

**РАЗДЕЛ I.  
ДИССЕМИНАЦИЯ ИННОВАЦИОННОГО  
ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО ОПЫТА**

**УДК 004.94**

**КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СИСТЕМЫ НОСЕ-ГУВЕРА**

**Осипов Геннадий Сергеевич**  
д.т.н., зав кафедрой информатики  
**Вашакидзе Нателла Семеновна**  
**Филиппова Галина Викторовна**  
**Рауш Наталья Леонидовна**  
старшие преподаватели  
ФГБОУ ВО «Сахалинский  
государственный университет»

**Аннотация:** В терминах современного формально-математического аппарата проведено качественное исследование эволюции обобщенной динамической системы (аттрактора) Носе-Гувера, которая в зависимости от параметров является консервативной или диссипативной. Достоверность результатов качественного анализа подтверждается компьютерным и имитационным экспериментами на базе современных исследовательских платформ Wolfram Mathematica и Anylogic, которые обеспечивает реализацию всех известных в настоящее время парадигм моделирования.

Компьютерное моделирование выполнено для широкого круга экспериментов при различных параметрах исследуемой модели. Выполнена визуализация результатов анализа модели в виде интегральных и фазовых траекторий на плоскости и в пространстве.

**Ключевые слова:** Динамическая система, компьютерное и имитационное моделирование, фазовые траектории.

## COMPUTER SIMULATION OF THE NOSE-HOOVER SYSTEM

**Osipov Gennady Sergeyevich**  
**Vashakidze Natella Semyonovna**  
**Filippova Galina Viktorovna**  
**Rausch Natalia Leonidovna**

**Abstract:** In terms of the modern formal mathematical apparatus, a qualitative study of the evolution of the generalized dynamic system (attractor) Nosé-Hoover, which, depending on the parameters, is conservative or dissipative, was carried out. The validity of the results of qualitative analysis is confirmed by computer and simulation experiments based on modern research platforms Wolfram Mathematica and Anylogic, which provide the implementation of all currently known modeling paradigms.

Computer simulations were performed for a wide range of experiments with different parameters of the studied model. Results of model analysis are visualized in the form of integral and phase trajectories on plane and in space.

**Key words:** Dynamic system, computer and simulation modeling. phase trajectories.

### **Введение.**

Современный уровень развития инновационных исследований в различных сферах теоретических и прикладных проблем связан, в основном, с внедрением символьных, интеллектуальных и самоорганизующихся систем анализа и принятия решений, позволяющих реализовать синергию базовых усилий различных методов и синтеза фундаментальных концепций построения, эволюции и управления сложными динамическими системами.

Одной из важных и практически значимых, но малоизученных динамических систем является, так называемый, термостат Носе-Гувера.

Трёхмерная нелинейная динамическая система, реализованная на основе аттрактора Носе-Гувера (Attractor Nose-Hoover) – используется для моделирования различных физических, химических и биологических процессов. Хотя тепловая ванна термостата Носе-Гувера состоит всего из одной воображаемой частицы, моделируемые системы достигают реалистичного состояния постоянной температуры (канонический ансамбль). Поэтому

терморегулятор Носе-Гувера используется как один из наиболее точных и эффективных методов моделирования молекулярной динамики при постоянной температуре (как обратимая во времени термостатическая система). С целью достижения канонического распределения фиксируется средняя температура моделируемой системы, но при этом время учитывается флуктуация температуры с распределение, которой типично для канонического распределения [1].

Целью настоящего исследования является выполнение компьютерного моделирования и исследование аттрактора Носе-Гувера в системах имитационного моделирования AnyLogic (поддерживающей все известные парадигмы моделирования) и символьной математики (компьютерной алгебры) Wolfram Mathematica.

### **1. Постановка задачи.**

Исследуется обобщенный аттрактор Носе-Гувера [1]:

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = -cx + ay, \\ \frac{dy}{dt} = -ax + yz, \quad (a, b, c, d \geq 0) \\ \frac{dz}{dt} = d - y^2 - bz. \end{cases} \quad (1)$$

Очевидно, в нелинейной динамической системе (1) имеется три стационарные точки  $E(\bar{x}, \bar{y}, \bar{z})$ :

$$E_0\left(0, 0, \frac{d}{b}\right); E_{1,2}\left(\pm \frac{a\sqrt{-a^2b + cd}}{c^{3/2}}, \pm \frac{\sqrt{-a^2b + cd}}{\sqrt{c}}, \frac{a^2}{c}\right).$$

Требуется провести качественный и количественный анализ поведения системы в окрестности стационарных точек и определить характер влияния параметров системы на ее устойчивость.

### **2. Линеаризация.**

Для исследования устойчивости проведем линеаризацию системы дифференциальных уравнений (1).

Положим

$$x = \bar{x} + \tilde{x}, \quad y = \bar{y} + \tilde{y}, \quad z = \bar{z} + \tilde{z},$$

где  $(\bar{x}, \bar{y}, \bar{z})$  – координаты стационарных точек, а  $(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z})$  – малые отклонения от положения покоя.

Очевидно

$$\begin{aligned}\dot{\tilde{x}} &= -c(\bar{x} + \tilde{x}) + a(\bar{y} + \tilde{y}) = \cancel{c\bar{x}} - c\tilde{x} + \cancel{a\bar{y}} + a\tilde{y} = -c\tilde{x} + a\tilde{y}, \\ \dot{\tilde{y}} &= -a(\bar{x} + \tilde{x}) + (\bar{y} + \tilde{y})(\bar{z} + \tilde{z}) = \cancel{a\bar{x}} - a\tilde{x} + \cancel{\bar{y}\bar{z}} + \tilde{y}\bar{z} + \bar{y}\tilde{z} + \underbrace{\tilde{y}\tilde{z}}_{\rightarrow 0}, \\ \dot{\tilde{z}} &= d - (\bar{y} + \tilde{y})^2 - b(\bar{z} + \tilde{z}) = \cancel{d} - \cancel{\bar{y}^2} - 2\bar{y}\tilde{y} - \underbrace{\tilde{y}^2}_{\rightarrow 0} - \cancel{b\bar{z}} - b\tilde{z} = -2\bar{y}\tilde{y} - b\tilde{z}.\end{aligned}$$

Получили следующую линейную систему

$$\begin{cases} \dot{\tilde{x}} = -c\tilde{x} + a\tilde{y} \\ \dot{\tilde{y}} = -a\tilde{x} + \bar{z}\tilde{y} + \bar{y}\tilde{z} \\ \dot{\tilde{z}} = -2\bar{y}\tilde{y} - b\tilde{z} \end{cases} \quad (2)$$

Якобиан системы (2) имеет вид:

$$J = \begin{pmatrix} -c & a & 0 \\ -a & \bar{z} & \bar{y} \\ 0 & -2\bar{y} & -b \end{pmatrix} \quad (3)$$

### 3. Исследование поведения системы в «нулевой» стационарной точке

$E_0$

В данном случае якобиан (3) упростится и запишется так:

$$J_0 = \begin{pmatrix} -c & a & 0 \\ -a & \frac{d}{b} & 0 \\ 0 & 0 & -b \end{pmatrix}.$$

Определитель и след матрицы  $J_0$ :

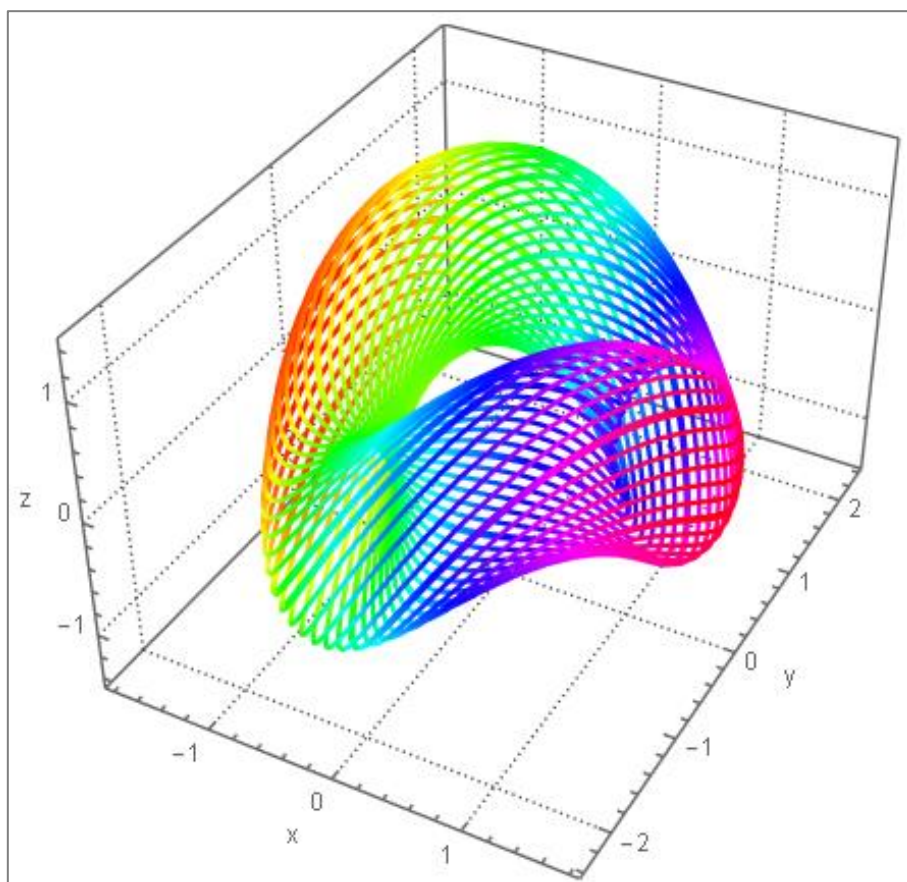
$$\det(J_0) = -a^2b + cd \quad \text{tr}(J_0) = -b - c + \frac{d}{b}.$$

Собственные числа якобиана найдутся в виде:

$$\lambda_1 = -b; \lambda_{2,3} = \frac{-bc + d \pm \sqrt{-4a^2b^2 + b^2c^2 + 2bcd + d^2}}{2b}.$$

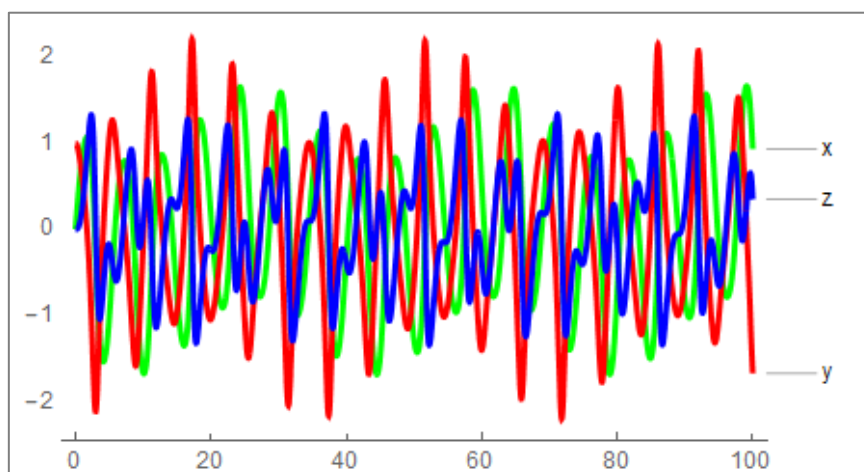
При  $c=0$  система консервативна. На рис. 1 приведен пример фазового пространства при начальных условиях:

$$(x_0, y_0, z_0) = (0.0, 1.0, 0.0)$$



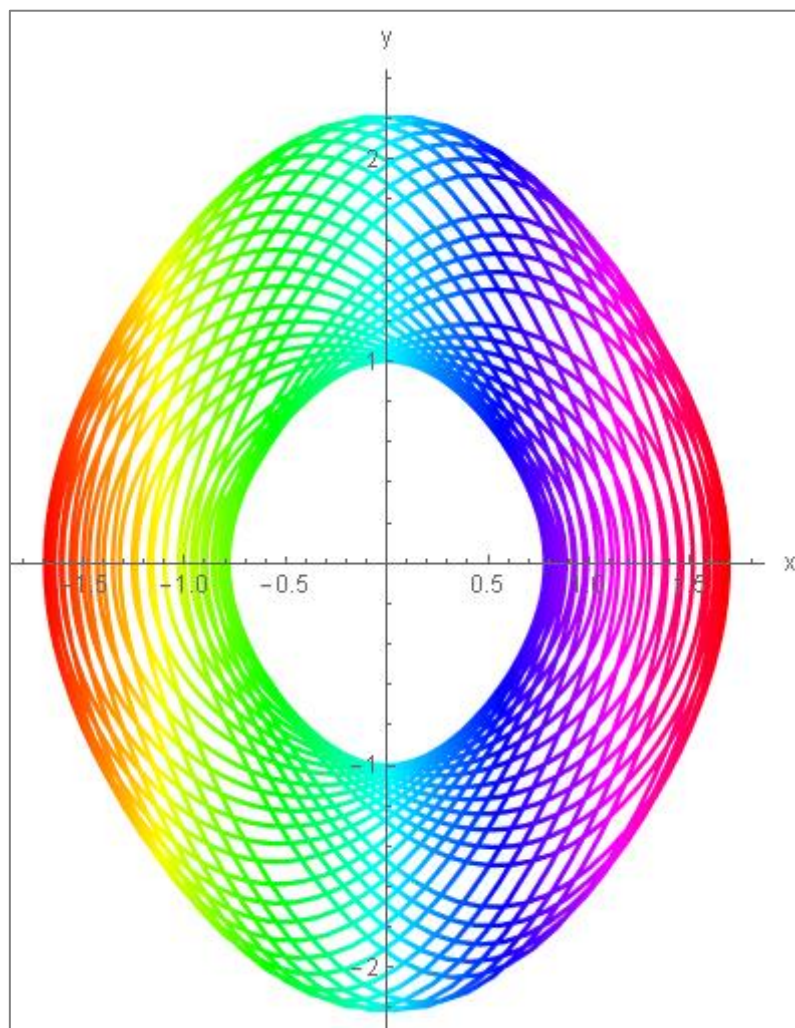
**Рис. 1. Траектории системы в трехмерном пространстве**

На рис.2 представлены начальные фрагменты решений системы дифференциальных уравнений (1):  $x = x(t)$ ,  $y = y(t)$ ,  $z = z(t)$ .



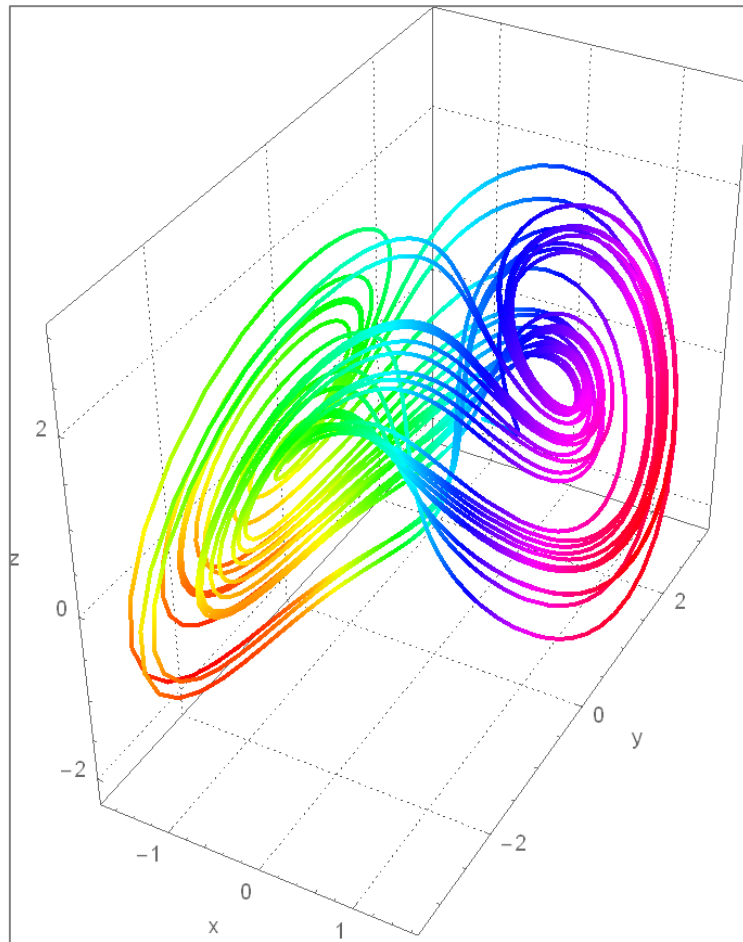
**Рис. 2. Интегральные кривые**

На рис. 3 приведена фазовая траектория системы на плоскости  $xOy$ .



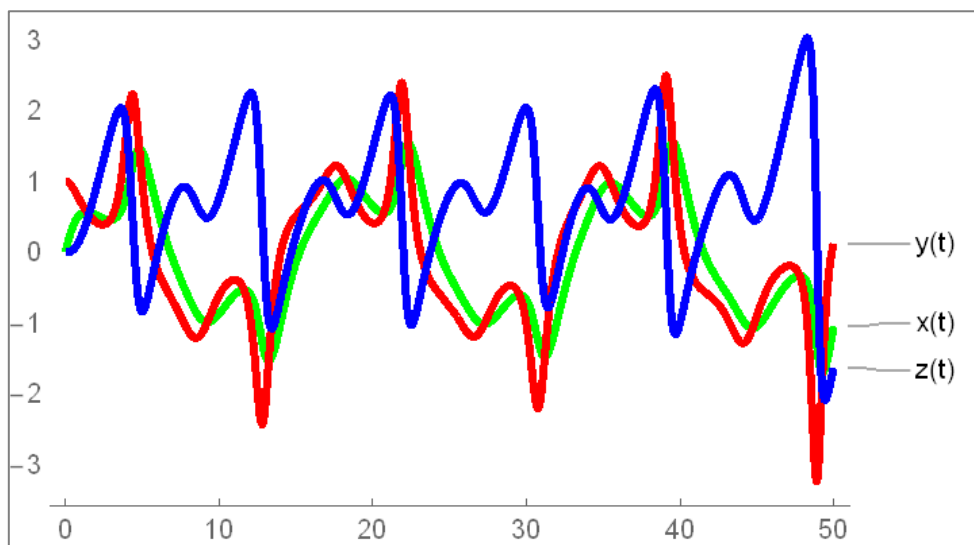
**Рис. 3. Пример фазового портрета консервативной системы**

При  $c=1$  система становится явно выраженной диссипативной структурой, подобной системе Лоренца [2]. На рис. 4 показано соответствующее фазовое пространство.



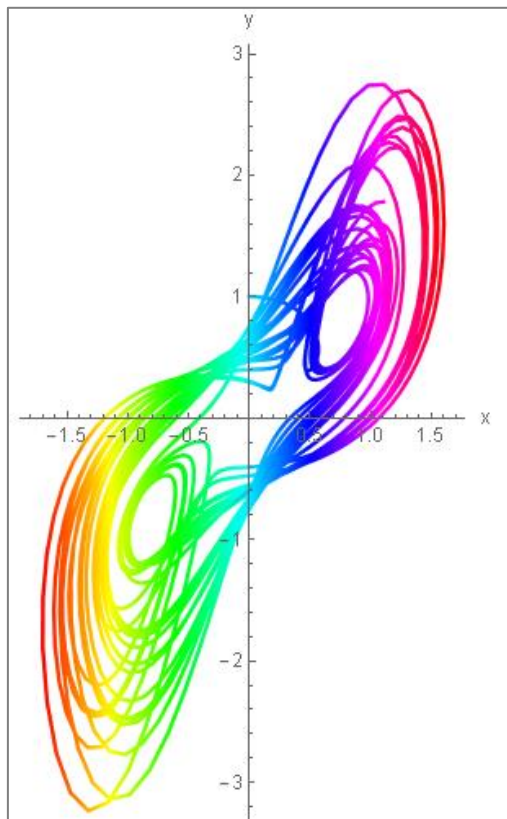
**Рис. 4. Траектории диссипативной системы в трехмерном пространстве**

На рис. 5 представлен начальный фрагмент кривых  $x=x(t)$ ,  $y=y(t)$  и  $z=z(t)$ .



**Рис. 5. Интегральные кривые диссипативной системы**

На рис. 6 показана траектория моделируемой системы, которая становится подобной аттрактору Лоренца.



**Рис. 6. Пример фазового портрета диссипативной системы**

#### **4. Исследование системы в окрестности стационарных точек $E_{1,2}$**

Для Якобиана (3) определитель и след определяются следующими выражениями:

$$\det(J) = -a^2b - 2c\bar{y}^2 + bc\bar{z} \quad \text{tr}(J) = -b - c + \bar{z}.$$

Характеристическое уравнение будет иметь вид:

$$\lambda^3 + p\lambda^2 + q\lambda + r = 0, \tag{4}$$

где:

$$p = b + c - \bar{z},$$

$$q = a^2 + bc + 2\bar{y}^2 - \bar{z}(b + c),$$

$$r = 2\bar{y}^2c + a^2b - bc\bar{z}.$$

Собственные числа характеристического уравнения (4) находятся по следующим формулам:



$$\lambda_1 = -\frac{p}{3} - \frac{\sqrt[3]{2}(-p^2 + 3q)}{3\sqrt[3]{-2p^3 + 9pq - 27r + 3\sqrt{3}\sqrt{-p^2q^2 + 4q^3 + 4p^3r - 18pqr + 27r^2}}} +$$

$$+ \frac{1}{3}\sqrt[3]{\frac{-2p^3 + 9pq - 27r + 3\sqrt{3}\sqrt{-p^2q^2 + 4q^3 + 4p^3r - 18pqr + 27r^2}}{2}},$$

$$\lambda_{2,3} = -\frac{p}{3} + \frac{(1 \pm i\sqrt{3})(-p^2 + 3q)}{32^{2/3}\sqrt[3]{-2p^3 + 9pq - 27r + 3\sqrt{3}\sqrt{-p^2q^2 + 4q^3 + 4p^3r - 18pqr + 27r^2}}} -$$

$$- \frac{(1 \mp i\sqrt{3})}{6}\sqrt[3]{\frac{-2p^3 + 9pq - 27r + 3\sqrt{3}\sqrt{-p^2q^2 + 4q^3 + 4p^3r - 18pqr + 27r^2}}{2}}$$

Например, при параметрах

$$\{a, b, c, d\} = \{1.0, 1.0, 5.0, 5.0\}$$

от исходного состояния, описываемого, например, координатами:

$$(x_0, y_0, z_0) = (\pm 0.94, \pm 2.69, 0.0)$$

система достаточно быстро переходит в ближайшую из стационарных точек (см. рис. 7)

$$E_{1,2} \left( \pm \frac{a\sqrt{-a^2b + cd}}{c^{3/2}}, \pm \frac{\sqrt{-a^2b + cd}}{\sqrt{c}}, \frac{a^2}{c} \right) = E_{1,2} (\pm 0.44, \pm 2.19, 0.2)$$

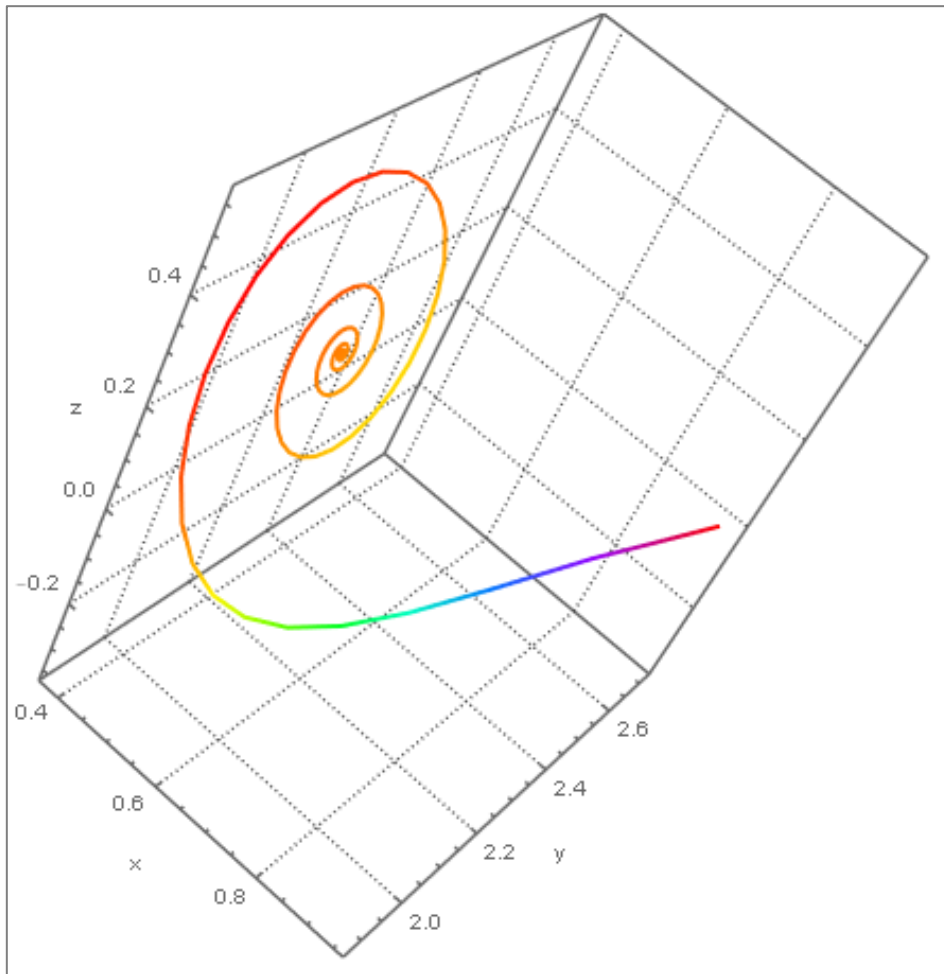


Рис. 7. Фазовое пространство системы

На рис. 8 приведены начальные фрагменты кривых  $x=x(t)$ ,  $y=y(t)$  и  $z=z(t)$ .

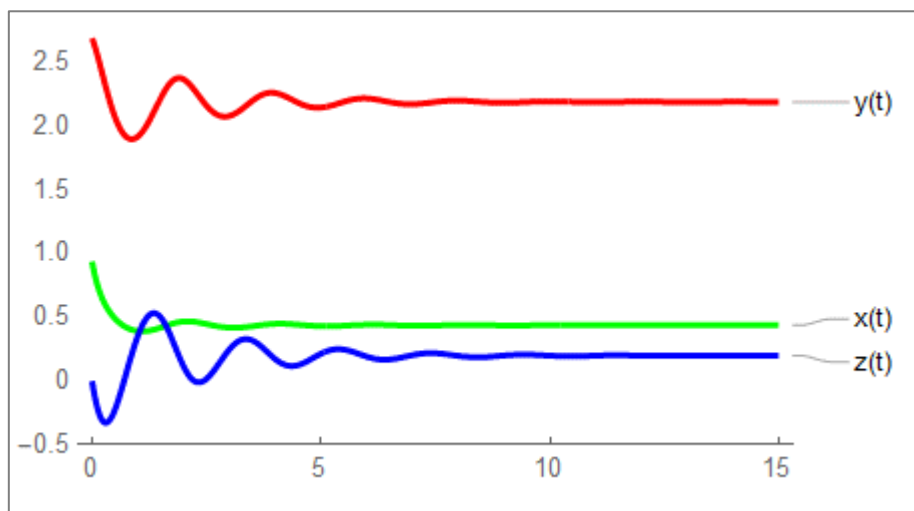


Рис. 8. Интегральные кривые

На рис. 9 показана типовая фазовая траектория системы в плоскости  $yOz$ , представляющая собой закручивающуюся спираль.

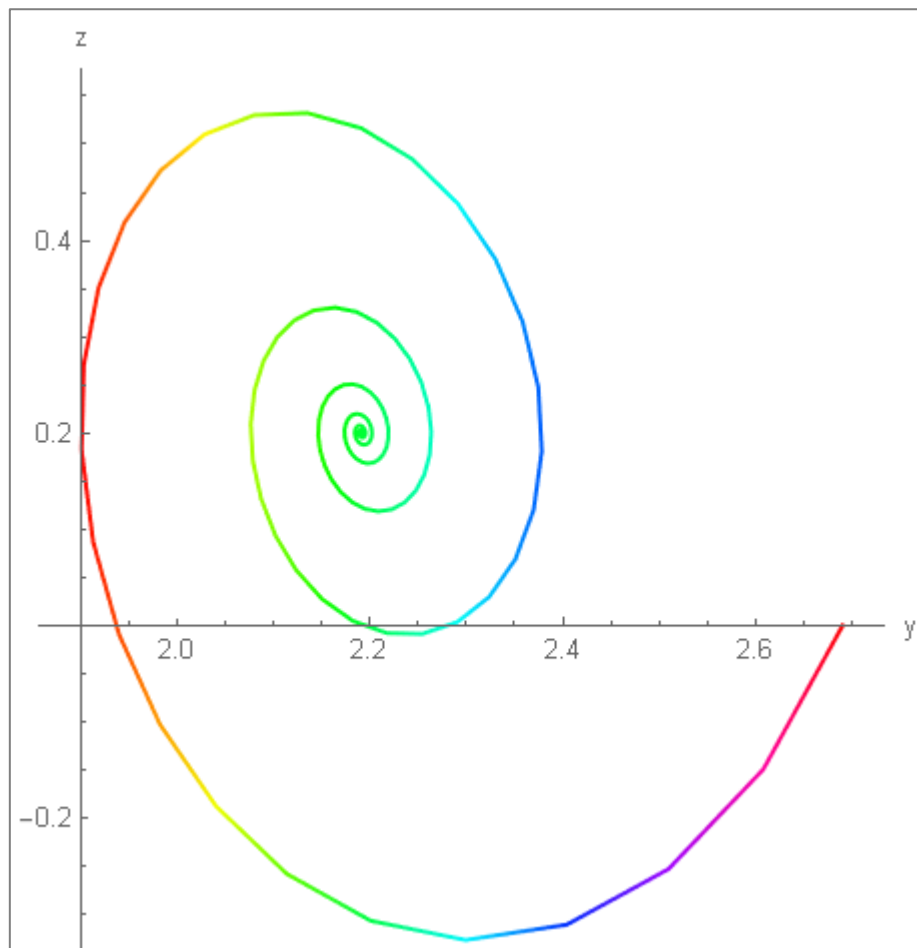
Направление закручивания можно определить, например в начальной точке. Здесь (при  $z = z_0 = 0$ )

$$\frac{dz}{dt} = d - y^2.$$

Правая часть дифференциального уравнения будет отрицательной:

$$d - y^2 = d - y_0^2 = 5 - (2.69)^2 < 0,$$

значит координат  $z$  будет убывать, т.е. спираль закручивается по часовой стрелки.



**Рис. 9. Фазовый портрет системы в плоскости  $yOz$**

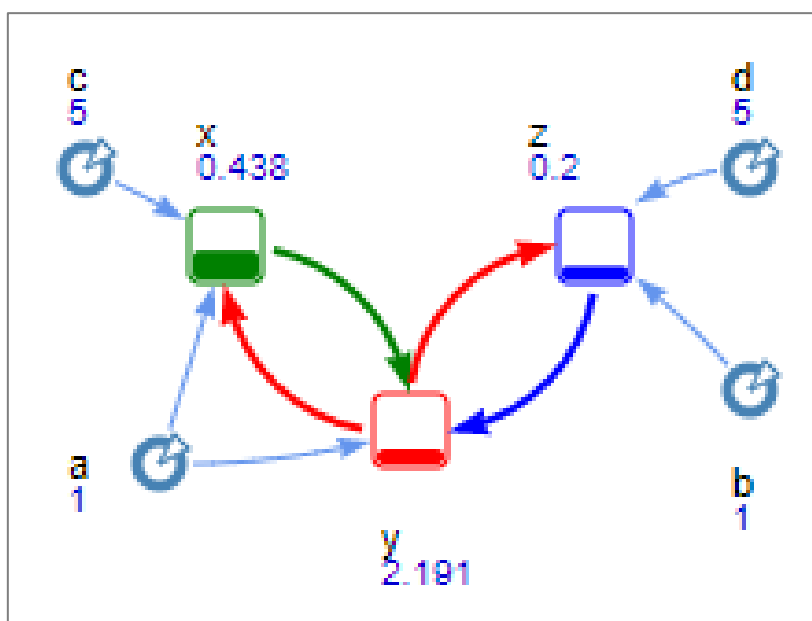
**5. Основы постановки имитационного эксперимента по моделированию аттрактора Носе-Гувера в системе AnyLogic.**

Использование пакета имитационного моделирования AnyLogic, в котором реализованы все современные парадигмы моделирования, позволяет:

1. проводить имитационный эксперимент, непрерывно наблюдая за поведением системы в реальном масштабе времени и имея возможность оперативно изменять настраиваемые параметры модели с целью оценивая их влияния на дальнейшее поведение системы в фазовом пространстве;

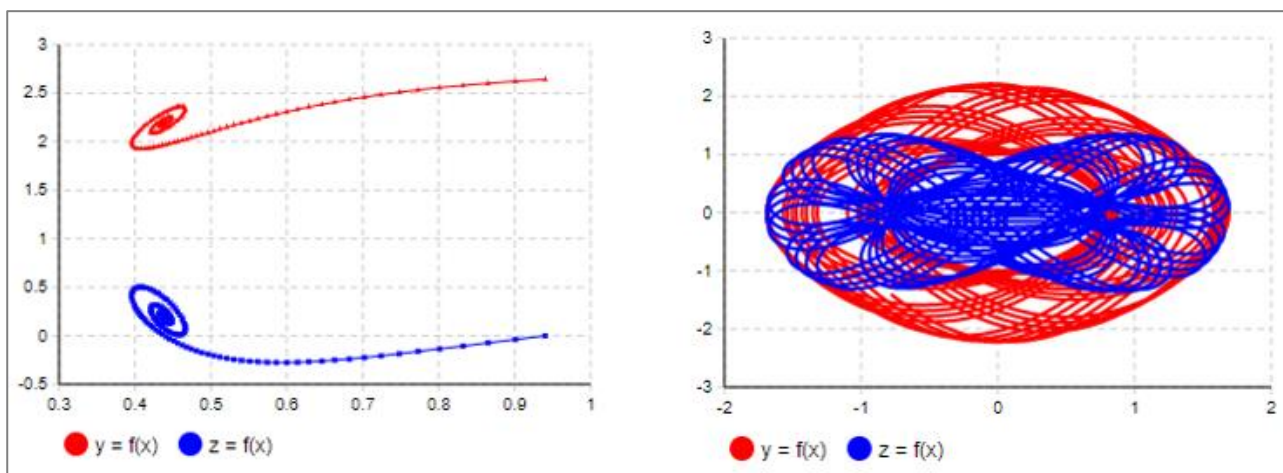
2. осуществлять параметрический и оптимизационный анализы, определяя наиболее приемлемые (с позиций выбранного функционала эффективности или качества переходных процессов) характеры поведения системы в зависимости от варьируемых параметров системы.

Расчетная модель системы в универсальной среде имитационного моделирования AnyLogic представлена на рис. 10.

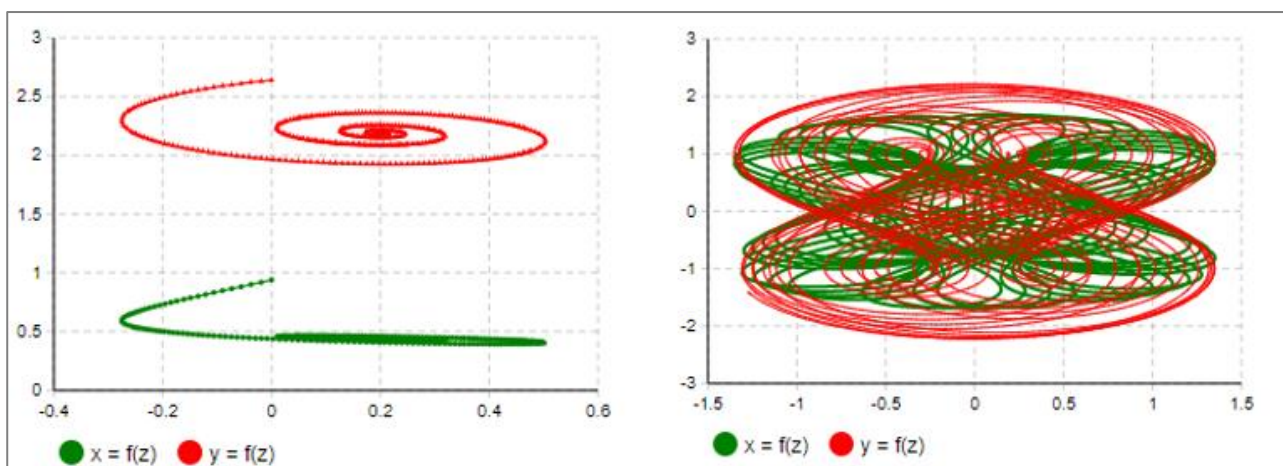


**Рис. 10. Расчетная модель системы**

Результаты имитационного эксперимента для двух режимов – в стационарных точках  $E_{1,2}$  и  $E_0$  (консервативный вариант) представлены на рис. 11 и 12.



**Рис. 11. Фазовые плоскости  $xOy$  и  $xOz$**



**Рис. 12. Фазовые плоскости  $zOx$  и  $zOy$**

### **Выводы.**

Реализованы базовые основы качественного анализа поведения систем с аттрактором.

Изложена методология современной концепции компьютерного моделирования сложных консервативных и диссипативных динамических систем.

Практическая апробация полученных зависимостей математического моделирования выполнена в средах систем символьной математики (компьютерной алгебры) и имитационного моделирования с использованием системно-динамической парадигмы моделирования.

Полученные фундаментальные и прикладные аспекты компьютерного моделирования являются унифицированными и могут быть реализованы в

инновационных исследованиях и прогнозировании поведения сложных социально-экономических и технических систем.

### **Список литературы**

1. Игорь Н. фон Бекман Нелинейная динамика сложных систем: теория и практика. URL: <http://profbeckman.narod.ru/NelDin/NelDinText2.pdf> (дата обращения 12.04.2021).

2. Осипов Г.С. Исследование динамической системы Лоренца в среде имитационного моделирования AnyLogic // Инновационное развитие науки: фундаментальные и прикладные проблемы: Монография — 2020. — С. 248-259.

© Г.С. Осипов, Н.С. Вашакидзе, Г.В. Филиппова, Н.Л. Рауш, 2021