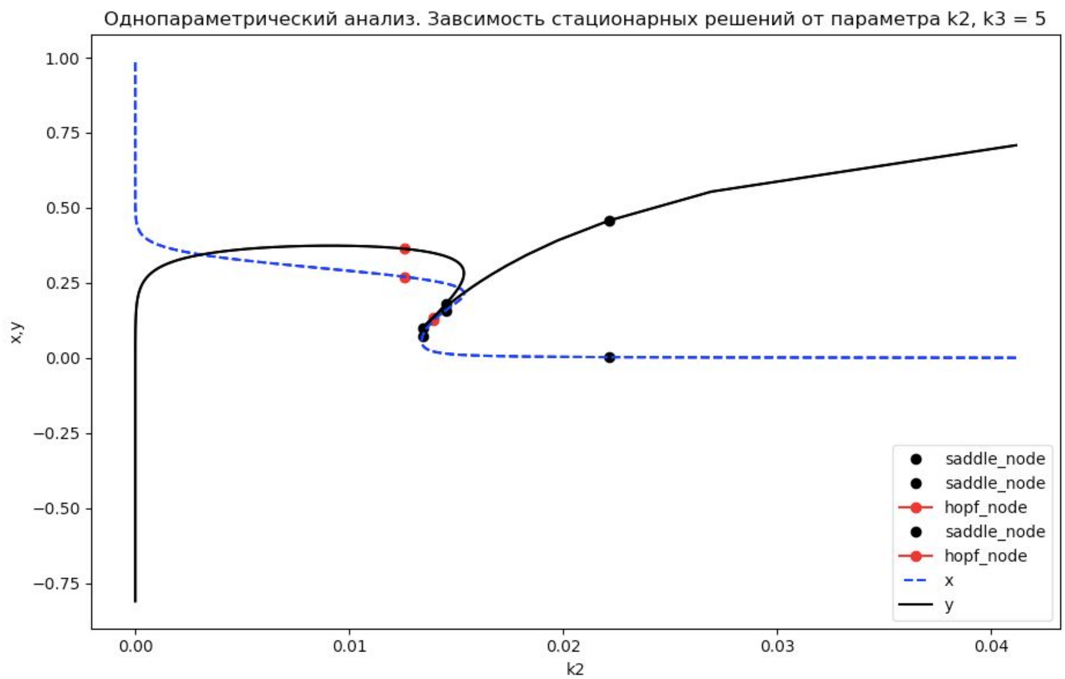
найти элементы матрицы Якоби, вычислить ее след и определитель.

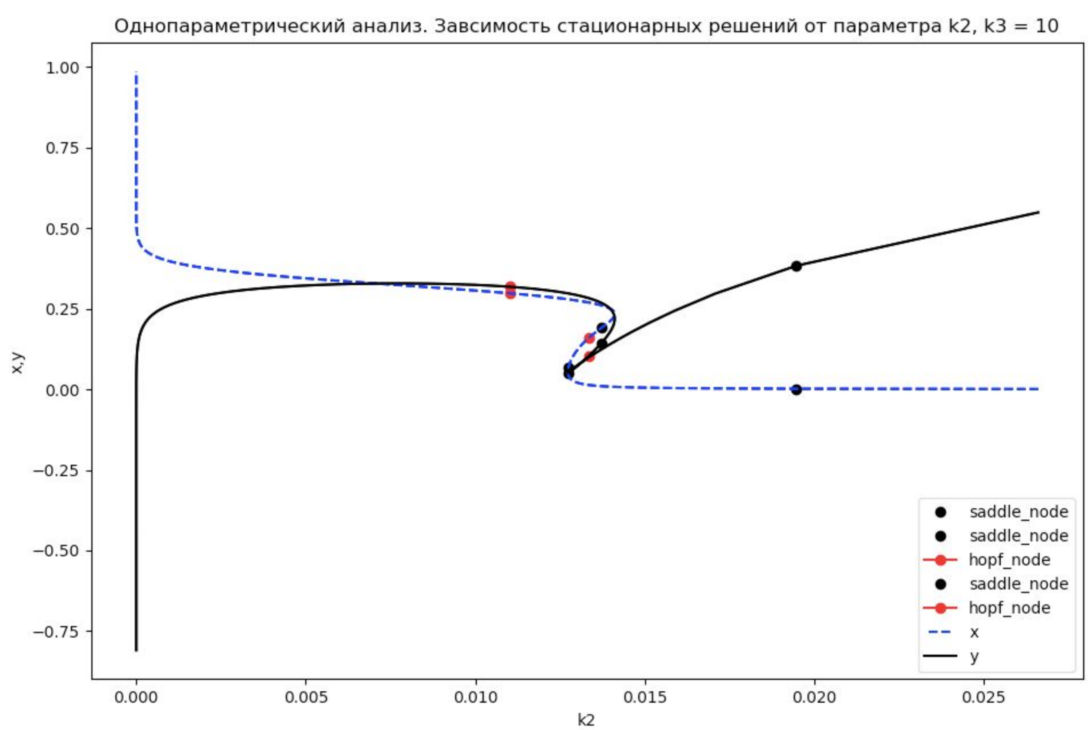
Это делается программно. Отслеживая смены знака якобиана системы (3),(4) на стационарном решении, мы находим точки бифуркации.

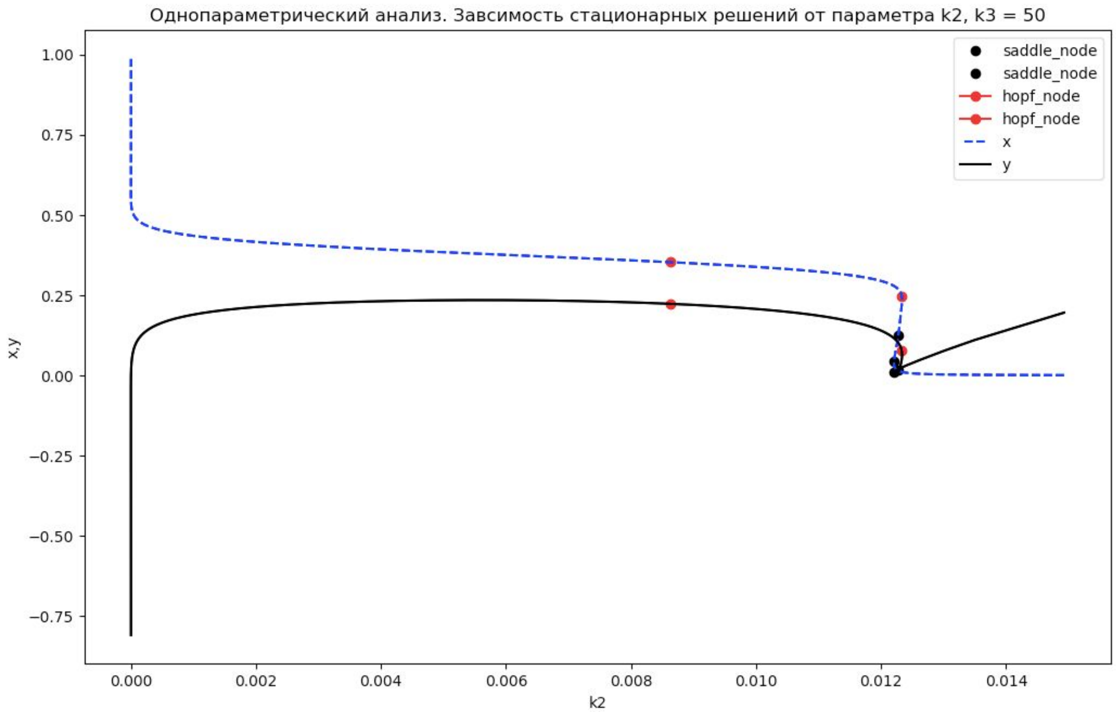
Ниже представлены результаты однопараметрического анализа по параметру k_2 при разных значениях параметра k_1. Значения остальных параметров берутся из базового набора:

$$\alpha = 18,\ k_{-1} = 0.01,\ k_{-2} = 10^{-9},\ k_3{}^0 = 10$$

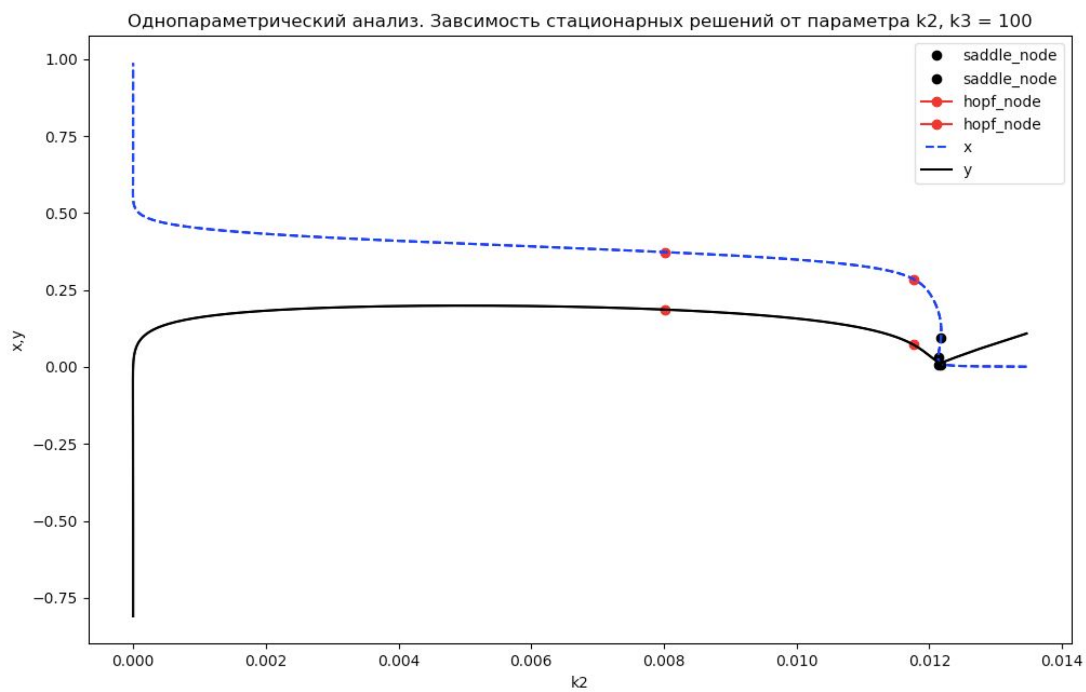



Однопараметрический анализ. Завсимость стационарных решений от параметра k2, k3 = 5
x,y
k2
saddle_node
saddle_node
hopf_node
saddle_node
hopf_node
x
y


Однопараметрический анализ. Завсимость стационарных решений от параметра k2, k3 = 10
x,y
k2
saddle_node
saddle_node
hopf_node
saddle_node
hopf_node
x
y



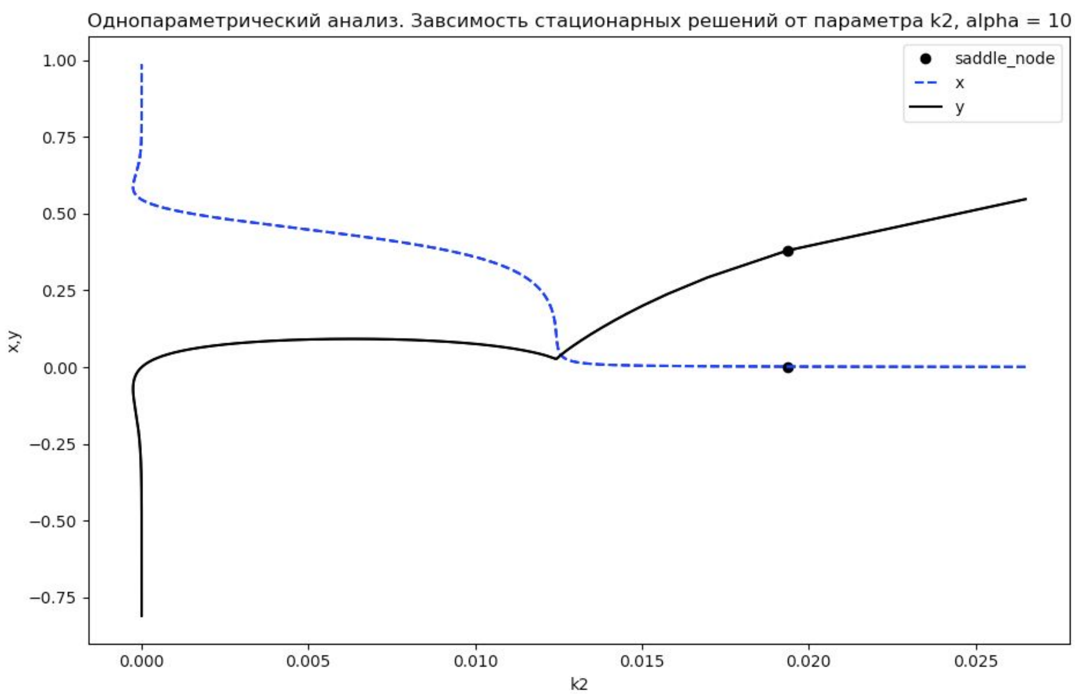
Однопараметрический анализ. Завсимость стационарных решений от параметра k2, k3 = 50
saddle_node
saddle_node
hopf_node
hopf_node
x
y
x,y
k2
1.00
0.75
0.50
0.25
0.00
−0.25
−0.50
−0.75
0.000
0.002
0.004
0.006
0.008
0.010
0.012
0.014

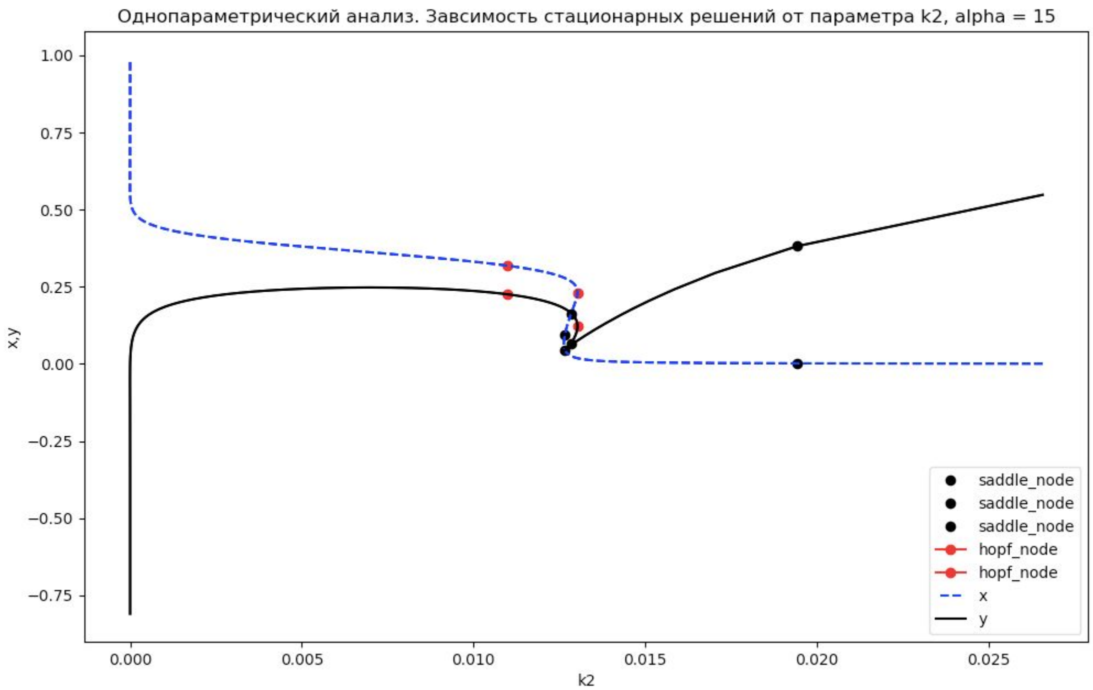


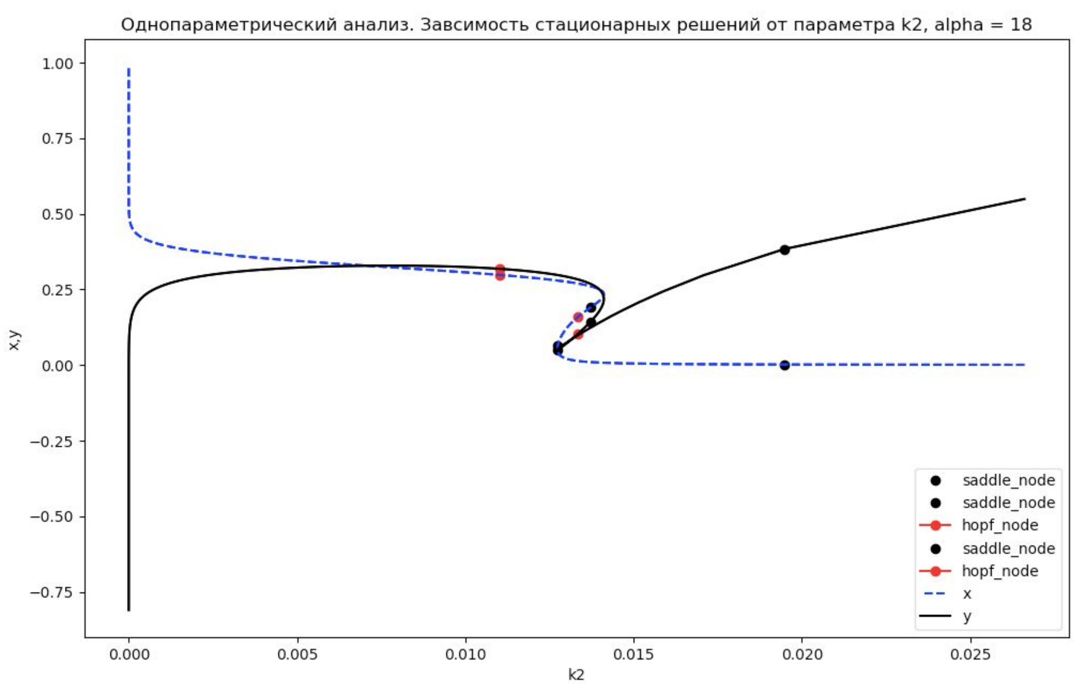
Однопараметрический анализ. Завсимость стационарных решений от параметра k2, k3 = 100
saddle_node
saddle_node
hopf_node
hopf_node
x
y
x,y
k2
1.00
0.75
0.50
0.25
0.00
−0.25
−0.50
−0.75
0.000
0.002
0.004
0.006
0.008
0.010
0.012
0.014

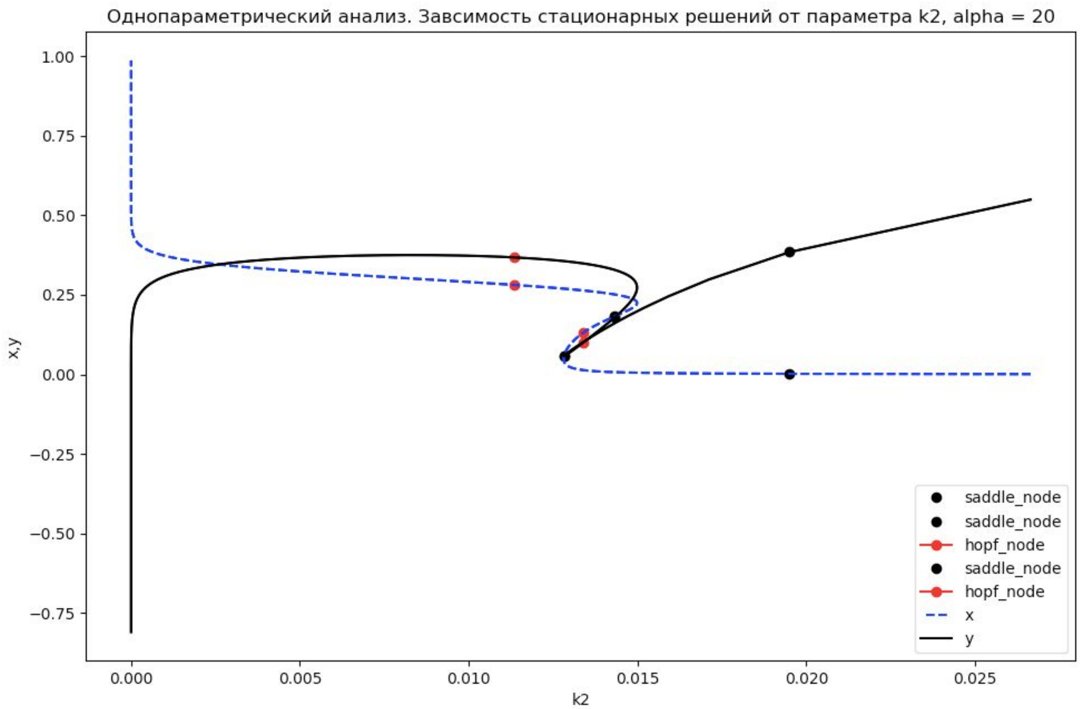
Ниже представлены результаты однопараметрического анализа по параметру k_2 при разных значениях параметра α. Значения остальных параметров берутся из базового набора:

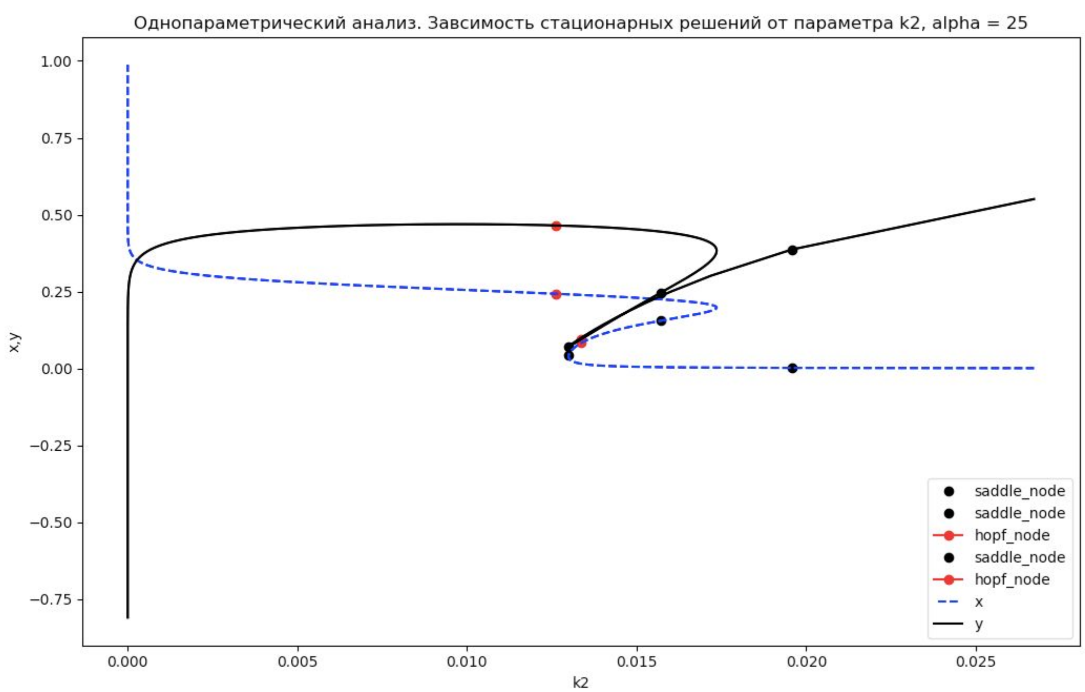
$$k_1 = 0.012,\ k_{-1} = 0.01,\ k_{-2} = 10^{-9},\ k_3{}^0 = 10$$




Однопараметрический анализ. Завсимость стационарных решений от параметра k2, alpha = 15
x,y
k2
saddle_node
saddle_node
saddle_node
hopf_node
hopf_node
x
y


Однопараметрический анализ. Завсимость стационарных решений от параметра k2, alpha = 18
x,y
k2
saddle_node
saddle_node
hopf_node
saddle_node
hopf_node
x
y


Однопараметрический анализ. Завсимость стационарных решений от параметра k2, alpha = 20
x,y
k2
saddle_node
saddle_node
hopf_node
saddle_node
hopf_node
x
y

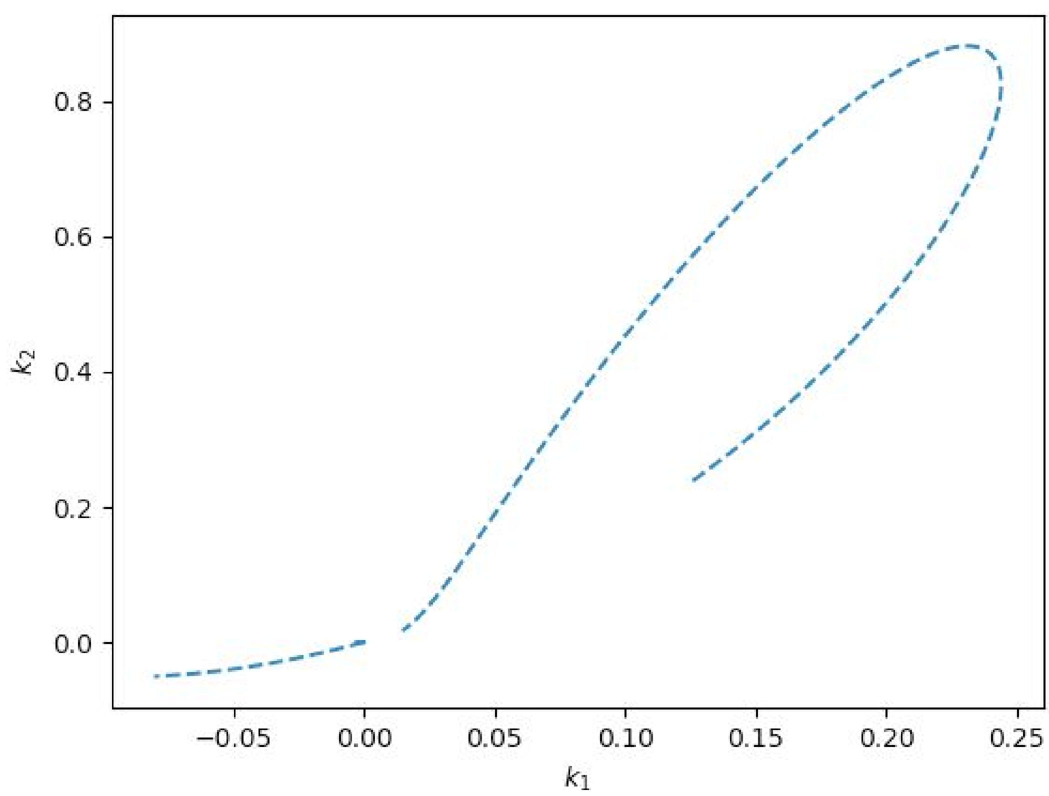

Однопараметрический анализ. Завсимость стационарных решений от параметра k2, alpha = 25
x,y
k2
saddle_node
saddle_node
hopf_node
saddle_node
hopf_node
x
y

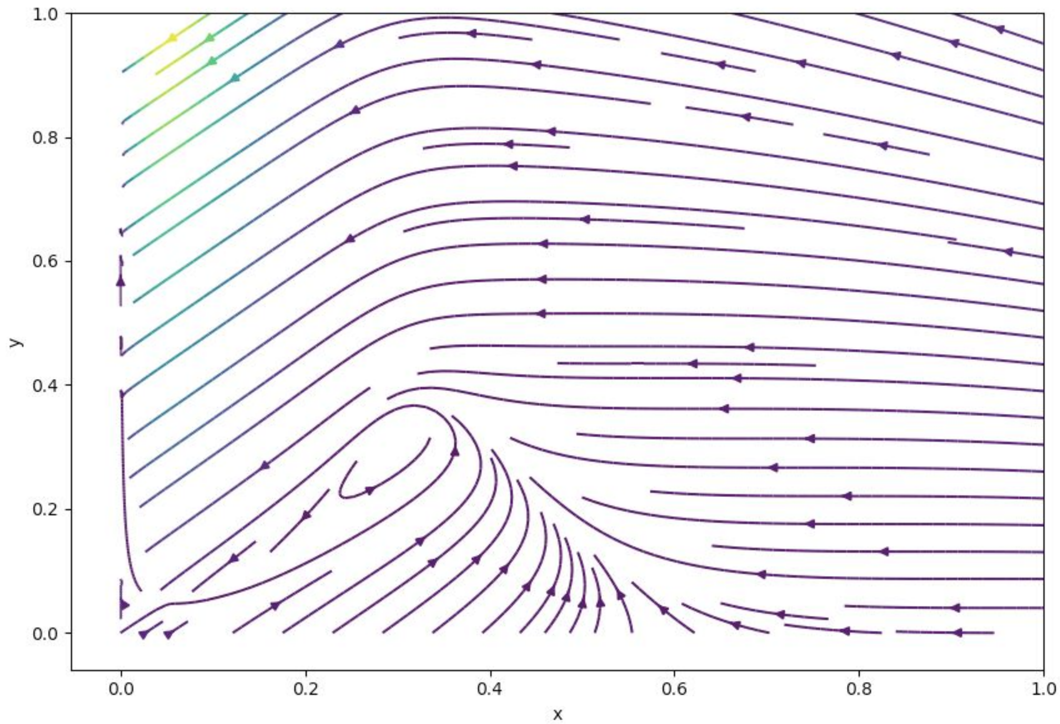
Двухпараметрический анализ $(k1, k2)$

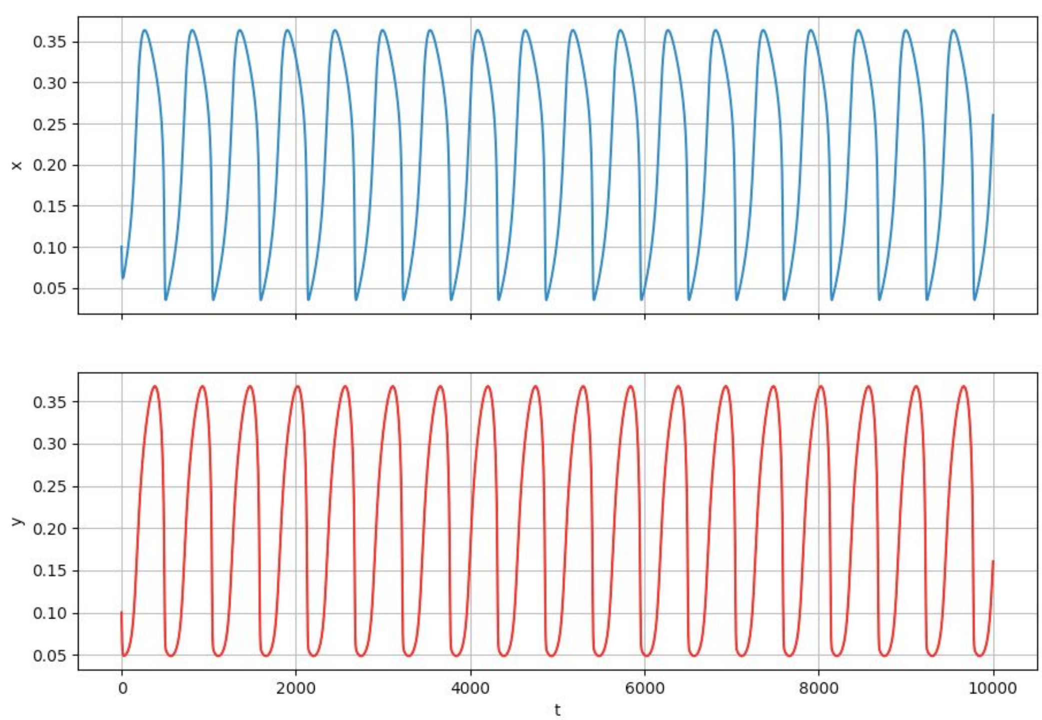
На плоскости параметров $(k1, k2)$ построим параметрический портрет системы: для этого необходимо построить линии кратности и нейтральности. Дописав для системы стационаров (1),(2) условие вырожденности матрицы Якоби, получим линию кратности. Если допишем условие равенства нулю следа матрицы Якоби, получим линию нейтральности. Решение выходит на колебательный режим при базовом наборе параметров:

$$\alpha = 18,\ k_1 = 0.012,\ k_{-1} = 0.01,\ k_{-2} = 10^{-9},\ k_3{}^0 = 10,\ k_2 = 0.012$$

Ниже представлены параметрический портрет, фазовый портрет и колебания соответственно при базовом наборе параметров.




1.0
0.8
0.6
0.4
0.2
0.0
y
0.0
0.2
0.4
0.6
0.8
1.0
x


0.35
0.30
0.25
0.20
0.15
0.10
0.05
x
0.35
0.30
0.25
0.20
0.15
0.10
0.05
y
0
2000
4000
6000
8000
10000
t

Приложение

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from matplotlib.legend_handler import HandlerLine2D
from sympy import Symbol, solve, lambdify, Matrix, simplify
import sympy as smp
from scipy.integrate import odeint

#переменные
x = Symbol("x", Positive=True)
y = Symbol("y", Positive=True)
k1 = Symbol('k1', Positive=True)
k2 = Symbol('k2', Positive=True)
k_1 = Symbol('k_1', Positive=True)
k_2 = Symbol('k_2', Positive=True)
k3 = Symbol('k3', Positive=True)
alpha = Symbol('alpha', Positive=True)

#значения
alpha_value = 18.0
k1_value = 0.012
k2_value = 0.012
k_1_value = 0.01
k_2_value = 10**(-9)
k3_value = 10.0 #k30

#Однопараметрический анализ 2 - значения
alpha_range = [10,15,18,20,25]
k3_range = [1,5,10,50,100]

#Система уравнений для поиска стационарных состояний
equation_1 = k1 * (1 - x - y)- k_1 * x - x * y * k3 *(1-x)**alpha
equation_2 = k2 * (1 - x - y) ** 2 - k_2 * y ** 2 - x * y * k3 *(1-x)**alpha
solution = solve([equation_1, equation_2], y, k2)
y_sol = solution[0][0] #y(x)
k2_sol = solution[0][1] #k2(x)
print('k2_sol', k2_sol)
a11 = -k_1 - k1 - k3*y*((1-x)**alpha- x*alpha*(1-x)**(alpha-1))
```

```
a12 = -k1- k3*x*(1-x)**alpha
a21 = -k2 - k3*y*((1-x)**alpha - x*alpha*(1-x)**(alpha-1))
a22 = -2*k_2*y - k2 - k3*x*(1-x)**alpha

#матрица Якоби
#matrix_A = Matrix([equation_1, equation_2])
matrix_A = Matrix([equation_1, equation_2])
matrix_variables = Matrix([x, y]) #матрица Якоби
jacobian_ = matrix_A.jacobian(matrix_variables) #Якобиан
det_A = jacobian_.det() #определитель матрицы на стационаре
print(det_A)
trace_A = jacobian_.trace() #след матрицы
S_A = lambdify((x,y,k1,k_1,k2,k_2,k3,alpha),trace_A)
delta_A = lambdify((x,y,k1,k_1,k2,k_2,k3,alpha),det_A)

y_func = lambdify((x,k1,k_1,k3,alpha),y_sol)
k2_func = lambdify((x,y,k1,k_1,k_2,k3,alpha),k2_sol)
x_range=np.linspace(0.001,0.987,1000)
N = np.size(x_range)
k2_f = np.zeros(N)
y_f = np.zeros(N)

bifurcation_point = []

def parametres_portrait():
   #линия нейтральности S_A = 0
   #линия кратности delta_A = 0
   #k2_new = k2_sol.subs(y,y_sol)
   sol_k2_trace = solve(trace_A.subs(y,y_sol),k2)[0] #выражаем k2 из следа = 0
   k1_sol_new = solve(sol_k2_trace - k2_sol,k1)[0] #приравниваем k2 из одного
уравнение к k2 из следа, получаем k1
   k2_sol_new = k2_sol.subs(k1,k1_sol_new)
   k1_ot_x_trace = lambdify((x, k_1, k_2, k3, alpha),k1_sol_new, 'numpy')
   k2_ot_x_trace = lambdify((x, k_1, k_2, k3, alpha), k2_sol_new, 'numpy')

plt.plot(k1_ot_x_trace(x_range,k_1_value,k_2_value,k3_value,alpha_value),k2_ot_x_
trace(x_range,k_1_value,k_2_value,k3_value,alpha_value),linestyle='--',
linewidth=1.5, label='neutral')
   plt.xlabel(r'$k_1$')
```

```
   plt.ylabel(r'$k_2$')
   plt.show()

   #det_A_ = det_A.subs(y,y_sol)
   sols = solve(det_A.subs(y,y_sol),k2) #выражаем k1 из определителя = 0
   sol_k2_det_ = sols[0]
   sol_k1_det = solve(sol_k2_det_ - k2_sol, k1)[0]
   sol_k2_det = k2_sol.subs(k1,sol_k1_det)
   sol_k1_det_func = lambdify((x,k_1,k_2,k3,alpha),sol_k1_det)
   sol_k2_det_func= lambdify((x,k_1,k_2,k3,alpha),sol_k2_det)

plt.plot(sol_k1_det_func(x_range,k_1_value,k_2_value,k3_value,alpha_value),sol_k2
_det_func(x_range,k_1_value,k_2_value,k3_value,alpha_value), linestyle='--',
linewidth=1.5, label='neutral')
   plt.show()

def analysis_k2(elem, k3a):
   global k3_value
   global alpha_value
   if k3a == 0:
       k3_value = elem
   if k3a == 1:
       alpha_value = elem
   fl = 0
   fl_delta = 0
   fl_di = 0
   for i in range(N):
       cur_y = y_func(x_range[i],k1_value,k_1_value,k3_value,alpha_value)
       cur_k2 =
k2_func(x_range[i],cur_y,k1_value,k_1_value,k_2_value,k3_value,alpha_value)
       k2_f[i] = cur_k2
       y_f[i] = cur_y
       sa = S_A(x_range[i], cur_y,
k1_value,k_1_value,k2_value,k_2_value,k3_value,alpha_value)
       deltaa =
delta_A(x_range[i],cur_y,k1_value,k_1_value,k2_value,k_2_value,k3_value,alpha_val
ue)
       di = sa*sa - 4*deltaa
       if sa < 0:
```

```
            if fl != 0 and fl == 1:
                #print(x_range[i], cur_y)
                bifurcation_point.append([x_range[i],cur_y])
                plt.plot(k2_f[i],x_range[i],'r', marker='o', label="hopf_node")
                plt.plot(k2_f[i],y_f[i],'r', marker='o')
            fl = -1
            #print ('меньше нуля',i, sa, cur_y, cur_k2, fl)
        else:
            if fl != 0 and fl == -1:
                #print(x_range[i], cur_y)
                bifurcation_point.append([x_range[i],cur_y])
                plt.plot(k2_f[i],x_range[i],'r', marker='o', label="hopf_node")
                plt.plot(k2_f[i],y_f[i],'r', marker='o')
            fl = 1
            #print('больше нуля',i, sa, cur_y, cur_k2, fl)

        if deltaa < 0:
            if fl_delta != 0 and fl_delta == 1:
                #print ('определитель меньше нуля',i, deltaa, cur_y, cur_k2, fl)
                plt.plot(k2_f[i],x_range[i],'k*', marker='o', label="saddle_node")
                plt.plot(k2_f[i],y_f[i],'k*', marker='o')
            fl_delta = -1
        else:
            if fl_delta != 0 and fl_delta == -1:
                #print('определитель больше нуля',i, deltaa, cur_y, cur_k2, fl)
                plt.plot(k2_f[i],x_range[i],'k*', marker='o', label="saddle_node")
                plt.plot(k2_f[i],y_f[i],'k*', marker='o')
            fl_delta = 1
    line1, = plt.plot(k2_f, x_range, 'b--', label="x")
    line2, = plt.plot(k2_f, y_f, 'k', label="y")

    plt.legend(handler_map={line1: HandlerLine2D(numpoints=4)})
    if k3a == 0:
        plt.title('Однопараметрический анализ. Завсимость стационарных решений от
параметра k2, k3 = ' + str(k3_value))
    else:
        plt.title('Однопараметрический анализ. Завсимость стационарных решений от
параметра k2, alpha = ' + str(alpha_value))
    plt.plot(k2_f,x_range, 'b--')
```

```
    plt.plot(k2_f,y_f,'k')
    plt.xlabel('k2')
    plt.ylabel('x,y')
    plt.show()

def solve_system(init, dt, iterations):
    k1_value = 0.012
    k2_value = 0.012
    func_1 = lambdify((x, y, k1, k_1, k3,alpha), equation_1)
    func_2 = lambdify((x, y, k2, k_2, k3,alpha), equation_2)

    def list_of_functions(xy,t):
        return
[func_1(xy[0],xy[1],k1_value,k_1_value,k3_value,alpha_value),func_2(xy[0],xy[1],k
2_value,k_2_value,k3_value,alpha_value)]

    t = np.arange(iterations) * dt
    return odeint(list_of_functions, init, t), t

def phase_portrait():
    func_1 = lambdify((x, y, k1, k_1, k3,alpha), equation_1)
    func_2 = lambdify((x, y, k2, k_2, k3,alpha), equation_2)
    Y, X = np.mgrid[0:1:3000j, 0:1:3000j]
    U = func_1(X, Y, k1_value, k_1_value, k3_value,alpha_value)
    V = func_2(X, Y, k2_value, k_2_value, k3_value,alpha_value)
    velocity = np.sqrt(U*U + V*V)
    plt.streamplot(X, Y, U, V, density = [2.5, 0.8], color=velocity)
    plt.xlabel('x')
    plt.ylabel('y')
    plt.show()

#----------------------ОДНОПАРАМЕТРИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ПО
K2--------------------------------
#for elem in k3_range:
#    analysis_k2(elem,0)

#for elem in alpha_range:
#   analysis_k2(elem,1)
```

```
#----------------------ДВУХПАРАМЕТРИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ПО
K1,K2--------------------------------
#parametres_portrait()
#phase_portrait()
#колебания
res, times = solve_system([0.1, 0.1], 1e-2, 1e6)
ax = plt.subplot(211)
plt.plot(times, res[:, 0])
plt.setp(ax.get_xticklabels(), visible=False)
plt.ylabel('x')
plt.grid()
ax1 = plt.subplot(212, sharex=ax)
plt.plot(times, res[:, 1], color='red')
plt.xlabel('t')
plt.ylabel('y')
plt.grid()
plt.show()
```