

на правах рукописи

БОРИНА Мария Юрьевна

**ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЗМОВ ФОРМИРОВАНИЯ
ПРОСТРАНСТВЕННО-ВРЕМЕННЫХ СТРУКТУР
В РЕАКЦИОННО-ДИФФУЗИОННЫХ СИСТЕМАХ**

01.04.02 – Теоретическая физика

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Москва – 2013

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Физическом институте им. П.Н. Лебедева Российской академии наук (г. Москва)

Научный руководитель:

Полежаев Андрей Александрович,
доктор физико-математических наук

Официальные оппоненты:

Медвинский Александр Берельевич,
доктор физико-математических наук,
профессор, заведующий лабораторией
ФГБУН Институт теоретической и
экспериментальной биофизики РАН

Романовский Юрий Михайлович,
доктор физико-математических наук,
профессор физического факультета
МГУ им. М.В. Ломоносова

Ведущая организация:

ФГБУН Институт прикладной физики
РАН, г. Нижний Новгород

Защита диссертации состоится 16 декабря 2013 г. в 12 часов на заседании Диссертационного совета Д 002.023.02 при Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Физическом институте им. П.Н. Лебедева Российской академии наук по адресу 119991, ГСП-1, г. Москва, Ленинский проспект, д. 53.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Федерального государственного бюджетного учреждения науки Физического института им. П.Н. Лебедева Российской академии наук.

Автореферат разослан _____ 2013г.

Ученый секретарь диссертационного совета
доктор физико-математических наук, профессор



Истомин Яков Николаевич

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы

Самоорганизация, наблюдаемая в широком классе неравновесных систем, является одним из наиболее ярких и удивительных явлений, вызывающих неослабевающий интерес уже в течение достаточно длительного времени. Процессы структурообразования в столь различных областях как физика, химия, биология, экология подчиняются схожим математическим закономерностям, выявлению которых способствует анализ относительно простых реакционно-диффузионных систем. Такие системы демонстрируют возникновение и эволюцию пространственно-временных структур как результат двух процессов: взаимодействия между компонентами (реакции) и диффузии.

К наиболее известным системам типа «реакция-диффузия» по праву можно отнести реакцию Белоусова-Жаботинского, экспериментальному и теоретическому изучению которой посвящено множество работ. Открытая Б.П. Белоусовым и усовершенствованная А.М. Жаботинским химическая система позволяет в лабораторных условиях наблюдать различные явления пространственно-временной самоорганизации, кроме того допускает управление, в том числе с помощью различных режимов освещения. В настоящее время под этим названием объединяется целый класс родственных химических систем, близких по механизму, но различающихся используемыми катализаторами, органическими восстановителями и окислителями. Кроме того предложены системы, сочетающие реакцию Белоусова-Жаботинского с самоорганизующимися матрицами: гелями, мицеллами, полимерами, микроэмульсиями и другими. Наиболее удачной оказалась так называемая БЖ-АОТ система, разработанная группой В.К. Ванага в университете Brandeis (Vanag V.K., Epstein I.R. Phys. Rev. Lett., 87, 228301, 2001). Реакция Белоусова-Жаботинского протекает в обращенной микроэмульсии аэрозоля ОТ. Такая микроэмульсия представляет собой среду - масло, в которой диффундируют, сталкиваются, сливаются и разделяются капли воды нанометрового размера, окруженные монослоем молекул аэрозоля марки ОТ и содержащие БЖ-реагенты (De, Maitra A Colloid Interface Sci., 59, 95-193, 1995). БЖ-АОТ система позволила наблюдать многообразие всевозможных простран-

ственно-временных структур (Ванаг В.К. УФН, 174., 991-1010, 2004). В частности, в ней удалось наблюдать такие новые типы волн, как антиспирали, волновые пакеты, штрихволны, сегментированные спирали, а также колеблющиеся кластеры и локализованные колеблющиеся пятна – осциллоны. К настоящему времени эти структуры экспериментально изучены достаточно досконально. Некоторые из них воспроизведены в численных расчетах на примерах конкретных математических моделей, например, «Брюсселятор», «Орегонатор» или модели ФитцХью-Нагумо.

Несмотря на достигнутый прогресс, еще остается ряд нерешенных вопросов относительно механизмов формирования экспериментально наблюдаемых структур. Выявление этих механизмов и построение соответствующей теории актуальны не только для конкретных химических систем, но и для широкого круга явлений, наблюдаемых в объектах различной природы, в особенности, в биологических системах.

Целью диссертационной работы является исследование механизмов формирования пространственно-временных структур в системах типа «реакция-диффузия». Для достижения указанной цели предполагалось решить следующие задачи:

1. Провести аналитическое исследование условий возникновения диффузионной неустойчивости в трехкомпонентной системе типа «реакция-диффузия».
2. Провести анализ многомодового взаимодействия вблизи волновой бифуркации в многомерной активной среде.
3. Предложить объяснение экспериментально наблюдаемого перехода (Kamigaya A., Vanag V.K., Epstein I.R. Phys. Rev. Lett., 95, 058302, 2002) из режима стоячих волн с длиной волны λ_{sw} в режим бегущих волн с половинной длиной волны: $\lambda_{tw} \cong \lambda_{sw} / 2$.
4. Исследовать механизмы формирования сегментированных волн и спиралей в активных средах.

Научная новизна работы заключается в следующем:

1. Аналитически получены в явном виде условия возникновения диффузионной неустойчивости в трехкомпонентной системе типа «реакция-диффузия» для частного случая диагональной матрицы диффузии.

2. Выявлены режимы, реализуемые в результате многомодового взаимодействия вблизи волновой бифуркации в многомерной активной среде.
3. Предложено объяснение переключения стоячей волны в бегущую, сопровождающегося делением длины волны пополам.
4. Предложены механизмы формирования сегментированных волн и спиралей в активных средах.

Практическая и теоретическая значимость результатов

К настоящему времени двухкомпонентные реакционно-диффузионные системы досконально изучены. Однако реальные системы оказываются намного более сложными. В диссертационной работе исследованы трехкомпонентные системы типа «реакция-диффузия», сочетающие в себе достаточную простоту и многообразие демонстрируемых пространственно-временных режимов. Полученные результаты позволяют продвинуться в понимании процессов и механизмов формирования структур, экспериментально наблюдаемых в химических системах, в частности, в недавно обнаруженных в БЖ-АОТ системе. Кроме того, поскольку структурообразование в разнообразных системах происходит по схожим математическим законам, результаты диссертации могут быть применены к широкому классу неравновесных систем: физических, биологических, экологических и других.

Достоверность результатов Достоверность полученных результатов подтверждается согласованностью результатов теоретического анализа, численного моделирования и экспериментальных данных по исследованиям реакционно-диффузионных систем, а также согласованностью с результатами других авторов.

Основные положения, выносимые на защиту

1. В трехкомпонентной системе типа «реакция-диффузия» для возникновения бифуркации Тьюринга необходимо наличие автокаталитической переменной (присутствие положительного члена на главной диагонали матрицы линеаризации), которая имеет достаточно малый коэффициент диффузии по сравнению с двумя другими. Для развития волновой неустойчивости система должна содержать автокаталитическую переменную, кроме того необходимо, чтобы сумма двух членов на главной диагонали матрицы линеаризации была

положительной, т.е. положительный член главной диагонали должен быть больше по модулю хотя бы одного из двух других членов (при этом сумма всех трех членов отрицательна). Кроме того, требуется, чтобы коэффициент диффузии переменной, соответствующей наименьшему члену на главной диагонали, был существенно больше двух других.

2. В результате многомодового взаимодействия вблизи волновой бифуркации в многомерной активной среде в зависимости от параметра, определяющего силу конкуренции мод, формируются либо квазиодномерные бегущие волны, либо стоячие волны.
3. Переход из режима стоячих волн с длиной волны λ_{sw} в режим бегущих волн с половинной длиной волны: $\lambda_{tw} \cong \lambda_{sw} / 2$ реализуется при выполнении следующих основных условий:
 - стоячая волна возбуждается благодаря суперкритической волновой бифуркации;
 - волна с удвоенным по сравнению со стоячей волной волновым числом устойчива, но может быть возбуждена жестким образом вследствие субкритической волновой бифуркации;
 - имеет место резонанс между первой и второй волной, заключающийся в том, что у волны с удвоенным волновым числом частота также в два раза больше.
4. Формирование сегментированных волн и спиралей в активных средах вызвано одним из следующих механизмов:
 - взаимодействие двух подсистем, одна из которых возбудима, а другая неустойчива по Тьюрингу;
 - «дробление» бегущей волны в окрестности бифуркационной точки коразмерности два, в которой пересекаются границы тьюринговской и волновой неустойчивостей;
 - взаимодействие двух стационарных состояний, возбудимого и обладающего неустойчивостью псевдо Тьюринга.

Личный вклад автора

Все результаты, представленные в диссертационной работе, получены автором лично, либо при его непосредственном участии.

Апробация результатов работы

Отдельные главы диссертационной работы докладывались на семинарах сектора теоретической биофизики ОТФ ФИАН; дважды на аспирантском семинаре ФИАН (2012, 2013); на 18, 19, 20-ой международных конференциях «Математика, компьютер, образование» (2011, 2012, 2013, Пущино/Дубна, Россия); на VIII-ой международной конференции «Mathematical and Theoretical Biology and Annual Meeting of the Society for Mathematical Biology» (2011, Краков, Польша); на XII-ой научной школе «Нелинейные волны» (2012, Нижний Новгород, Россия); на международной конференции «Instabilities and Control of Excitable Networks: From macro- to nano-systems» (2012, Долгопрудный, Россия); на международной Гинзбургской конференции по физике (2012, Москва, Россия); на XXXIII-ей международной конференции «Dynamic Days Europe» (2013, Мадрид, Испания).

По теме диссертации опубликовано 17 научных работ, в том числе 4 статьи в журналах, включённых в перечень ВАК, 2 статьи в сборниках трудов конференций и 11 в тезисах докладов.

Структура и объем работы

Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения и списка литературы. Объем работы составляет 95 страниц текста, включая 31 рисунок и список литературы из 161 наименования.

КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обсуждается актуальность темы диссертации, сформулированы цель и задачи работы, раскрыта научная новизна, практическая и теоретическая значимость полученных результатов, подтверждается их достоверность, приведены положения, выносимые на защиту и сведения об апробации результатов.

Первая глава содержит обзор наиболее важных и интересных публикаций по теме диссертации. Рассмотрены экспериментальные исследования пространственно-временной динамики химических систем. Обсуждаются известные математические модели, предложенные для объяснения возникающих режимов и структур.

Вторая глава посвящена исследованию возникновения диффузионной неустойчивости в трехкомпонентной реакционно-диффузионной системе с диагонально матрицей диффузии

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = f(u, v, w) + D_1 \nabla^2 u, \\ \frac{\partial v}{\partial t} = g(u, v, w) + D_2 \nabla^2 v, \\ \frac{\partial w}{\partial t} = h(u, v, w) + D_3 \nabla^2 w. \end{cases} \quad (1)$$

Проведен линейный анализ системы (1). Определены условия, накладываемые на значения параметров, при которых однородное состояние становится неустойчивым, то есть существуют такие волновые числа $k \neq 0$, что хотя бы для одного собственного значения характеристического уравнения $\lambda_i(k^2)$ ($i = 1, 2, 3$), выполнено $\text{Re} \lambda_i(k^2) > 0$. Показано, что в системе (1) имеет место тьюринговская бифуркация, если однородное стационарное состояние в отсутствие диффузии ($k^2 = 0$) устойчиво и справедливо следующее условие

$$\Delta + \frac{1}{27\delta_T^2} \left\{ 2(\beta_T^2 - 3\alpha_T \delta_T)^{\frac{3}{2}} + \beta_T (2\beta_T^2 - 9\alpha_T \delta_T) \right\} > 0. \quad (2)$$

Здесь параметры $\alpha_T, \beta_T, \delta_T$ определяются через коэффициенты линеаризованной системы (1) и коэффициенты диффузии D_1, D_2, D_3 ; Δ – определитель матрицы линеаризации. Выделены качественные свойства системы (1), необходимые для выполнения неравенства (2): один из членов на главной диагонали матрицы линеаризации больше нуля (хорошо известное условие наличия автокатализа). Кроме того, соответствующий коэффициент диффузии должен быть мал по сравнению с двумя остальными.

Для возникновения в системе (1) волновой неустойчивости требуется, чтобы однородное стационарное состояние в отсутствие диффузии ($k^2 = 0$) было устойчивым и кроме того выполнено неравенство

$$\sigma \cdot \Sigma - \Delta + \frac{1}{27\delta_V^2} \left\{ 2(\beta_V^2 - 3\alpha_V \delta_V)^{\frac{3}{2}} + \beta_V (2\beta_V^2 - 9\alpha_V \delta_V) \right\} > 0, \quad (3)$$

где параметры $\alpha_T, \beta_T, \delta_T$ определяются через коэффициенты линеаризованной системы (1) и коэффициенты диффузии D_1, D_2, D_3 ; Σ и σ – соответственно, сумма главных миноров и след матрицы линеаризации. В данном случае неравенст-

во (3) выполнено, если помимо присутствия автокаталитической переменной сумма двух членов матрицы линеаризации, стоящих на главной диагонали, больше нуля (при этом сумма всех трех членов отрицательна), а коэффициент диффузии, соответствующий третьей переменной (наименьшему члену на главной диагонали), достаточно велик по сравнению с двумя остальными.

Для проведения численного эксперимента использована хорошо известная модель «Брюсселятор», расширенная добавлением быстро диффундирующего ингибитора (w):

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = \mu(a - (1+b)u + u^2v - cu + dw) + D_1 \nabla^2 u, \\ \frac{\partial v}{\partial t} = bu - u^2v + D_2 \nabla^2 v, \\ \frac{\partial w}{\partial t} = cu - dw + D_3 \nabla^2 w. \end{cases} \quad (4)$$

Выполнен полный параметрический анализ модели (4). С использованием полученных условий бифуркаций (2) и (3) на плоскости параметров (d, D_2) выделены области, отвечающие существованию неустойчивостей Тьюринга и волновой, кроме того область их пересечения, соответствующая наличию обеих неустойчивостей.

В случае, когда реализуются обе бифуркации, отмечено, что $k_T > k_W$ (здесь k_T, k_W - волновые числа, соответствующее максимальному значению действительной части критического корня дисперсионного уравнения в случае тьюринговской и волновой неустойчивостей). Поэтому в области относительно небольшого размера возникает неустойчивость Тьюринга (Рис. 1).

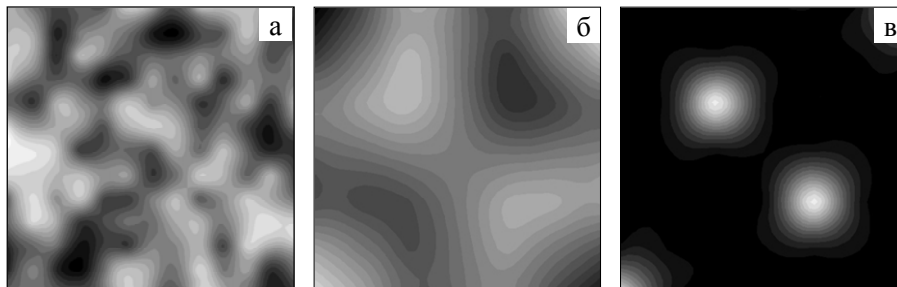


Рис. 1. Структуры Тьюринга в модели (4) в моменты времени: а) $t=3$, б) $t=100$, в) $t=280$. В качестве граничных условий выбраны нулевые потоки. Параметры модели: $\mu=10, a=3, b=4, c=2, d=7.5, D_1=1, D_2=9, D_3=50$. Размер области 6×6 .

Если увеличить размер области, в системе возникнет и будет доминировать волновая неустойчивость. Пространственно-временная структура, которая формируется при этом, зависит от конкретного выбора параметров. На Рис. 2 показаны бегущие волны.

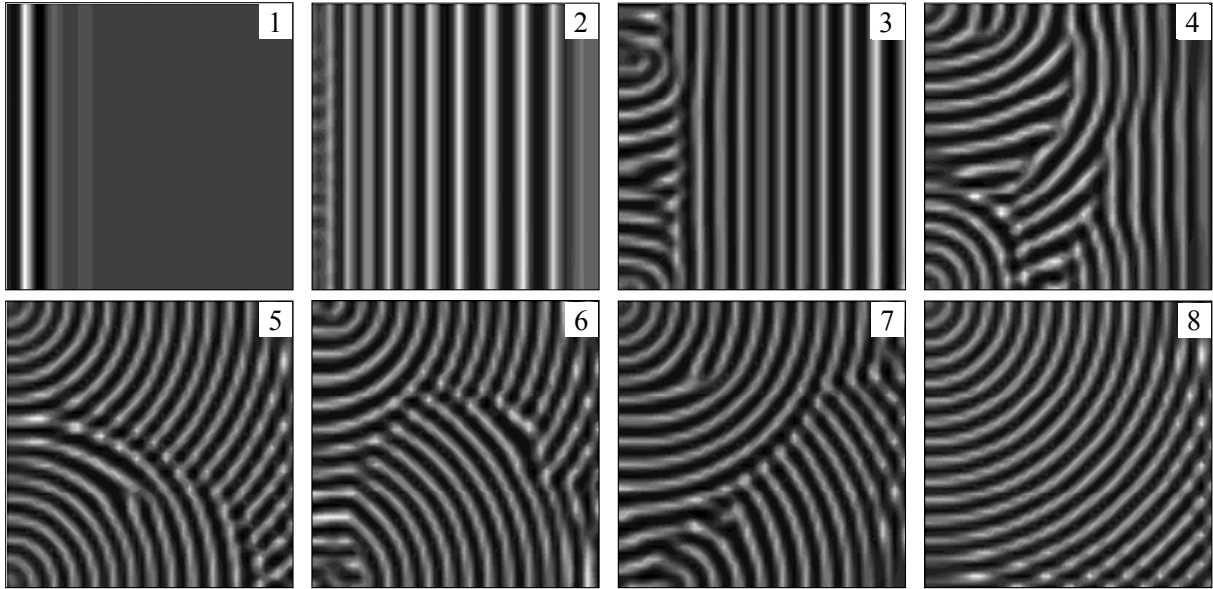


Рис. 2. Бегущие волны в модели (4) в моменты времени: 1) $t=30$, 2) $t=160$, 3) $t=280$, 4) $t=480$, 5) $t=1000$, 6) $t=1160$, 7) $t=1315$, 8) $t=1600$. В качестве граничных условий выбраны нулевые потоки. Параметры модели: $\mu=10$, $a=3$, $b=4$, $c=2$, $d=7.5$, $D_1=1$, $D_2=9$, $D_3=50$. Размер области 300×300 .

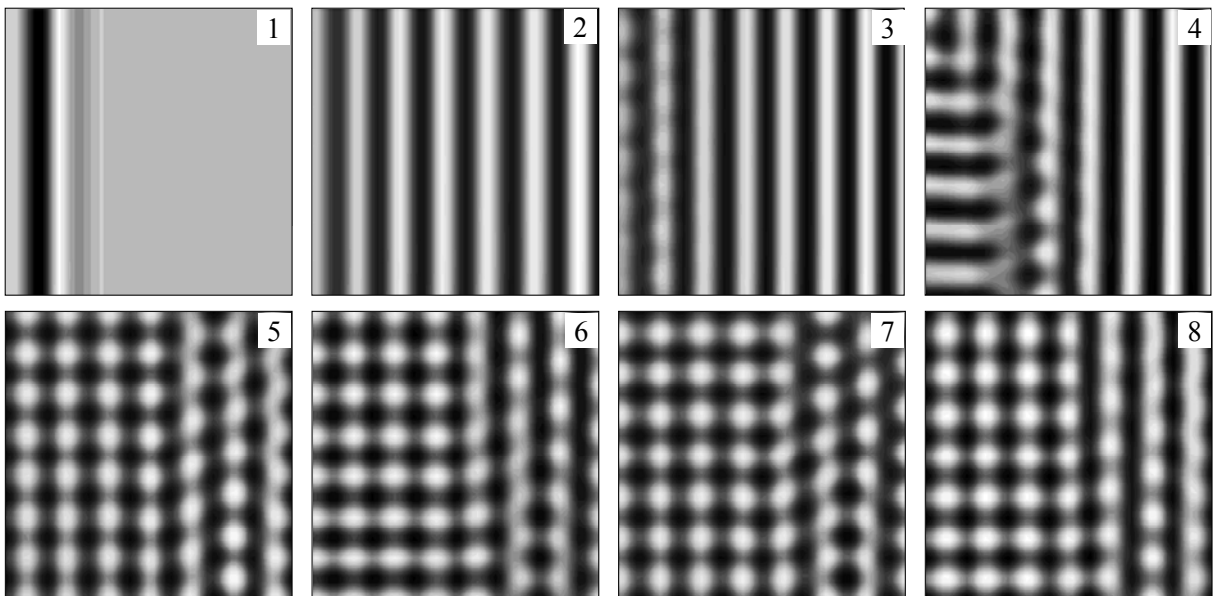


Рис. 3. Стоячие волны в модели (4) в моменты времени: 1) $t=2.5$, 2) $t=25$, 3) $t=50$, 4) $t=64$, 5) $t=116.5$, 6) $t=116.6$, 7) $t=116.65$, 8) $t=116.75$. В качестве граничных условий выбраны нулевые потоки. Параметры модели: $\mu=10$, $a=3$, $b=4$, $c=2$, $d=5.5$, $D_1=1$, $D_2=9$, $D_3=50$. Размер области 150×150 .

Границы области оказывают достаточно сильное влияние на вид возникающих пространственно-временных структур. В области параметров, близкой к бифуркационной кривой, в системе с нулевыми потоками на границах реализуются стоячие волны, как показано на Рис. 3. В системе с периодическими граничными условиями формируются бегущие волны, как показано на Рис. 4.

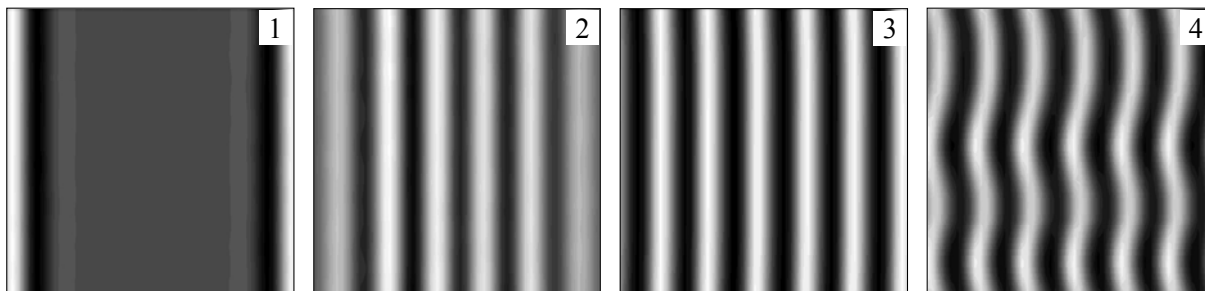


Рис. 4. Бегущие волны в модели (4) в моменты времени: 1) $t=2$, 2) $t=15$, 3) $t=100$, 4) $t=450$. Периодические граничные условия. Параметры модели: $\mu=10$, $a=3$, $b=4$, $c=2$, $d=5.5$, $D_1=1$, $D_2=11$, $D_3=50$. Размер области 150×150 .

В третьей главе исследовано многомодовое взаимодействие вблизи волновой бифуркации в многомерной активной среде, описываемое амплитудными уравнениями

$$\partial_t \tilde{A}_k = \tilde{A}_k - (1 - ic_1) \tilde{A}_k |\tilde{A}_k|^2 - h(1 - ic_2) \tilde{A}_k \cdot \sum_{j=1, j \neq k}^N |\tilde{A}_j|^2, \quad k \in \overline{1, N}. \quad (5)$$

Проведен анализ стационарных решений модели (5). Доказано следующее утверждение: вблизи волновой бифуркации в зависимости от силы связи конкурирующих мод h возможны лишь два режима – стоячие или квазиодномерные бегущие волны. Если параметр h достаточно велик ($h > 1$), одна из мод подавит остальные и сформируется бегущая волна. В противном случае, когда h мал ($h < 1$), моды сосуществуют друг с другом, причем имеют одинаковые амплитуды, что соответствует стоячей волне. Промежуточные режимы в системе (5) вблизи волновой бифуркации невозможны.

Выполнены численные эксперименты для модели Гирера-Майнхардта, расширенной добавлением второго быстро диффундирующего ингибитора,

$$\begin{cases} \partial_t u = \left(\rho + \frac{u^2}{v} - \mu u - cu + dw\right)\Omega + D_1 \nabla^2 u, \\ \partial_t v = u^2 - v + D_2 \nabla^2 v, \\ \partial_t w = cu - dw + D_3 \nabla^2 w. \end{cases} \quad (6)$$

Определена граница волновой неустойчивости для системы (6). Вблизи этой границы построены амплитудные уравнения (5), при этом в явном виде найдена взаимосвязь коэффициента h и параметров модели (6) и, таким образом, определены области существования бегущих или стоячих волн.

Проведено систематическое численное исследование модели (6) для параметров, лежащих вблизи границы волновой неустойчивости. На Рис. 5 приведена параметрическая плоскость (μ, Ω) модели, где показаны области бегущих и стоячих волн. Демонстрируется полное соответствие с результатом теоретического анализа.

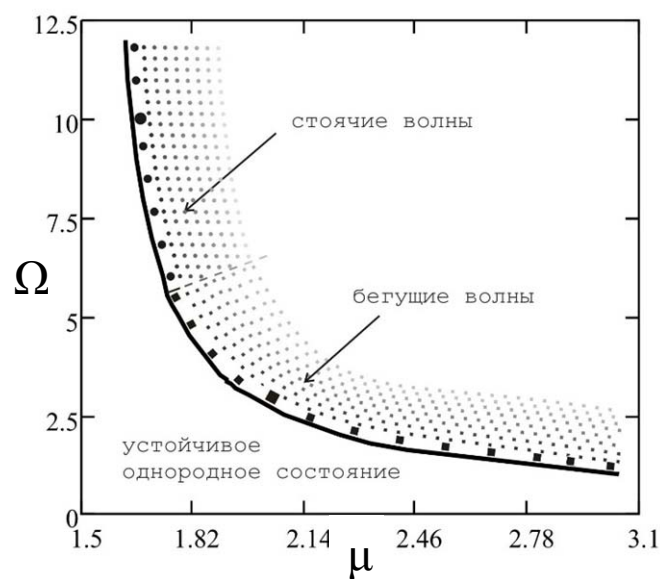


Рис. 5. Плоскость параметров μ, Ω модели (6). Сплошной линией обозначен порог волновой бифуркации. Указаны области, соответствующие стоячим и бегущим волнам, определенные из параметрического анализа. Здесь же приведены результаты численных экспериментов; кружками и квадратами обозначены реализации, соответственно, стоячих и бегущих волн; более крупные символы соответствуют комбинациям параметров для приведенных ниже параметров. Остальные параметры модели: $\rho = 0.23, c = 1, d = 1, D_1 = 1, D_2 = 1, D_3 = 50$.

На рисунках 6 и 7 приведено два примера структур полученных в численных экспериментах. Соответствующие параметры обозначены на Рис. 5 более крупными значками.

В четвертой главе впервые предлагается механизм переключения стоячей волны в бегущую, сопровождающегося делением длины волны пополам. Задача решается в пространственно одномерном случае с помощью построения и

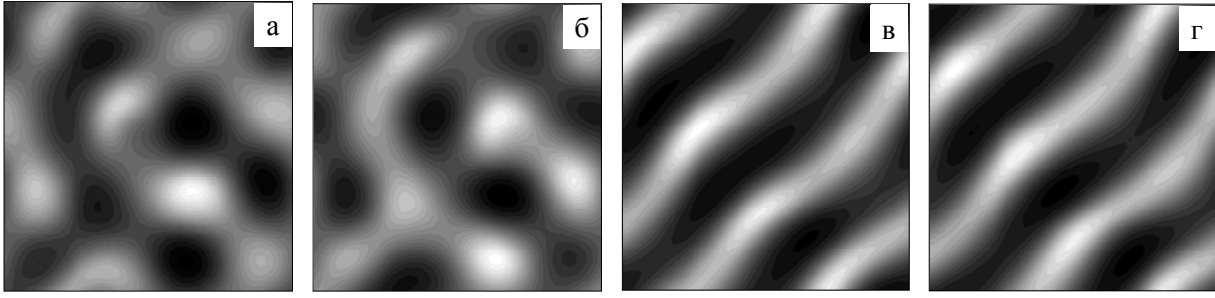


Рис.6. Бегущие волны в модели (6) в моменты времени t : 1) t_0 , 2) $t_0+2\Delta$, 3) $t_0+900\Delta$, 4) $t_0+936\Delta$, где $t_0=386$, $\Delta=0.16$ - шаг интегрирования. Параметры модели: $\rho=0.23$, $\mu=2$, $\Omega=3$, $c=1$, $d=1$, $D_1=1$, $D_2=1$, $D_3=50$. Размер области 150×150 .

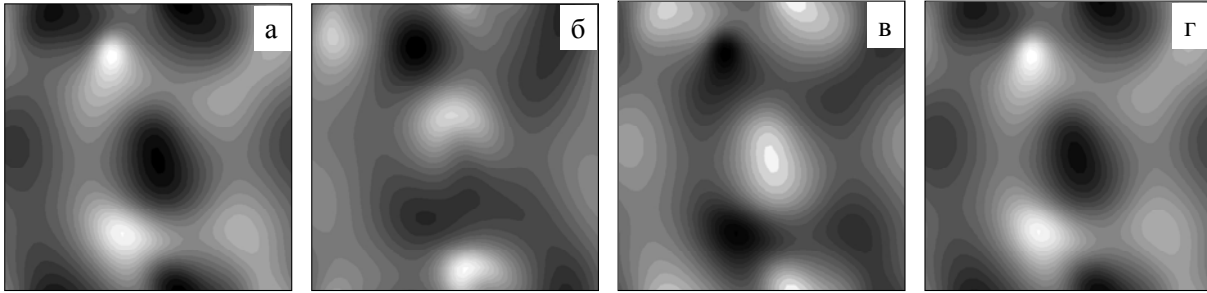


Рис.7. Стоячие волны в модели (6) в моменты времени t : 1) t_0 , 2) $t_0+12\Delta$, 3) $t_0+23\Delta$, 4) $t_0+46\Delta$, где $t_0=1755$, $\Delta=0.032$ - шаг интегрирования. Параметры модели: $\rho=0.23$, $\mu=1.65$, $\Omega=10$, $c=1$, $d=1$, $D_1=1$, $D_2=1$, $D_3=50$. Размер области 100×100 .

последующего исследования амплитудных уравнений типа Гинзбурга-Ландау. Математическая модель, объясняющая данный феномен, основана на нескольких предположениях относительно процессов, происходящих в активной среде, которые перечислены ниже.

1. В результате волновой бифуркации возбуждается стоячая волна, описываемая некоторой переменной u_1 вида $u_1(r,t) = \tilde{A}_1 e^{i(\omega t + kr)} + \tilde{A}_2 e^{i(\omega t - kr)}$.

В предположении, что бифуркация является суперкритической, вблизи неё динамика системы взаимодействующих мод, соответствующих волнам, движущимся в противоположные стороны, описывается системой амплитудных уравнений типа Гинзбурга-Ландау следующего вида

$$\begin{cases} \dot{\tilde{A}}_1 = \tilde{A}_1 - (1 - ic_1)\tilde{A}_1|\tilde{A}_1|^2 - h_1(1 - ic_2)\tilde{A}_1|\tilde{A}_2|^2, \\ \dot{\tilde{A}}_2 = \tilde{A}_2 - (1 - ic_1)\tilde{A}_2|\tilde{A}_2|^2 - h_1(1 - ic_2)\tilde{A}_2|\tilde{A}_1|^2. \end{cases} \quad (7)$$

Для того чтобы в системе (7) формировалась стоячая волна $u_1(r,t)$ необходимо, чтобы сила связи взаимодействующих мод h_1 была мала, $h_1 \in (0,1)$. В этом

случае моды сосуществуют друг с другом, имея при этом одинаковые амплитуды, равные $|A_0| = \frac{1}{\sqrt{1+h_1}}$.

2. В той же системе волна $u_2(r, t) = \tilde{B}_1 e^{i(w_2 t + 2kr)} + \tilde{B}_2 e^{i(w_2 t - 2kr)}$ с удвоенным по сравнению со стоячей волной волновым числом $2k$ и частотой w_2 устойчива, но может быть возбуждена жестким образом вследствие субкритической волновой бифуркации.

Соответствующие амплитудные уравнения в случае субкритической бифуркации имеют вид:

$$\begin{cases} \dot{\tilde{B}}_1 = -\alpha \tilde{B}_1 + (1 - id_1) \tilde{B}_1 |\tilde{B}_1|^2 - (1 - id_3) \beta \cdot \tilde{B}_1 |\tilde{B}_1|^4 - h_2 (1 - id_2) \tilde{B}_1 |\tilde{B}_2|^2, \\ \dot{\tilde{B}}_2 = -\alpha \tilde{B}_2 + (1 - id_1) \tilde{B}_2 |\tilde{B}_2|^2 - (1 - id_3) \beta \cdot \tilde{B}_2 |\tilde{B}_2|^4 - h_2 (1 - id_2) \tilde{B}_2 |\tilde{B}_1|^2, \end{cases}$$

Если сила связи взаимодействующих мод h_2 достаточно велика: $h_2 > \gamma$, где $\gamma = (1 - 4\alpha\beta)$, то вблизи волновой бифуркации одна из мод подавит остальные и сформируется бегущая волна. В противном случае, когда h_2 мало — $h_2 \in (0, \gamma)$, моды сосуществуют друг с другом, причем имеют одинаковые амплитуды, что соответствует стоячей волне.

3. Имеет место резонанс между первой и второй волной, заключающийся в том, что у волны $u_2(r, t)$ не только волновое число, но и частота в два раза больше, чем у первой волны: $w_2 = 2w$.

Для модулей амплитуд A_i и B_i , где $A_i = |\tilde{A}_i|$, $B_i = |\tilde{B}_i|$, $i = 1, 2$ построена система уравнений, описывающая все четыре взаимодействующие моды:

$$\begin{cases} \frac{dA_1}{dt} = A_1 - A_1^3 - h_1 A_2^2 A_1 - \delta_1 (B_1^2 + B_2^2) A_1, \\ \frac{dA_2}{dt} = A_2 - A_2^3 - h_1 A_1^2 A_2 - \delta_1 (B_1^2 + B_2^2) A_2, \\ \frac{dB_1}{dt} = -\alpha B_1 + B_1^3 - \beta B_1^5 - h_2 B_2^2 B_1 - \delta_2 (A_1^2 + A_2^2) B_1 + \sigma \cos \psi_1(t) A_1^2, \\ \frac{dB_2}{dt} = -\alpha B_2 + B_2^3 - \beta B_2^5 - h_2 B_1^2 B_2 - \delta_2 (A_1^2 + A_2^2) B_2 + \sigma \cos \psi_2(t) A_2^2, \end{cases} \quad (8)$$

Основываясь на уравнениях (8), показано, каким образом осуществляется переход от стоячей волны к бегущей волне с половинной длиной. Кроме того приведены условия на параметры (8), при выполнении которых осуществляется соответствующий переход. С учетом полученных оценок было найдено числен-

ное решение системы (8). В начальный момент времени амплитуды имели нулевые значения и возмущались случайным шумом. На Рис. 8 (а) представлен пространственно-временной график поля результирующей волны u , являющейся суммой всех четырех мод: $u(r, t) = A_1 e^{i(\omega t + kr)} + A_2 e^{i(\omega t - kr)} + B_1 e^{i(2\omega t + 2kr)} + B_2 e^{i(2\omega t - 2kr)}$.

Если условие $h_2 > 1 - 4\alpha\beta$ нарушено, то возможен переход из исходной стоячей волны в стоячую же волну, но с половинным периодом, как показано на Рис. 8 (б). Однако пока такого явления в реальном эксперименте не наблюдалось.

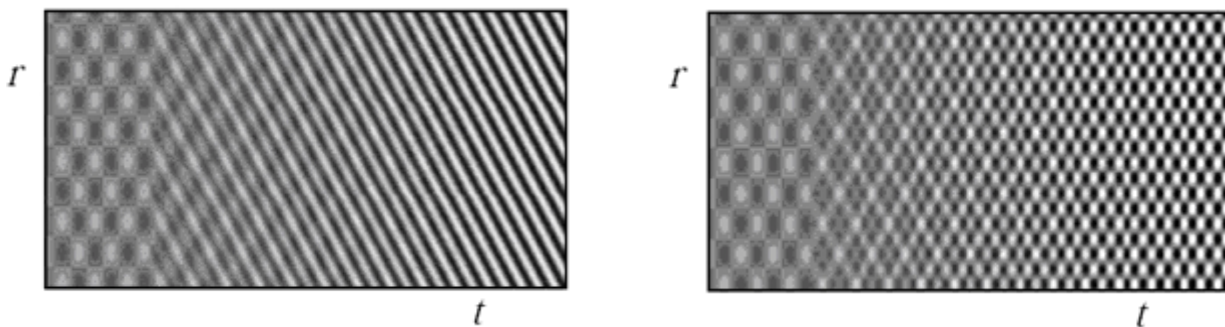


Рис.8. (а) Пространственно-временной график $u(r, t)$ перехода (а) «стоячая волна (λ_{SW}) – бегущая волна ($\lambda_{\text{TW}} \cong \lambda_{\text{SW}} / 2$)», (б) «стоячая волна (λ_{SW}) – стоячая волна ($\lambda_{\text{TW}} \cong \lambda_{\text{SW}} / 2$)» в случае $h_2 < 1 - 4\alpha\beta$.

В пятой главе исследованы различные механизмы формирования сегментированных волн и спиралей в активных средах.

1. Предложен механизм, обусловленный взаимодействием двух подсистем, одна из которых возбудима, а другая потенциально (при соответствующих параметрах) неустойчива по Тьюрингу.

Рассмотрена распределённая система, представляющая собой объединение моделей ФитцХью-Нагумо и Брюсселятор, параметры которых подобраны таким образом, что первая подсистема соответствует возбудимой активной среде, в то время как вторая потенциально обладает тьюринговской неустойчивостью. Кроме того один из параметров Брюсселятора, a или b (рассмотрены оба случая), выбран линейно зависимым от активаторной переменной u модели ФитцХью-Нагумо:

$$\begin{cases} \frac{du}{dt} = u - \frac{u^3}{3} - v + D_F \nabla^2 u, \\ \frac{dv}{dt} = (u - \gamma v + \delta) \varepsilon, \\ \frac{dx}{dt} = a - (b(u) + 1)x + x^2 y + \nabla^2 x, \\ \frac{dy}{dt} = b(u)x - x^2 y + D_B \nabla^2 y, \end{cases} \quad (9)$$

где $b(u) = \begin{cases} b_c + \Delta \cdot u, & u \geq 0 \\ b_c, & u < 0 \end{cases}$ b_c – значение параметра b , соответствующее бифуркации Тьюринга.

Гладкая спиральная волна, развивающаяся в возбудимой подсистеме, под действием тьюринговской неустойчивости во второй подсистеме начинает дробиться. На Рис. 9 представлены результаты численного эксперимента для системы (9). Изображена одиночная сегментированная спираль, а также взаимодействие двух спиралей. На этом и последующих рисунках показано пространственное распределение активаторной переменной модели Брюсселятор x .

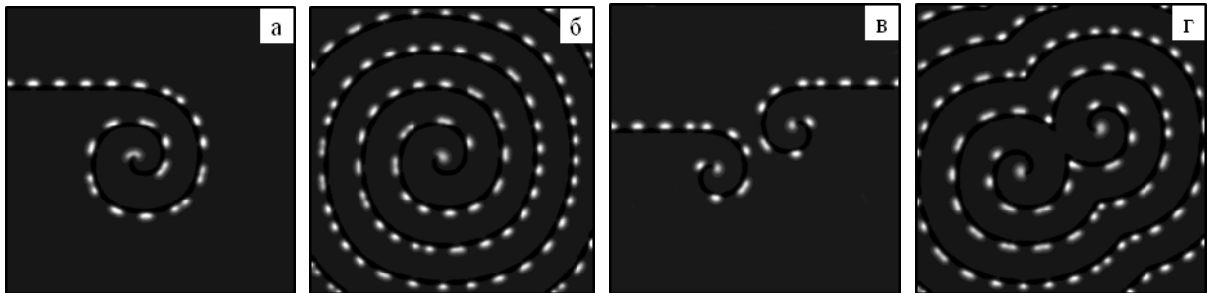


Рис.9. (а, б) Развитие одиночной сегментированной спирали и (в, г) взаимодействие двух таких спиралей (переменная x) в моменты времени (а) $t=120$, (б) $t=300$, (в) $t=70$, (г) $t=275$. Параметры модели: $\varepsilon=0.09$, $\gamma=0.5$, $\delta=0.7$, $D_F=0.1$, $a=2$, $D_B=100$, $b_c=1.25$, $\Delta=2$. Размер области 200×200 .

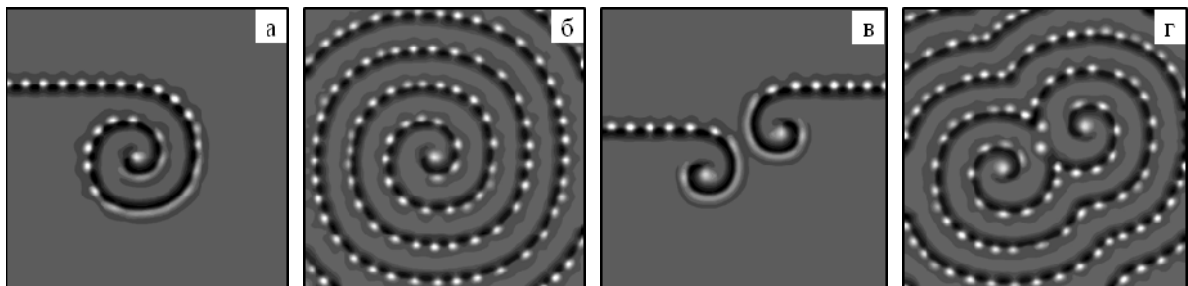


Рис.10. (а, б) Развитие одиночной сегментированной спирали и (в, г) взаимодействие двух таких спиралей (переменная x) в моменты времени (а) $t=120$, (б) $t=300$, (в) $t=70$, (г) $t=280$. Параметры модели: $\varepsilon=0.09$, $\gamma=0.5$, $\delta=0.7$, $D_F=0.1$, $b=2$, $D_B=100$, $a_c=4.2$, $\Delta=-1$. Размер области 200×200 .

В случае, когда от переменной u зависит параметр a модели Брюсселятор, $a(u) = \begin{cases} a_c + \Delta \cdot u, & u \geq 0 \\ a_c, & u < 0 \end{cases}$ где a_c – значение параметра a в точке бифуркации, сегментированная спиральная волна существенно отличается от предыдущей (Рис.10).

Аналогичный результат получен для системы, объединяющей две модели ФитцХью-Нагумо. В численном эксперименте в зависимости от параметров, влияющих на характерный размер формирующейся тьюринговской структуры, демонстрируются различные по виду сегментированные волны, представленные на Рис. 11.

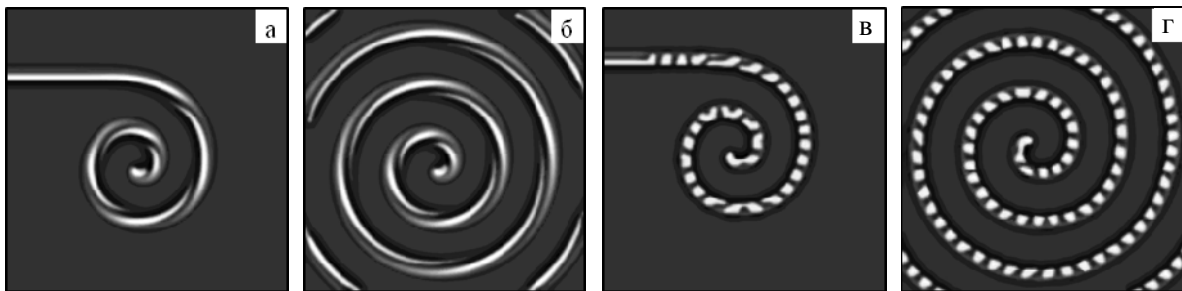


Рис.11. Развитие различных по виду сегментированных спиралей в системе, объединяющей две модели ФитцХью-Нагумо для двух наборов параметров (соответственно, (а, б) и (в, г)).

2. Второй механизм, представляет собой «дробление» бегущей волны в окрестности бифуркационной точки коразмерности два, в которой пересекаются границы тьюринговской и волновой неустойчивостей.

Вблизи границ тьюринговской и волновой неустойчивостей волна представляется в виде суперпозиции соответствующих мод: $u(r,t) = A_T e^{ik_T r} + A_L e^{i(\omega t + k_W r)} + A_R e^{i(\omega t - k_W r)}$. В предположении, что бифуркации являются суперкритическими, вблизи них динамика системы взаимодействующих мод описана при помощи амплитудных уравнений типа Гинзбурга-Ландау следующего вида

$$\begin{aligned} \partial_t A_T &= \eta_T A_T - |A_T|^2 A_T - h_{TW} (|A_L|^2 + |A_R|^2) A_T, \\ \partial_t A_L &= \eta_W A_L - (1 - ic_1) |A_L|^2 A_L - h_{LR} (1 - ic_2) |A_R|^2 A_L - h_{WT} (1 - ic_3) |A_T|^2 A_L, \\ \partial_t A_R &= \eta_W A_R - (1 - ic_1) |A_R|^2 A_R - h_{LR} (1 - ic_2) |A_L|^2 A_R - h_{WT} (1 - ic_3) |A_T|^2 A_R. \end{aligned} \quad (10)$$

Проведен численный эксперимент для системы (10), в котором использованы результаты выполненного в работе (Nicola E.M. PhD Thesis, Dresden, 2001) исследования существования и устойчивости стационарных решений (10). Среди

различных режимов, возникающих в окрестности бифуркационной точки коразмерности два «волновая – тьюринговская бифуркации», выделен смешанный режим, образованный наложением бегущих волн и структур Тьюринга. Возникающие при этом пространственно-временные структуры, представляющие собой «дробленные» бегущие волны, показаны на Рис. 12 (а). Одна из таких волн вырезана для демонстрации ее движения (Рис. 12 (б, в)).

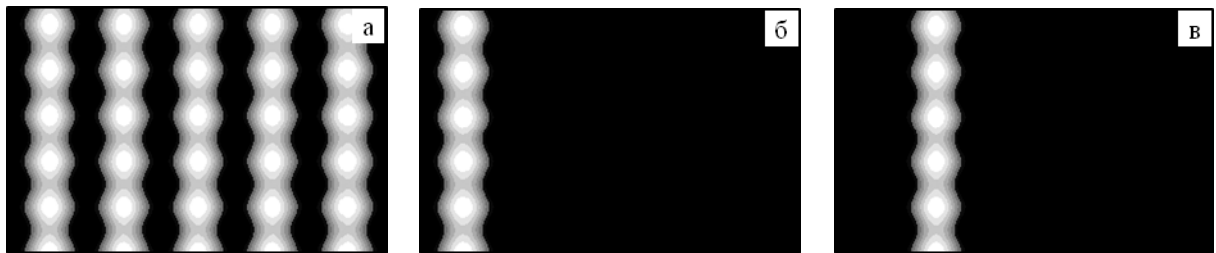


Рис.12. (а) «Дробленные» бегущие волны $u(x, y, t)$ в момент времени $t=5$, (б, в) движение одиночной волны: (б) $t=5$, (в) $t=11$. Размер области 250×80 .

3. Проведен подробный анализ механизма формирования сегментированных волн в простых двухкомпонентных моделях типа «реакция-диффузия», содержащих более одного стационарного состояния, обусловленного взаимодействием возбудимого и обладающего неустойчивостью псевдо Тьюринга стационарных состояний (Vanag V.K., Epstein I.R. Phys. Rev. Lett., 90, 098301, 2003).

Впервые получена сегментированная волна в модели ФитцХью-Нагумо

$$\begin{cases} \frac{du}{dt} = u - \frac{u^3}{3} - v + \nabla^2 u, \\ \frac{dv}{dt} = (\rho u - v + \delta)\varepsilon + D\nabla^2 v. \end{cases} \quad (11)$$

Анализ данной модели (11) показал, что одновременное выполнение условий возбудимости среды (малое ε) и псевдотьюринговской неустойчивости в системе возможно, если один из параметров, например, параметр ρ , выбрать в виде кусочно-линейной функции $\rho(u) = \begin{cases} \rho_1, & u \geq 0 \\ \rho_2, & u < 0 \end{cases}$.

Возникающая в системе сегментированная волна изображена на Рис. 13. Полученный режим не является долгоживущим и со временем волна, распадаясь на сегменты, исчезает.

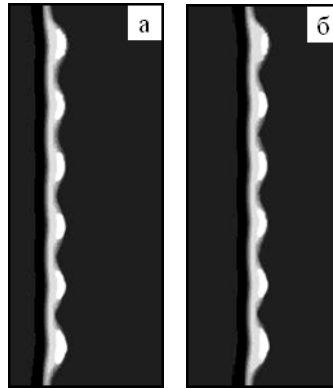


Рис.13. Сегментированная волна в модели ФитцХью-Нагумо в моменты времени (а) $t=50$, (б) $t=60$. Параметры модели: $\varepsilon=0.09$, $\delta=0.568$, $\rho_1=1.1$, $\rho_2=0.1016$, $D=1.2$. Размер области 65×200 .

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

В заключение приведем наиболее важные результаты, полученные в диссертации:

1. Проведено аналитическое исследование возникновения диффузионной неустойчивости в трехкомпонентной системе типа «реакция–диффузия». В случае диагональной матрицы диффузии в явном виде получены условия как тьюринговской, так и волновой неустойчивостей. Выявлены качественные свойства системы для того, чтобы в ней могла произойти та или другая бифуркация.
2. Проведено исследование системы амплитудных уравнений, описывающих многомодовое взаимодействие вблизи волновой бифуркации в многомерной активной среде. Впервые показано, что в результате конкуренции мод в зависимости от величины параметра, определяющего силу взаимодействия, возможны только два режима: или квазиодномерные бегущие волны, или стоячие волны. Аналитический результат подтвержден численными экспериментами.
3. Впервые предложен механизм перехода из режима стоячих волн с длиной волны λ_{sw} в режим бегущих волн с половинной длиной волны: $\lambda_{tw} \cong \lambda_{sw} / 2$. С использованием аппарата амплитудных уравнений типа Гинзбурга-Ландау показано, что сценарий соответствующего перехода реализуется при выполнении определенных условий, причём ключевым является резонансное взаимодействие между волнами, соответствующими обоим типам структур. Ре-

зультат теоретического анализа подтверждается численным моделированием.

4. Исследованы возможные механизмы формирования сегментированных волн и спиралей в активных средах. Впервые предложены следующие варианты: механизм, обусловленный взаимодействием двух подсистем, одна из которых возбуждима, а другая обладает тьюринговской неустойчивостью, и механизм, представляющий собой «дробление» бегущей волны в окрестности бифуркационной точки коразмерности два, в которой пересекаются границы тьюринговской и волновой неустойчивостей. Теоретические выкладки подтверждаются численными экспериментами с использованием моделей ФитцХью-Нагумо и Брюсселятора, а также амплитудных уравнений. Кроме того проведен подробный анализ механизма предложенного ранее, заключающегося во взаимодействии двух стационарных состояний – возбуждимого и обладающего псевдотьюринговской неустойчивостью. Впервые в численном эксперименте получена сегментированная волна в модели ФитцХью-Нагумо в соответствии с этим механизмом.

СПИСОК РАБОТ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

1. Борина М.Ю., Полежаев А.А. Диффузионная неустойчивость в трехкомпонентной модели типа «реакция–диффузия» // Компьютерные исследования и моделирование, - 2011, - Т. 3, - №. 2, - С. 135–146.
2. Борина М.Ю., Полежаев А.А. О механизме переключения стоячей волны в бегущую, сопровождающегося делением длины волны пополам // Компьютерные исследования и моделирование, - 2012, - Т. 4, - №. 4, - С. 673-679.
3. Борина М.Ю., Полежаев А.А. Пространственно-временные структуры в многомерной активной среде, обусловленные многомодовым взаимодействием вблизи волновой бифуркации // Изв. Вузов. Прикладная нелинейная динамика, - 2012, - Т. 20, - №. 6, - С. 15-24.
4. Борина М.Ю., Полежаев А.А. Исследование механизмов формирования сегментированных волн в активных средах // Компьютерные исследования и моделирование, - 2013, - Т. 5, - №. 4, - С. 533-542.

5. Polezhaev A.A., Borina M.Yu. Spatial-Temporal Patterns Arising in Active Media Due to the Wave Instability // Proceedings of the International conference on Nonlinear Dynamics of Electronic Systems (NDES - 2012). Wolfenbuttel, Germany, - 2012, - P. 1-4.
6. Polezhaev A.A., Borina M.Yu. Spatial-Temporal Patterns Arising in Active Media in the Vicinity of the Wave Bifurcation // Proceedings of the International Conference «Instabilities and Control of Excitable Networks: From Macro- to Nano-Systems». Dolgoprudny, Russia, - 2012, - P. 104-112.
7. Борина М.Ю., Полежаев А.А. Диффузионная неустойчивость в трехкомпонентной модели типа «реакция–диффузия» // Тезисы 18-той международной конференции "Математика, компьютер, образование". Пущино, Россия, - 2011, - С. 21.
8. Polezhaev A.A., Borina M.Yu. Mechanisms of pattern formation in biological systems caused by diffusion instability // Book of Abstracts of the 8-th European Conference on Mathematical and Theoretical Biology, and Annual Meeting of the Society for Mathematical Biology. Kraków, Poland, - 2011, - P. 787.
9. Борина М.Ю., Полежаев А.А. О механизме переключения стоячей волны в бегущую, сопровождающегося делением длины волны пополам // Тезисы 19-той международной конференции "Математика, компьютер, образование". Дубна, Россия, - 2012, - С. 163.
10. Борина М.Ю., Полежаев А.А. Пространственно-временные структуры в многомерной активной среде, обусловленные полимодальным взаимодействием вблизи волновой бифуркации // Тезисы 19-той международной конференции "Математика, компьютер, образование". Дубна, Россия, - 2012, - С. 164.
11. Борина М.Ю., Полежаев А.А. О механизме переключения стоячей волны в бегущую, сопровождающегося делением длины волны пополам // Тезисы докладов XII научной школы «Нелинейные волны-2012». Нижний Новгород, Россия, - 2012, - С. 15.
12. Борина М.Ю., Полежаев А.А. Пространственно-временные структуры в многомерной активной среде, обусловленные полимодальным взаимодействием вблизи волновой бифуркации // Тезисы докладов XII научной школы «Нелинейные волны-2012». Нижний Новгород, Россия, - 2012, - С. 16.

13. Borina M.Yu., Polezhaev A.A. Patterns in active media caused by diffusion instability // Book of abstracts of the International conference "Instabilities and Control of Excitable Networks: From macro- to nano-systems". Долгопрудный, Россия, - 2012, - С. 40-41.
14. Borina M.Yu., Polezhaev A. A. Spatial-Temporal Patterns Arising in Active Media in the Vicinity of the Wave Bifurcation // Abstracts of Ginzburg Conference on Physics. Moscow, Russia, - 2012, - P. 190.
15. Борина М.Ю., Полежаев А.А. Исследование механизмов формирования сегментированных волн в активных средах // Тезисы 20-той международной конференции "Математика, компьютер, образование". Пущино, Россия, - 2013, - С. 157.
16. Borina M.Yu., Polezhaev A.A. On The Mechanisms for Formation of Segmented Waves in Active Media // Abstracts of XXXIII International Conference "Dynamic Days Europe 2013". Madrid, Spain, - 2013, - P. 46.
17. Polezhaev A.A., Borina M.Yu. Patterns in Active Media Caused by Diffusion Instability // Abstracts of XXXIII International Conference "Dynamic Days Europe 2013". Madrid, Spain, - 2013, - P. 47.