

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Физический институт им. П.Н. Лебедева Российской академии наук
Отделение теоретической физики

На правах рукописи

Борина Мария Юрьевна

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

Специальность 01.04.02 – Теоретическая физика

ДИССЕРТАЦИЯ

на соискание ученой степени кандидата

физико-математических наук

Научный руководитель
доктор физ.-мат. наук
Полежаев Андрей Александрович

Москва, 2013 г.

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ.....	5
----------------------	----------

ГЛАВА 1. ЛИТЕРАТУРНЫЙ ОБЗОР	12
--	-----------

1.1. Экспериментальные исследования пространственно-временной динамики химических систем.....	12
1.1.1. История открытия химических колебаний	12
1.1.2. СИМА и поверхностные реакции	14
1.1.3. БЖ-АОТ система.....	15
1.1.4. Контроль пространственно-временной динамики в химических системах	16
1.2. Математические модели, предложенные для объяснения возникающих режимов и структур.....	19
1.2.1. Дискретные модели	20
1.2.2. Распределенные модели типа «реакция-диффузия»	21
1.2.2.1. Модель ФитцХью-Нагумо	22
1.2.2.2. Модели тьюринговского типа	24
1.2.2.3. Орегонатор и Брюсселятор	26

ГЛАВА 2. ДИФФУЗИОННАЯ НЕУСТОЙЧИВОСТЬ В ТРЕХКОМПОНЕНТНОЙ МОДЕЛИ ТИПА «РЕАКЦИЯ-ДИФФУЗИЯ»	29
---	-----------

2.1. Введение.....	29
2.2. Линейный анализ модели	31
2.3. Бифуркация Тьюринга	33
2.4. Волновая неустойчивость	34
2.5. Численные эксперименты	36

2.5.1. Математическая модель	36
2.5.2. Параметрический анализ.....	36
2.5.3. Результаты численных экспериментов	38
2.6. Выводы по Главе 2	43

ГЛАВА 3. ПРОСТРАНСТВЕННО-ВРЕМЕННЫЕ СТРУКТУРЫ В МНОГОМЕРНОЙ АКТИВНОЙ СРЕДЕ, ОБУСЛОВЛЕННЫЕ МНОГОМОДОВЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ ВБЛИЗИ ВОЛНОВОЙ БИФУРКАЦИИ 45

3.1. Введение.....	45
3.2. Анализ стационарных решений модели	47
3.3. Численные эксперименты	49
3.3.1. Математическая модель	49
3.3.2. Параметрический анализ и вывод амплитудных уравнений.....	50
3.3.3. Результаты численных экспериментов.....	50
3.4. Выводы по Главе 3	56

ГЛАВА 4. О МЕХАНИЗМЕ ПРЕКЛЮЧЕНИЯ СТОЯЧЕЙ ВОЛНЫ В БЕГУЩУЮ, СОПРОВОЖДАЮЩЕГОСЯ ДЕЛЕНИЕМ ДЛИНЫ ВОЛНЫ ПОПОЛАМ..... 57

4.1. Введение.....	57
4.2. Математическая модель	58
4.3. Численные эксперименты	61
4.4. Выводы по Главе 4	64

ГЛАВА 5. О МЕХАНИЗМАХ ФОРМИРОВАНИЯ СЕГМЕНТИРОВАННЫХ ВОЛН В АКТИВНЫХ СРЕДАХ..... 65

5.1. Введение.....	65
5.2. Взаимодействие двух подсистем, одна из которых возбуждима, а другая обладает тьюринговской неустойчивостью	66

5.2.1. ФитцХью-Нагумо и Брюсселятор	68
5.2.2. Две модели ФитцХью-Нагумо.....	71
5.3.«Дробление» бегущей волны в окрестности бифуркационной точки коразмерности два, в которой пересекаются границы волновой и тьюринговской неустойчивостей	74
5.4.Взаимодействие двух стационарных состояний – возбуждимого и обладающего псевдотьюринговской неустойчивостью.....	76
5.5.Выводы по Главе 5	78
ВЫВОДЫ.....	80
СПИСОК ЦИТИРУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ.....	82
СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ.....	96
ПРИЛОЖЕНИЕ.....	99

ВВЕДЕНИЕ

Самоорганизация, имеющая место в широком классе неравновесных систем, является одним из наиболее ярких и удивительных явлений, вызывающих неослабевающий интерес уже в течение достаточно длительного времени. На Рис. 1 приведено несколько примеров разнообразных пространственно-временных структур, наблюдаемых в природе. 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, Epstein, 2001]. Реакция Белоусова-Жаботинского протекает в обращенной микроэмульсии аэрозоля ОТ. Такая



Рис. 1. (а) Ракушки, рисунок взят с сайта <http://www.natgeocreative.com>; (б) Трещины в земле пустыни Данакили, Эфиопия, фотограф Carsten Peter; (в) стая скворцов, фотограф Walter Вахтер, рисунок взят с сайта <http://www.geolocation.ws>; (г) детеныши гепарда, фотограф Scott Belt; (д) цветочные споры, фотограф Jozsef Szentpeteri; рисунки (б), (г) и (д) взяты с сайта <http://www.nationalgeographic.com>; (е) галактика Млечный Путь, иллюстрация предоставлена NASA / JPL-Caltech, рисунок взят с сайта <http://www.astro.wisc.edu>.

микроэмульсия представляет собой среду - масло, в которой диффундируют, сталкиваются, сливаются и разделяются капли воды нанометрового размера, окруженные монослоем молекул аэрозоля марки OT и содержащие БЖ-реагенты [De, Maitra, 1995]. БЖ-АОТ система позволила наблюдать многообразие всевозможных пространственно-временных структур [Ванаг, 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.

Цель и задачи работы

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 [Kaminaga et al., 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

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

Научно-практическая значимость работы

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, экспериментальных данных исследований реакционно-диффузионных систем, а также согласованностью с результатами других авторов.

Личный вклад автора

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

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, и 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.

Апробация 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 Гинзбург-

говской 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.

ГЛАВА 1

ЛИТЕРАТУРНЫЙ ОБЗОР

1.1. Экспериментальные исследования пространственно-временной динамики химических систем

1.1.1. История открытия химических колебаний

Впервые возможность колебаний в химических системах предсказал в 1910 году Альфред Джеймс Лотка, анализируя простейшую систему дифференциальных уравнений, которую он предложил в качестве модели для описания кинетики последовательных реакций [Lotka, 1910]. Однако экспериментально обнаружить колебательную реакцию удалось лишь в 1921 году. Уильям Брей заметил, что при разложении пероксида водорода йодатом калия ($t=25^{\circ}\text{C}$) происходит периодическое выделение кислорода из системы [Bray, 1921] (позднее эту химическую систему назвали реакцией Брея – Либавского [Bray, Liebhafsky, 1931]). Его работа не вызвала интереса по причине широко распространенного мнения о том, что вдали от положения равновесия такие колебания запрещены вторым законом термодинамики [Rice, Reiff, 1927].

Спустя 30 лет советский ученый Борис Павлович Белоусов экспериментально наблюдал колебательные режимы в химической реакции окисления лимонной кислоты броматом калия в присутствии катализатора – ионов церия Ce^{+3} . Раствор реагентов, слитых в пробирку, периодически (с периодом около минуты) менял свою окраску между бесцветной и бледно-желтой. К сожалению, продолжавшийся скептицизм [Peard, Cullis, 1951] в течение нескольких лет мешал ему опубликовать свою работу [Белоусов, 1958]. Когда результаты экспериментов Белоусова, наконец, получили ог-

ласку, ими заинтересовался молодой аспирант, Анатолий Жаботинский. Он изменил состав реагентов, обнаружив, например, вместо лимонной кислоты можно использовать ряд органических соединений, например, малоновую и броммалоновую кислоты, и что катализатор ферроин дает более насыщенный цвет [Жаботинский, 1964]. Вклад Жаботинского был настолько значителен, что в 1968 году на конференции по биологическим и биохимическим осцилляторам в Праге [Chance et al., 1973] было принято решение называть новый класс химических реакций - реакциями Белоусова-Жаботинского (подробнее об истории открытия химических колебаний и волн см. [Zhabotinsky, 1991]).

Замена церия на катализаторы типа ферроина позволила изучать пространственное поведение периодической реакции Белоусова-Жаботинского в тонком слое раствора, например, в чашке Петри [Вавилин и др., 1969]. Такая система оказалась очень удобной для наблюдений: в ней возникала красочная картина автоволн [Zaikin, Zhabotinsky, 1970]. Термин «автоволны» ввел академик Рем Викторович Хохлов (будучи оппонентом на защите Жаботинским докторской диссертации [Zhabotinsky, 1974], он сказал: «По аналогии с автоколебаниями процесс распространения волн в активной среде можно назвать автоволновым»). Это самоподдерживающиеся волны, распространяющиеся в активных средах. То есть волны, способные поддерживать свои характеристики за счет внутренних источников среды. Типичный пример одиночной автоволны - это распространение пламени.

Движение волны возбуждения в реакции Белоусова—Жаботинского, идущей в тонком слое раствора, сопровождалось достаточно медленными, порядка миллиметр в минуту, локальными изменениями цвета раствора - от красного к синему и наоборот [Zaikin, Zhabotinsky, 1970]. Через некоторое время в реагирующей смеси спонтанно возникали источники концентрически расходящихся волн – ведущие центры (см. Рис. 1.1 (а)) [Жаботинский, Заикин, 1971а]. Наличие ведущих центров обусловлено неоднородностями среды (примесями, пузырьками воздуха) [Agladze et al., 1984]. Другой тип самоподдерживающихся структур, спиральные волны (см. Рис. 1.1 (б)), впервые описаны в работах [Жаботинский, Заикин, 1971б;

Winfree, 1972]. В отличие от ведущих центров эти структуры не связаны с присутствием каких-либо посторонних включений, их обычно получают путем разрыва фронта волны возбуждения [Кринский и др., 1986]. Спиральные волны чрезвычайно устойчивы и гасят ведущие центры, являющиеся более медленными автоволновыми источниками.

1.1.2. СИМА и поверхностные реакции

Обнаружение автоволн в реакции Белоусова-Жаботинского вызвало большой интерес и желание понять природу химических колебаний. Появились работы, посвященные поискам новых химических осцилляторов. В одной из таких работ было сделано сообщение о первой систематически разработанной однородной колебательной реакции хлорид – йодид – арсенид [De Kepper et al., 1981]. Чуть позже авторы указали на целое семейст-

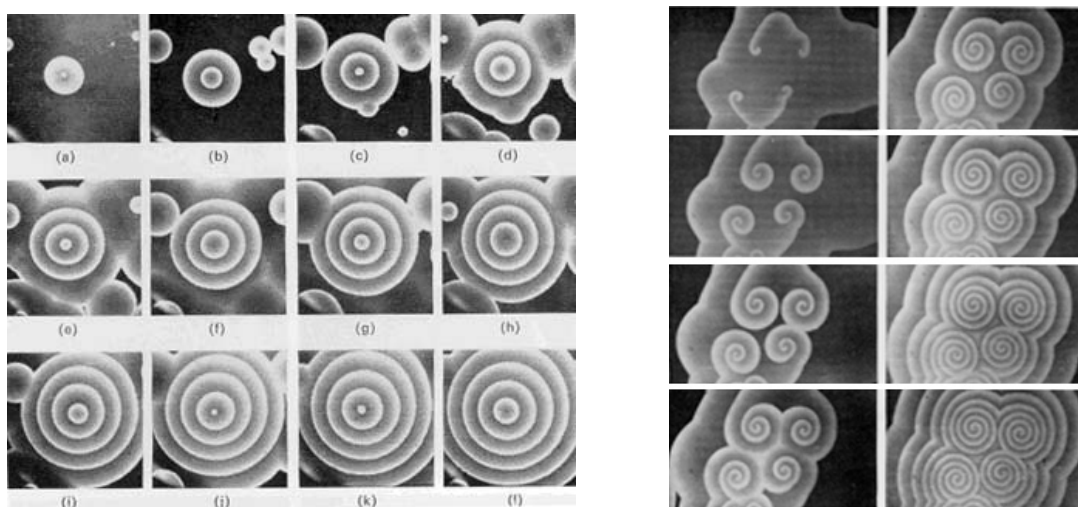


Рис. 1.1. (а) Генерация концентрических волн ведущими центрами и гашение медленных центров более быстрыми [Zaikin, Zhabotinsky, 1970]; (б) Развитие спиральных волн в реакции Белоусова—Жаботинского (рисунок взят из работы [Жаботинский, Заикин, 1971b]).

во однородных химических осцилляторов: хлорид - йодид и субстрат, в качестве которого может выступать как арсенид, так и любой другой восстановитель (субстрат) из предложенного списка [Orban et al., 1981]. Использование малоновой кислоты (реакция хлорит - йодид - малоновая кислота

$\text{ClO}_2 - \text{I}^- - \text{MA}$) позволяло наблюдать широкий диапазон различных динамических поведений [De Kepper et al., 1982; De Kepper et al., 1990]. В частности в данной системе, известной в настоящем как СИМА система, впервые экспериментально обнаружены стационарные во времени пространственные структуры (структуры Тьюринга) [Castets et al., 1990]. Впоследствии была построена наиболее применимая для исследований СИМА система (реакция $\text{ClO}_2 - \text{I}_2 - \text{MA}$), которая, по сути, представляет упрощенную версию СИМА реакции [Lengyel et al., 1990].

Весьма богатый набор пространственных поведений демонстрируют поверхностные реакции - реакции $\text{CO} + \text{O}_2$, $\text{NO} + \text{CO}$, $\text{NO} + \text{H}_2$ на поверхности платины Pt [Imbihl et al., 1986; Eiswirth, Ertl, 1986; Lesley, Schmidt, 1983; Schwartz, Schmidt, 1988; Imbihl, Ertl, 1995].

1.1.3. БЖ-АОТ система

Наряду с исследованиями, описанными выше, продолжалось изучение реакции Белоусова-Жаботинского. В настоящее время под этим названием объединяется целый класс родственных химических систем, близких по механизму, но различающихся используемыми катализаторами (Ce^{3+} , Mn^{2+} и комплексы Fe^{2+} , Ru^{2+}), органическими восстановителями (малоновая, броммалоновая, лимонная, яблочная и другие кислоты) и окислителями (броматы, йодаты). Кроме того были предложены системы, сочетающие реакцию Белоусова-Жаботинского с самоорганизующимися матрицами: гелями, мицеллами, полимерами, микроэмульсиями и другими (см. обзор [Rossi, Liveri, 2009] и ссылки в нем). Наиболее удачной оказалась так называемая БЖ-АОТ система, разработанная группой Владимира Карловича Ванага в университете Brandeis [Vanag, Epstein, 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, 1995].

БЖ-АОТ система позволила наблюдать многообразие всевозможных пространственно-временных структур [Ванаг, 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 [Vanag, Epstein, 2001; Vanag, Epstein, 2002; Vanag, Epstein, 2003a; Vanag, Epstein, 2003b; Vanag et al., 2001; Vanag, Epstein, 2006]. На Рис. 1.2 приведена таблица неравновесных структур, обнаруженных в БЖ-АОТ системе.

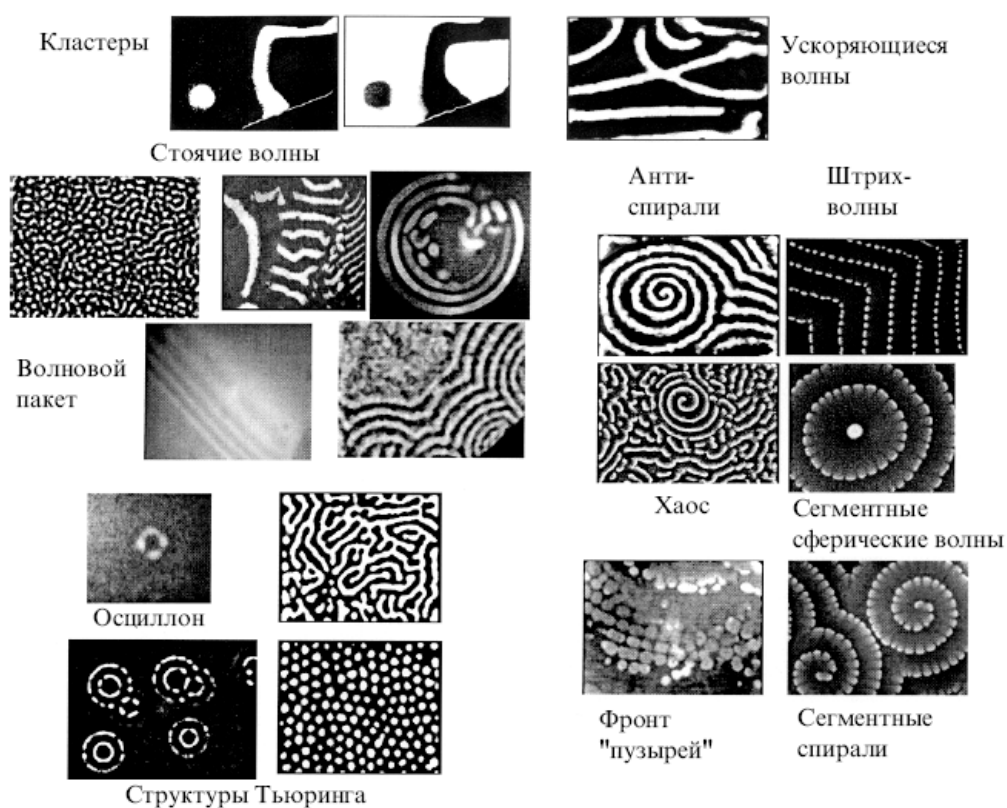


Рис. 1.2. Сводная таблица структур, обнаруженных в БЖ-АОТ системе (рисунки взяты из работы [Ванаг, 2004]).

1.1.4. Контроль пространственно-временного поведения в химических системах

Особое место занимают экспериментальные и теоретические исследования, связанные с контролем пространственно-временного поведения в

химических системах. Основная идея здесь заключается в следующем – путем введения относительно слабых внешних возмущений можно «заставить» систему демонстрировать желаемые структуры. В настоящий момент известен широкий спектр подходов, позволяющих управлять пространственно-временной динамикой в системах типа реакция-диффузия: от воздействия периодической силой или наложения геометрических ограничений и неоднородностей (статических или динамических) до использования глобальной обратной связи (см. обзоры [Mikhailov, Showalter, 2006; Vanag, Epstein, 2008] и ссылки в них). Последний метод успешно применяется в целях стабилизировать движущиеся волновые сегменты в светочувствительной реакции Белоусова-Жаботинского [Mihaliuk et al., 2002; Zykov, Showalter, 2005; Steele et al., 2008]. Стабилизированные подобные частицам сегменты распространяются в слабо возбудимой среде с постоянной скоростью в направлении, определяемом интенсивностью приложенного освещения (см. Рис. 1.3). Формируемая таким образом экспериментальная система может по праву использоваться для исследования коллективного поведения в группе взаимодействующих и способных самостоятельно совершать движение индивидов. Другой пример фотохимического контроля динамики локализованных структур, возникающих в системах типа реакция-диффузия, связан с выбором начальных условий, создаваемых освещением системы через маску той или иной формы. В работе [Yang et al., 2006] представлены результаты экспериментальных наблюдений формирования гексагональных и квадратичных сверхрешеточных структур Тьюринга (имеющих, по крайней мере, две различных характерных длины волны) в пространственно распределенной фоточувствительной реакции CDIMA (см. Рис. 1.4 (a)). Примером таких структур являются так называемые «черный глаз» или «белый глаз». Система освещается через маску, представляющую собой простую гексагональную или квадратичную решетку с длиной волны, близкой собственной длине волны структур Тьюринга. Не только формой приложенной маски, но и интенсивностью освещения, можно управлять структурами, формирующимися в светочувствительной реакции Белоусова-Жаботинского. Авторы [Kuhnert et al., 1989] проектировали негативное изображение человеческого лица на

тонкий слой реакции, изначально находящейся в однородном стационарном состоянии. Химическая система воспроизводила позитивное изображение, которое затем сменялось негативным и так далее. Если пополнения агентов не происходило, то колебания затухали через несколько минут.

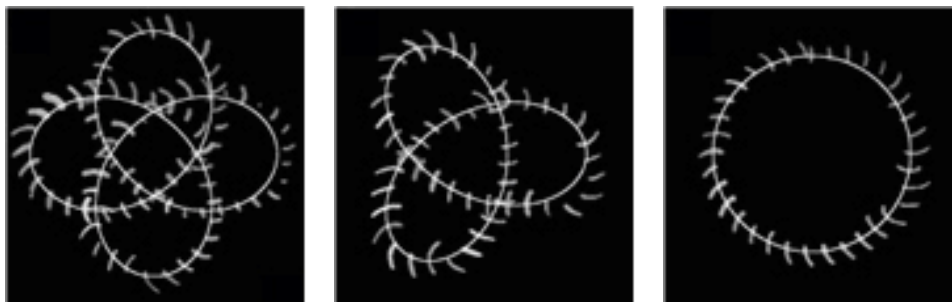


Рис. 1.3. Гипотрохоидные траектории, образованные движением стабилизированного волнового сегмента в светочувствительной реакции Белоусова-Жаботинского в результате управления направлением его движения. Каждое изображение получено наложением снимков, сделанных через определенный интервал времени. Рисунки взяты из работы [Sakurai et al., 2002].

Использование БЖ-АОТ системы [Kaminaga et al., 2006] позволило не только увеличить время хранения информации до часа, но и создать «химическую память» - систему, способную читать, записывать (или перезаписывать) и стирать данные (см. Рис. 1.4 (б)).

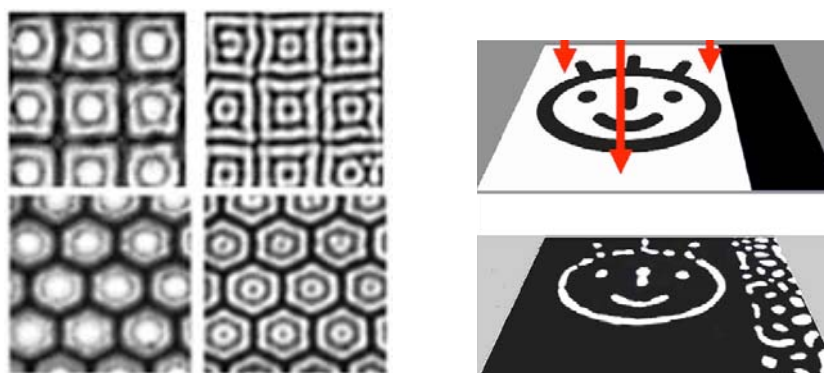


Рис. 1.4. (а) Развитие квадратичных (верхний ряд) и гексагональных (нижний ряд) сверхрешетчатых структур Тьюринга в CDIMA системе; (б) Изображение маски, запечатленное в БЖ-АОТ-системе. Рисунки взяты из работ [Yang et al., 2006; Kaminaga et al., 2006].

1.2. Математические модели, предложенные для объяснения возникающих режимов и структур

Как уже было отмечено, одним из первых предложил описать кинетику химических реакций с помощью системы дифференциальных уравнений Альфред Лотка [Lotka, 1910]. В своей последующей работе [Lotka, 1920] он отметил, что ход событий в широком классе явлений, в том числе тех, которые обычно рассматриваются в химической динамике, представляется системой дифференциальных уравнений вида

$$\begin{cases} \frac{dx_i}{dt} = f_i(x_1, x_2 \dots x_n), \\ i = 1, 2, \dots, n. \end{cases}$$

Причем относительно функции f , не сделано каких-либо предположений, а это значит, что характер взаимоотношений может быть любым. Была разработана модель взаимодействия двух видов: растений и травоядных животных [Lotka, 1920]. Позже в книге «Элементы физической биологии» [Lotka, 1925] он предложил эту модель для анализа взаимоотношений «хищник-жертва»

$$\begin{cases} \frac{dx_1}{dt} = (a_1 - b_1 x_2)x_1, \\ \frac{dx_2}{dt} = (-a_2 + b_2 x_1)x_2. \end{cases}$$

Здесь x_1, x_2 – количество жертв и хищников соответственно, a, b, c, d – коэффициенты, характеризующие взаимодействие между видами. Данная система имеет два равновесных состояния: $x_1 = x_2 = 0$ и $x_1 = \frac{a_2}{b_2}, x_2 = \frac{a_1}{b_1}$. Отклонение от последнего приводит к колебаниям численности, аналогичным колебаниям гармонического осциллятора.

В тоже время известный итальянский математик Вито Вольтерра, беседа за обедом со своим будущим зятем, ихтиологом по специальности, узнал интересный факт: снижение вылова рыбы в Адриатическом море во время первой мировой войны привело к увеличению доли хищной рыбы в

уловах. Результатом осмысления этого факта, стала предложенная им модель для описания межвидового взаимодействия [Volterra, 1926; Volterra, 1931; Вольтерра, 1976]. По сути своей она оказалась близка к модели, предложенной Лоткой, поэтому в настоящий момент носит имя обоих ученых, а также известна как модель «хищник-жертва».

Труды Лотки и Вольтерры заложили фундаментальные основы теории биологических сообществ, построенной именно как математическая теория. Модель многократно была использована для описания систем «хищник-жертва» и «паразит-хозяин», конкуренции, а также других видов взаимодействия между видами [Wangersky, 1978; Одум, 1986, Jost et al., 2005]. Кроме того она имеет длинную историю применения в экономической теории [Goodwin, 1967; Nasritdinov, Dalimov, 2010].

1.2.1. Дискретные модели

Модель Лотки-Вольтерра содержит ряд сильных упрощений. Например, не отражает распределение видов в пространстве. Однако реальные биологические системы, ровно как все системы в природе, являются неоднородными в пространстве и времени. Описывать динамику таких систем можно как дискретными, так и непрерывными моделями. В первом случае объем системы представляется в виде дискретных сетей, образованных связанными между собой активными элементами. Для каждого такого элемента задан дискретный набор возможных состояний, а также правила перехода между ними (состояние данного элемента в момент времени однозначно определено состоянием этого элемента и его близлежащих соседей по сети в предыдущий момент времени). Это означает, что мы моделируем систему как сеть «клеточных автоматов».

Первую подобную модель разработали в 1946 г. Норберт Винер и Артур Розенблют в целях исследовать различные режимы распространения возбуждения по однородной нейронной сети и ткани сердечной мышцы [Винер, Розенблют, 1961]. Авторы предложили, что каждый активный элемент может находиться в одном из трех состояний: покоя, возбуждения и рефрактерности (кратковременное снижение возбудимости). Будучи

приведенным в возбужденное состояние элемент прибывает в нем в течение некоторого времени, затем переходит в состояние рефрактерности и лишь после этого возвращается в состояние покоя. Элемент может перейти в возбужденное состояние в результате внешнего воздействия или переняв это состояние от соседнего элемента (оказавшись по соседству с возбужденным элементом) [Лоскутов, Михайлов, 1990].

Математические модели типа «клеточных автоматов» имеют широкий спектр применений [Малинецкий, Степанцев, 1997; Лобанов, 2010, Noekstra et al., 2010]. Они оказываются очень удобными для аналитических исследований. Кроме того в некоторых случаях, таких как, например, нейронные сети, живые ткани (в частности ткань сердечной мышцы), они являются единственно возможными.

1.2.2. Распределенные модели типа «реакция-диффузия»

Другой способ описания пространственно-неоднородных динамических систем - разбиение всего объема системы на маленькие элементы, описываемые дифференциальными уравнениями в частных производных с непрерывно меняющимися переменными. Такие модели называются распределенными и оказываются очень удобными при компьютерном решении задач.

Распределенные математические модели, которые демонстрируют эволюцию количества (концентрации) одного или нескольких веществ как результат двух процессов: взаимодействия между компонентами (реакции) и диффузии, - называются моделями типа «реакция-диффузия» и имеют следующий вид

$$\frac{\partial x_i}{\partial t} = f_i(x_1, x_2, \dots, x_n) + \frac{\partial}{\partial r} \left(\sum_{j=1}^n D_{ij} \frac{\partial x_j}{\partial r} \right), \quad i = 1, 2, \dots, n.$$

Здесь f_i – нелинейные функции, описывающие взаимодействие компонентов, D_{ij} – соответствующие коэффициенты диффузии. Существуют такие системы, для описания процессов самоорганизации в которых важны сложные механизмы диффузионного типа – нелинейная, анизотропная и

перекрестная диффузия (кросс-диффузия) (см. работу [Цыганов и др., 2007] и ссылки в ней). Особенно последнему случаю в настоящем уделяется много внимания [Tian et al., 2010; Fanelli et al., 2013; Rossi et al., 2013]. Однако в большинстве своем используемые математические модели являются уравнениями типа реакция-диффузия, где процессы переноса представлены изотропной диффузией. Далее мы будем рассматривать именно такие модели.

Теория реакционно-диффузионных систем берет свое начало в работах Андрея Николаевича Колмогорова, Ивана Георгиевича Петровского, Николая Семёновича Пискунова [Колмогоров и др., 1937] и Рональда Фишера [Fisher, 1937]. Мотивацией для исследований послужила популяционная биология. Авторы предложили использовать одномерное однокомпонентное реакционно-диффузионное уравнение в целях описать распространение доминирующего вида вдоль прямой. Они показали, что решение есть самоподдерживающаяся бегущая волна переключения между стационарными однородными состояниями. Определили предельную скорость перемещения фронта волны, а также его предельную форму. В 1938 году Яков Борисович Зельдович и Давид Альбертович Франк-Каменецкий использовали уравнение такого типа при построении теории теплового распространения пламени [Зельдович, Франк-Каменецкий, 1938].

Пространственно-временные структуры в системах типа реакция-диффузия были обнаружены в 1952 году в серии знаменитых работ Алана Ходжкина и Эндрю Хаксли, посвященных описанию электрических механизмов, которые обеспечивают генерацию и передачу нервных импульсов вдоль гигантского аксона кальмара [Hodgkin, Huxley, 1952]. Ученые исследовали одномерную реакционно-диффузионную систему четырех компонент. Одним из решений являлась уединенная стационарная волна - бегущий импульс, так называемая волна возбуждения.

1.2.2.1. Модель ФитцХью-Нагумо

Модель Ходжкина-Хаксли является одним из важнейших достижений в нейрофизиологии. По сути это первая завершенная математическая

модель генерации сигнала в нейроне. Однако она слишком сложна для аналитического исследования, поэтому со временем была модифицирована [Morris, Lecar, 1981; Koch, 1999; Izhikevich, 2007]. Наиболее популярная «упрощенная» модель, воспроизводящая основные свойства волн возбуждения в модели Ходжкина-Хаксли, предложена независимо Ричардом ФитцХью [FitzHugh, 1961; FitzHugh, 1968; FitzHugh, 1969] и Дж. Нагумо [Nagumo et al., 1962]. Уравнения модели составлены относительно двух переменных

$$\begin{cases} \dot{u} = u - \frac{u^3}{3} - v + D\nabla^2 u + I, \\ \dot{v} = \varepsilon(u - bv + a). \end{cases}$$

Переменная u описывает динамику мембранного потенциала, а v отвечает за его восстановление. Параметры a , b , ε – некоторые константы, причем значение ε , как правило, предполагается малым: $\varepsilon \ll 1$, а I - стимулирующий поток.

Ввиду достаточной простоты как модели, описывающей динамическое поведение нейронной активности, модель ФитцХью-Нагумо была подробно изучена. Можно отметить исследования, касающиеся хаоса, в частности его контроля, стохастического резонанса, шумовых эффектов и фильтрации, а также синхронизации [Wei et al., 2012; Wu, Zhu, 2008; Buric et al., 2010; Wang et al., 2009]. Группой исследователей из Нижегородского Государственного Университета им. Н.И. Лобачевского [Некоркин и др., 2005; Nekorkin et al., 2008; Nekorkin et al., 2010] была изучена динамика модели ФитцХью-Нагумо с нелинейным поведением восстанавливающей переменной. Проведенный анализ локальных и нелокальных бифуркаций модели, показал, что она обладает широким набором динамического поведения, включающим как достаточно простые режимы (классический триггерный - покой-покой, колебательный и возбудимый), так и более сложные режимы, одновременно совмещающие, например, возбудимые и колебательные свойства.

Кроме того данная модель имеет применение в теоретических исследованиях реакции Белоусова-Жаботинского [Васильев и др., 1987; Zhao et al., 2011; Kinoshita et al., 2013].

1.2.2.2. Модели тьюринговского типа

Важный класс моделей, позволяющих описать раскраску шкур животных, крыльев бабочек, форму ракушек, удивительное наблюдаемое в Африке явление «tiger bush» и многое другое [Maini, Othmer, 2001; Meinhardt, 2003; Maini et al., 2012; Murray, 2002, 2003], основан на идее Алана Тьюринга, предложенной им в работе «Химические основы морфогенеза» [Turing, 1952]. Ее суть сводится к следующему. Изначально однородная система, где протекает химическая реакция между веществами, скорость диффузии которых недостаточна для полного перемешивания может потерять устойчивость относительно некоторого диапазона длин волн. Ключевую роль здесь играет неустойчивость, обусловленная диффузией, разрушающая исходное стационарное состояние и вызывающая переход в новое, пространственно неоднородное. Если предположить, что активная химическая среда создается заполняющими данный объем клетками, то переход системы в пространственно неоднородное состояние послужит предпосылкой к различному поведению клеток, оказавшихся в разном химическом окружении, в частности к их дифференцировке. Так называемая химическая «предструктура» зафиксируется в биологической форме.

Исследуя однородную реакционно-диффузионную систему двух компонент, Тьюринг получил в общем виде условия того, что однородное распределение реагирующих и диффундирующих химических веществ становится неустойчивым: в системе должен присутствовать автокатализ, и коэффициенты диффузии компонентов должны быть различными (точнее, автокаталитическая переменная должна иметь меньший коэффициент диффузии). Диффузионная неустойчивость, в этом случае, в настоящем известная как неустойчивость Тьюринга, приводит к формированию периодических в пространстве и стационарных во времени концентрационных структур. Позже Пригожин назвал такие структуры диссипативными [Пригожин, 1973]. А наблюдать их экспериментально удалось лишь в 1990 году в СИМА - системе [Castets et al., 1990]. Последовавшие затем работы [Lengyel, Epstein 1991; Lengyel, Epstein, 1992; Ouyang, Swinney, 1991] по-

зволили теоретически обосновать структуры Тьюринга и продемонстрировали разнообразие возможных типов.

Следует заметить, что линейный анализ модели реакционно-диффузионного типа выделяет также другой тип диффузионной неустойчивости, называемый волновой неустойчивостью. В этом случае образуются периодические в пространстве и времени волны или структуры [Романовский и др., 2004].

Ярким примером модели тьюринговского типа является модель, разработанная Альфредом Гирером и Гансом Майнхардтом [Gierer, Meinhardt, 1972]. Основываясь на ряде экспериментальных наблюдений достаточно простого организма, но уже проявляющего типичные черты биологической самоорганизации, гидры [Trembley, 1744; Webster, Wolpert, 1966] авторы предложили механизм морфогенеза. Модель постулирует наличие двух агентов, действующих противоположным образом: локально действующего активатора, который индуцирует образование головы гидры, и ингибитора, подавляющего эффект активатора. Эта схема была реализована авторами в ряде математических моделей [Gierer, 1981; Meinhardt, 1982], наиболее известная из которых имеет следующий вид:

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = \rho \frac{u^2}{v} - \mu_u u + D_u \nabla^2 u, \\ \frac{\partial v}{\partial t} = \rho u^2 - \mu_v v + D_v \nabla^2 v. \end{cases}$$

Здесь u , v – активаторная и ингибиторная переменные, ρ – коэффициент, описывающий способность клеток выполнять автокаталитическую реакцию, μ_u , μ_v – коэффициенты понижения. Модель демонстрировала хорошее качественное соответствие эксперименту в случаях, когда в системе имел место автокатализ первой переменной, а коэффициент диффузии ингибитора, значительно превышал коэффициент диффузии активатора, то есть имела место быть тьюринговская неустойчивость. К сожалению, позже было установлено, что реальные химические факторы, активирующие и подавляющие формирование головы гидры, находятся не в том химическом взаимодействии, которое диктуется моделью.

Модель Гирера-Майнхардта по праву может рассматриваться в качестве модели для изучения основных особенностей биологического развития. За последние десять лет тот факт, что основные механизмы развития организмов различной степени организации схожи, был многократно подтвержден [Meinhardt, 2008; Gierer, 2012; Meinhardt, 2012]. В настоящий момент существует целый класс моделей, исследующих кишечнополостные организмы (кораллы, актинии, медузы и др.) в целях выявления ключевых аспектов развития животных (например, таких как формирование третьего зародышевого слоя (мезодермы) или нервной системы) [Technau, Steele, 2011].

1.2.2.3. Орегонатор и Брюсселятор

Открытие химических колебательных реакций, в частности реакции Белоусова-Жаботинского, поставило множество вопросов, например, какие атомы и молекулы взаимодействуют между собой, какие химические вещества получаются в результате? Ответ был получен группой ученых - Ричард Филд, Эндрю Керош и Ричард Нойес, предложившими механизм, впоследствии названный FKN механизмом, согласно которому детальная схема реакции насчитывает более 20 промежуточных стадий [Field et al., 1972]. Существенные особенности FKN механизма были отражены в трехкомпонентной модели «Орегонатор» (получившей название по имени университета штата Орегон (США), в котором модель была разработана) [Field, Noyes, 1974a, Field, Noyes, 1974b]. Со временем количество переменных модели было сокращено до двух [Tyson, Fife, 1980]:

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon} \left(u(1-u) - fv \frac{u-q}{q+u} \right) + D_u \nabla^2 u, \\ \frac{\partial v}{\partial t} = u - v. \end{cases}$$

Здесь параметры f , q , ε – некоторые константы, причем значение ε предполагается малым: $\varepsilon \ll 1$. Двух- и трехкомпонентный Орегонатор часто используются для моделирования процессов, происходящих в реакции Белоусова-Жаботинского [Jahnke et al., 1989; Gong, Christini, 2003]. Кроме того

существует великое множество разнообразных модификаций данной модели, позволяющих описать различные экспериментальные конфигурации [Pullela et al., 2009; Berenstein, Beta, 2011], в частности, светочувствительную реакцию Белоусова-Жаботинского [Krug et al., 1990; Kadar et al., 1997]. «Светочувствительный вариант» Орегонатора используется группой Шоултера в численных экспериментах, воспроизводящих движение стабилизированных волновых сегментов [Steele et al., 2008]. Авторы работы [Kaminaga et al., 2006] дополняют данный вариант модели членом, учитывающим, что фоточувствительным является только окисленное состояние катализатора, в целях продемонстрировать, как осуществляется механизм хранения информации в светочувствительной БЖ-АОТ системе.

Одной из наиболее простых моделей, описывающих на качественном уровне все процессы, наблюдаемые в реакции Белоусова-Жаботинского, а также в других колебательных химических реакциях, является предложенная в 1968 году И. Пригожиным и Р. Лефевром модель [Prigogine, Lefever, 1971], получившая название по месту создания (Брюссель) «Брюсселятор» [Tyson, 1973]. Брюсселятор отражает процесс протекания периодической реакции в открытой системе между двумя видами непрерывно поступающих в реактор веществ

$$\begin{cases} \frac{\partial x}{\partial t} = a - (b+1)x + x^2y + D_x \nabla^2 x, \\ \frac{\partial y}{\partial t} = bx - x^2y + D_y \nabla^2 y, \end{cases}$$

где a , b – постоянные концентрации поступающих реагентов. Вследствие достаточной простоты (модель имеет единственное стационарное состояние $x_0 = a$, $y_0 = b/a$) модель часто становится предметом аналитических и численных исследований. Практически досконально изучена пространственно-временная динамика, вызванная бифуркациями Тьюринга и Андронова-Хопфа как по отдельности, так и в окрестности бифуркационной точки коразмерности два [Nicolis, Prigogine, 1977; De Wit, 1999; Pena, Perez-Garcia, 2001]. В настоящем предложены некоторые модификации модели Брюсселятор - стохастическая [Biancalani et al., 2010], решеточная [Bullara, 2013], а также расширенная за счет добавления быстро диффундирующего

ингибитора [Yang et al., 2002; Ванг, 2004]. В последней версии наряду с бифуркацией Тьюринга реализуются и волновая неустойчивость, а это означает, что модель обладает большим набором всевозможных пространственно-временных поведений [Борина, Полежаев, 2011].

ГЛАВА 2

ДИФФУЗИОННАЯ НЕУСТОЙЧИВОСТЬ В ТРЕХКОМПОНЕНТНОЙ МОДЕЛИ ТИПА «РЕАКЦИЯ-ДИФфуЗИЯ»

2.1. Введение

В 1952 году Алан Тьюринг в работе под названием «Химические основы морфогенеза» [Turing, 1952] опубликовал исследования, посвященные математической теории образования структур в изначально однородной системе, где протекает химическая реакция между веществами, скорость диффузии которых недостаточна для полного перемешивания. Согласно Тьюрингу система, находящаяся в однородном состоянии, о чем свидетельствует отрицательное собственное значение характеристического уравнения линеаризованной системы при нулевом волновом числе, может потерять устойчивость относительно соответствующих длин волн в некотором диапазоне волновых чисел, то есть одно из собственных значений становится положительным. Ключевую роль здесь играет неустойчивость, обусловленная диффузией, разрушающая исходное стационарное состояние и вызывающая переход в новое, пространственно неоднородное.

Диффузионная неустойчивость, которая приводит к формированию периодических в пространстве и стационарных во времени концентрационных структур, диссипативных структур, носит название тьюринговской неустойчивости. В данном случае в соответствующей линеаризованной системе одно из собственных чисел становится положительным в некотором диапазоне волновых чисел, оставаясь действительным. Тьюринг подробно исследовал условия возникновения данной неустойчивости для системы двух компонент. Он показал, что в системе должен присутствовать автокатализ, и коэффициенты диффузии компонент должны быть раз-

личными (точнее, автокаталитическая переменная должна иметь меньший коэффициент диффузии).

Другой тип диффузионной неустойчивости, называемый волновой неустойчивостью, связан с тем, что положительной в ограниченном диапазоне волновых чисел становится действительная часть пары комплексно-сопряженных собственных чисел характеристического уравнения. Это порождает периодические в пространстве и времени волны или структуры. Следует отметить, что в двухкомпонентной реакционно-диффузионной модели возможна лишь тьюринговская неустойчивость, но не волновая. Последняя может возникнуть только в системе, размерность которой не меньше трех. Системы такого рода уже исследовались ранее. Так в работе [Еленин, Куркина, 1994] исследована диффузионная неустойчивость в трехкомпонентных системах типа реакция-диффузия, при этом в довольно общем виде выяснено, какими свойствами должны обладать матрицы Якоби и диффузии, чтобы устойчивое в точечной системе стационарное состояние стало неустойчивым при наличии диффузии.

В данной главе мы аналитически получим в явном виде условия возникновения неустойчивости трехкомпонентной системе типа «реакция-диффузия» для случая диагональной матрицы диффузии. Выявим качественные свойства, которыми должна обладать система, чтобы в ней могла произойти та или другая бифуркация. Покажем, что условия тьюринговской и волновой неустойчивостей не противоречат друг другу и могут выполняться одновременно. Полученные результаты позволяют достаточно легко проводить полный параметрический анализ систем такого рода, что продемонстрировано нами на примере модели модифицированного Брюсселятора (к стандартным двум уравнениям добавлено еще одно, линейное, уравнение). Во второй части главы мы приведем результаты численного счета для данной модели для наборов параметров, соответствующих различным областям параметрического пространства, при этом продемонстрируем, что при выполнении соответствующих условий в системе действительно возникают структуры, которые согласуются с предсказаниями линейного анализа и которые сходны тем, что наблюдаются в экспериментах [Ванаг, 2004].

2.2. Линейный анализ модели

Рассмотрим систему из трех дифференциальных уравнений следующего вида:

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = f(u, v, w) + D_1 \nabla^2 u, \\ \frac{\partial v}{\partial t} = g(u, v, w) + D_2 \nabla^2 v, \\ \frac{\partial w}{\partial t} = h(u, v, w) + D_3 \nabla^2 w. \end{cases} \quad (2.1)$$

Здесь f, g, h – нелинейные функции, описывающие взаимодействие переменных, D_1, D_2, D_3 – соответствующие коэффициенты диффузии. Пусть (u^0, v^0, w^0) – однородное стационарное состояние системы (то есть при этих значениях переменных обращаются в ноль правые части уравнений (2.1)), причем оно устойчиво в отсутствие диффузии. Найдем условия, при которых диффузия приводит к нарушению однородного состояния. Линеаризуем уравнения (2.1) около стационарной точки (u^0, v^0, w^0) :

$$\begin{cases} \frac{\partial \bar{u}}{\partial t} = a_{11} \bar{u} + a_{12} \bar{v} + a_{13} \bar{w} + D_1 \nabla^2 \bar{u}, \\ \frac{\partial \bar{v}}{\partial t} = a_{21} \bar{u} + a_{22} \bar{v} + a_{23} \bar{w} + D_2 \nabla^2 \bar{v}, \\ \frac{\partial \bar{w}}{\partial t} = a_{31} \bar{u} + a_{32} \bar{v} + a_{33} \bar{w} + D_3 \nabla^2 \bar{w}. \end{cases} \quad (2.2)$$

Здесь a_{ij} ($i, j=1,2,3$) – постоянные коэффициенты, равные соответствующим частным производным, вычисленным в стационарной точке, \bar{u}, \bar{v} и \bar{w} – малые отклонения от положения равновесия u^0, v^0 и w^0 соответственно. Представив их пропорциональными $\exp(i\vec{k}\vec{r} + \lambda t)$ и подставив в систему (2.2), найдём дисперсионное уравнение

$$\begin{vmatrix} a_{11} - k^2 D_1 - \lambda & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} - k^2 D_2 - \lambda & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} - k^2 D_3 - \lambda \end{vmatrix} = 0,$$

или

$$\lambda^3 - A\lambda^2 + B\lambda - C = 0, \quad (2.3)$$

где

$$\begin{aligned}
A &= \sigma - k^2(D_1 + D_2 + D_3), \\
B &= \Sigma - k^2(D_1(a_{22} + a_{33}) + D_2(a_{11} + a_{33}) + D_3(a_{11} + a_{22})) + k^4(D_1D_2 + D_1D_3 + D_2D_3), \\
C &= \Delta - k^2 \sum_{i=1}^3 D_i \Theta_i + k^4 \cdot (D_1D_2a_{33} + D_1D_3a_{22} + D_2D_3a_{11}) - k^6 D_1D_2D_3.
\end{aligned}$$

Здесь $\sigma = a_{11} + a_{22} + a_{33}$ - след характеристической матрицы $\{a_{ij}\}$,
 $\Delta = a_{11}(a_{22}a_{33} - a_{23}a_{32}) - a_{12}(a_{21}a_{33} - a_{23}a_{31}) + a_{13}(a_{21}a_{32} - a_{22}a_{31})$ - ее детерминант;
 $\Sigma = \sum_{i=1}^3 \Theta_i$, где $\Theta_i = a_{jj}a_{ll} - a_{jl}a_{lj}$, $i \neq j \neq l$.

Уравнение (2.3) – кубическое с действительными коэффициентами. Пусть $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ – его корни. Как легко проверить, коэффициенты кубического уравнения и его корни связаны соотношениями:

$$\begin{cases}
A = \Lambda_1 + \Lambda_2 + \Lambda_3, \\
B = \Lambda_1\Lambda_2 + \Lambda_2\Lambda_3 + \Lambda_1\Lambda_3, \\
C = \Lambda_1\Lambda_2\Lambda_3, \\
AB - C = (\Lambda_1 + \Lambda_2)(\Lambda_2 + \Lambda_3)(\Lambda_1 + \Lambda_3).
\end{cases} \quad (2.4)$$

Исследуемое состояние устойчиво, если для всех собственных значений характеристического уравнения $\text{Re } \Lambda_i(k^2) < 0$, $i = 1, 2, 3$. Однородное состояние системы устойчиво тогда и только тогда, когда

$$\begin{cases}
A < 0, \\
B > 0, \\
C < 0, \\
AB - C < 0.
\end{cases} \quad (2.5)$$

Поскольку в отсутствие диффузии ($k^2 = 0$) однородное стационарное состояние системы по предположению устойчиво, то неравенства (2.5) принимают вид

$$\begin{cases}
\sigma < 0, \\
\Sigma > 0, \\
\Delta < 0, \\
\sigma \cdot \Sigma - \Delta < 0.
\end{cases} \quad (2.6)$$

Определим те значения параметров, при которых однородное состояние системы становится неустойчивым, то есть существуют такие $k \neq 0$, что хотя бы для одного $\lambda_i(k^2)$ ($i = 1, 2, 3$), $\text{Re } \lambda_i(k^2) > 0$. Нарушение любого из неравенств (2.5) означает, что в системе произошла бифуркация потери устойчивости однородного состояния. Однако, в силу условий

(2.6), $\Delta < 0$ при любых k . Второе неравенство в (2.5) не может быть нарушено, если выполняются все остальные условия. Таким образом, либо нарушается условие $C < 0$, что в силу соотношений (2.4) означает появление в системе действительного положительного собственного числа, либо нарушается условие $AB - C < 0$, и тогда возникает пара комплексно-сопряженных собственных чисел с положительной действительной частью. Первый случай соответствует тьюринговской, а второй – волновой бифуркациям. Рассмотрим каждый из них более подробно.

2.3. Бифуркация Тьюринга

Найдем область параметров, соответствующую тьюринговской неустойчивости. Представим функцию $C(k^2)$ в виде $C(k^2) = \Delta - \alpha_T k^2 + \beta_T k^4 - \delta_T k^6$, где $\alpha_T = \sum_{i=1}^3 D_i \Theta_i$, $\beta_T = D_1 D_2 a_{33} + D_1 D_3 a_{22} + D_2 D_3 a_{11}$, $\delta_T = D_1 D_2 D_3$.

Функция $C(x)$ является кубической параболой, которая монотонно убывает, если $\beta_T^2 - 3\alpha_T \delta_T \leq 0$. В противном случае парабола имеет локальные экстремумы, при этом максимум равен

$$C_{\max}(k_0^2) = \Delta + \frac{1}{27\delta_T^2} \left\{ 2(\beta_T^2 - 3\alpha_T \delta_T)^{\frac{3}{2}} + \beta_T (2\beta_T^2 - 9\alpha_T \delta_T) \right\}$$

и достигается в точке $k_0^2 = \frac{1}{3\delta_T} (\beta_T + \sqrt{\beta_T^2 - 3\alpha_T \delta_T})$.

Для бифуркации Тьюринга необходимо, чтобы в некотором диапазоне волновых чисел $C(k^2)$ стала больше нуля. Таким образом, для того, чтобы в системе имела место тьюринговская неустойчивость, необходимо выполнение условия

$$C_{\max}(k_0^2) = \Delta + \frac{1}{27\delta_T^2} \left\{ 2(\beta_T^2 - 3\alpha_T \delta_T)^{\frac{3}{2}} + \beta_T (2\beta_T^2 - 9\alpha_T \delta_T) \right\} > 0, \quad (2.7)$$

при этом одновременно должны выполняться неравенства (2.6).

Неравенство (2.7) может быть выполнено, только если $\beta_T > 0$, а это возможно, если хотя бы один из коэффициентов 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. Таким образом, качественные условия возникновения диссипативных структур для трехкомпонентных моделей такие же, как и для двухкомпонентных.

Найдем приближенное выражение для неравенства (2.7). Предположим, что $a_{11} > 0$, и потребуем, чтобы $D_2, D_3 \gg D_1$. После несложных преобразований получим следующие оценки:

$$C_{\max}(k_0^2) \approx \Delta + \frac{4}{27} \frac{D_2 D_3 a_{11}^3}{D_1^2}, \quad k_0^2 \approx \frac{2a_{11}}{3D_1}.$$

Итак, в пределе, когда коэффициент диффузии первой, автокаталитической, переменной значительно меньше двух других, однородное стационарное состояние реакционно-диффузионной системы типа (2.1) неустойчиво по Тьюрингу, если параметры этой системы удовлетворяют условиям

$$a_{11} > 0, \sigma < 0, \Sigma > 0, \Delta < 0, \sigma \cdot \Sigma - \Delta < 0, \frac{D_2 D_3}{D_1^2} > \frac{27}{4} \frac{(-\Delta)}{a_{11}^3}. \quad (2.8)$$

2.4. Волновая неустойчивость

Для нахождения области в параметрическом пространстве, соответствующей волновой неустойчивости, введём функцию $F(k^2) = AB - C = \sigma\Sigma - \Delta - \alpha_V k^2 + \beta_V k^4 - \delta_V k^6$. Здесь

$$\begin{aligned} \alpha_V &= D_1(\sigma^2 - a_{11}^2 - a_{12}a_{21} - a_{13}a_{31}) + D_2(\sigma^2 - a_{22}^2 - a_{12}a_{21} - a_{23}a_{32}) + D_3(\sigma^2 - a_{33}^2 - a_{13}a_{31} - a_{23}a_{32}), \\ \beta_V &= (D_1 + D_3)(D_2 + D_3)(a_{11} + a_{22}) + (D_1 + D_2)(D_2 + D_3)(a_{11} + a_{33}) + (D_1 + D_2)(D_1 + D_3)(a_{22} + a_{33}), \\ \delta_V &= (D_1 + D_2)(D_2 + D_3)(D_1 + D_3). \end{aligned}$$

Как и в предыдущем случае, функция $F(k^2)$ имеет локальные экстремумы, если $\beta_V^2 - 3\alpha_V\delta_V > 0$. Точка максимума k_0^2 и максимум функции $F(k^2)$ даются соотношениями

$$\begin{aligned} k_0^2 &= \frac{1}{3\delta_V} \left(\beta_V + \sqrt{\beta_V^2 - 3\alpha_V\delta_V} \right), \\ F_{\max}(k_0^2) &= \sigma \cdot \Sigma - \Delta + \frac{1}{27\delta_V^2} \left\{ 2(\beta_V^2 - 3\alpha_V\delta_V)^{\frac{3}{2}} + \beta_V(2\beta_V^2 - 9\alpha_V\delta_V) \right\}. \end{aligned}$$

Таким образом, для того, чтобы в системе имела место волновая неустойчивость, наряду с выполнением неравенств (2.6) необходимо выполнение условия

$$F_{\max}(k_0^2) = \sigma \cdot \Sigma - \Delta + \frac{1}{27\delta_V^2} \left\{ 2(\beta_V^2 - 3\alpha_V \delta_V)^2 + \beta_V (2\beta_V^2 - 9\alpha_V \delta_V) \right\} > 0. \quad (2.9)$$

Как и в случае, рассмотренном выше, неравенство (2.9) может быть выполнено, только если $\beta_V > 0$, но в данном случае это возможно, если сумма двух членов матрицы $\{a_{ij}\}$, стоящих на главной диагонали, больше нуля, и коэффициент диффузии, соответствующий третьей переменной, достаточно велик по сравнению с двумя остальными. Если он существенно больше, то неравенство (2.9) можно представить в более простом приближенном виде. Пусть для определенности $(a_{11} + a_{22}) > 0$ и $D_3 \gg D_1, D_2$. Положим $D_3 = D$, $D_2 = \varepsilon q D$, $D_1 = \varepsilon D$, где ε - мало, а q порядка единицы. Тогда

$$\begin{aligned} \alpha_V &= D[\varepsilon(\sigma^2 - a_{11}^2 - a_{12}a_{21} - a_{13}a_{31}) + \varepsilon q(\sigma^2 - a_{22}^2 - a_{12}a_{21} - a_{23}a_{32}) + (\sigma^2 - a_{33}^2 - a_{13}a_{31} - a_{23}a_{32})] = \\ &= D(\sigma^2 - a_{33}^2 - a_{13}a_{31} - a_{23}a_{32}) + O(\varepsilon), \\ \beta_V &= D^2 \{ (a_{11} + a_{22})(1 + \varepsilon)(1 + \varepsilon q) + (a_{11} + a_{33})(\varepsilon + \varepsilon q)(\varepsilon q + 1) + (a_{22} + a_{33})(\varepsilon + \varepsilon q)(\varepsilon + 1) \} = \\ &= D^2(a_{11} + a_{22}) + O(\varepsilon), \\ \delta_V &= D^3(\varepsilon + \varepsilon q)(\varepsilon q + 1)(\varepsilon + 1) = D^3\varepsilon(1 + q) + O(\varepsilon^2). \end{aligned}$$

В предположении того, что $\varepsilon \ll 1$, а также используя равенство $(1 + q)\varepsilon = (D_1 + D_2)/D_3$, получим следующую оценку:

$$F_{\max}(k_0^2) \approx \sigma \Sigma - \Delta + \frac{4(a_{11} + a_{22})^3}{27} \left(\frac{D_3}{D_1 + D_2} \right)^2, \quad k_0^2 \approx \frac{2(a_{11} + a_{22})}{3(D_1 + D_2)}.$$

Таким образом, в предположении большого коэффициента диффузии третьей переменной ($D_3 \gg D_1, D_2$), в реакционно-диффузионной системе типа (2.1) возникнет волновая неустойчивость, если параметры этой системы удовлетворяют условиям

$$(a_{11} + a_{22}) > 0, \sigma < 0, \Sigma > 0, \Delta < 0, \sigma \cdot \Sigma - \Delta < 0, \left(\frac{D_1 + D_2}{D_3} \right)^2 < \frac{4}{27} \frac{(a_{11} + a_{22})^3}{(\Delta - \sigma \cdot \Sigma)}. \quad (2.10)$$

Следует заметить, что условия (2.8) и (2.10) могут выполняться одновременно.

2.5. Численные эксперименты

2.5.1. Математическая модель

Для описания и моделирования экспериментальных фактов мы предлагаем хорошо известную модель «Брюсселятор», расширенную добавлением быстро диффундирующего ингибитора (w):

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = \mu(a - (1+b)u + u^2v - cu + dw) + D_1 \nabla^2 u, \\ \frac{\partial v}{\partial t} = bu - u^2v + D_2 \nabla^2 v, \\ \frac{\partial w}{\partial t} = cu - dw + D_3 \nabla^2 w. \end{cases} \quad (2.11)$$

Стационарная точка системы (2.11) имеет координаты $(a, b/a, ac/d)$. С учетом этого находим матрицу коэффициентов линеаризованной модели

$$(2.11): A = \begin{pmatrix} \mu(b-c-1) & \mu a^2 & \mu d \\ -b & -a^2 & 0 \\ c & 0 & -d \end{pmatrix}.$$

Для матрицы A находим $\sigma = \mu(b-c-1) - a^2 - d$, $\Sigma = a^2(\mu(1+c)+d) - \mu d(b-1)$, $\Delta = -\mu a^2 d$, $\sigma \Sigma - \Delta = (\mu(b-c-1) - a^2 - d) \cdot (a^2(\mu(1+c)+d) - \mu d(b-1)) + \mu a^2 d$.

2.5.2. Параметрический анализ

Зафиксируем шесть из восьми параметров: $\mu=10$, $a=3$, $b=4$, $c=2$, $D_1=1$, $D_3=50$. Параметры d и D_2 будем варьировать, при этом значения параметра d будем выбирать так, чтобы выполнялись условия (2.6). Используя точные условия бифуркаций (2.7) и (2.9), выделим области в плоскости параметров d , D_2 , отвечающие неустойчивостям Тьюринга (Ω_1) и волновой (Ω_2) (Рис. 2.1). Область их пересечения ($\Omega_1 \cap \Omega_2$) соответствует наличию обеих неустойчивостей. В области Ω_0 состояние системы устойчиво.

Зафиксируем параметр $d=7.5$. В зависимости от значения коэффициента диффузии D_2 получим значения действительной и мнимой части критического корня дисперсионного уравнения (Рис. 2.2).

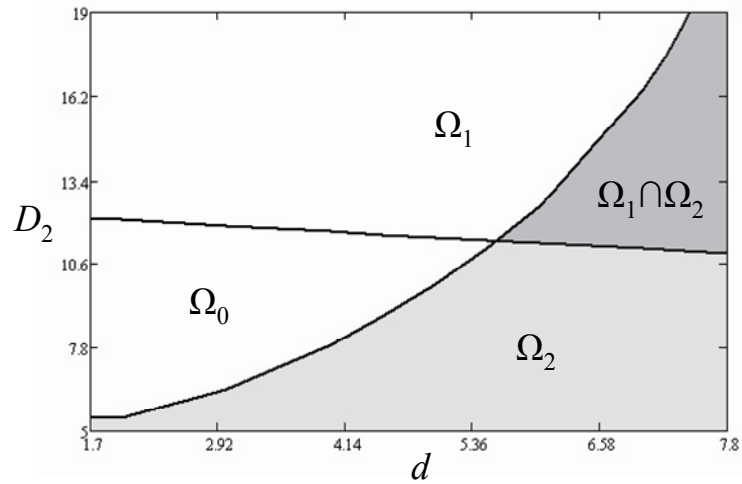


Рис. 2.1. Плоскость параметров d, D_2 модели (2.11). Области Ω_1 (неустойчивость Тьюринга), Ω_2 (волновая неустойчивость), $\Omega_1 \cap \Omega_2$ (волновая и тьюринговская неустойчивости одновременно), Ω_0 (устойчивое состояние). Параметры модели: $\mu=10, a=3, b=4, c=2, D_1=1, D_3=50$.

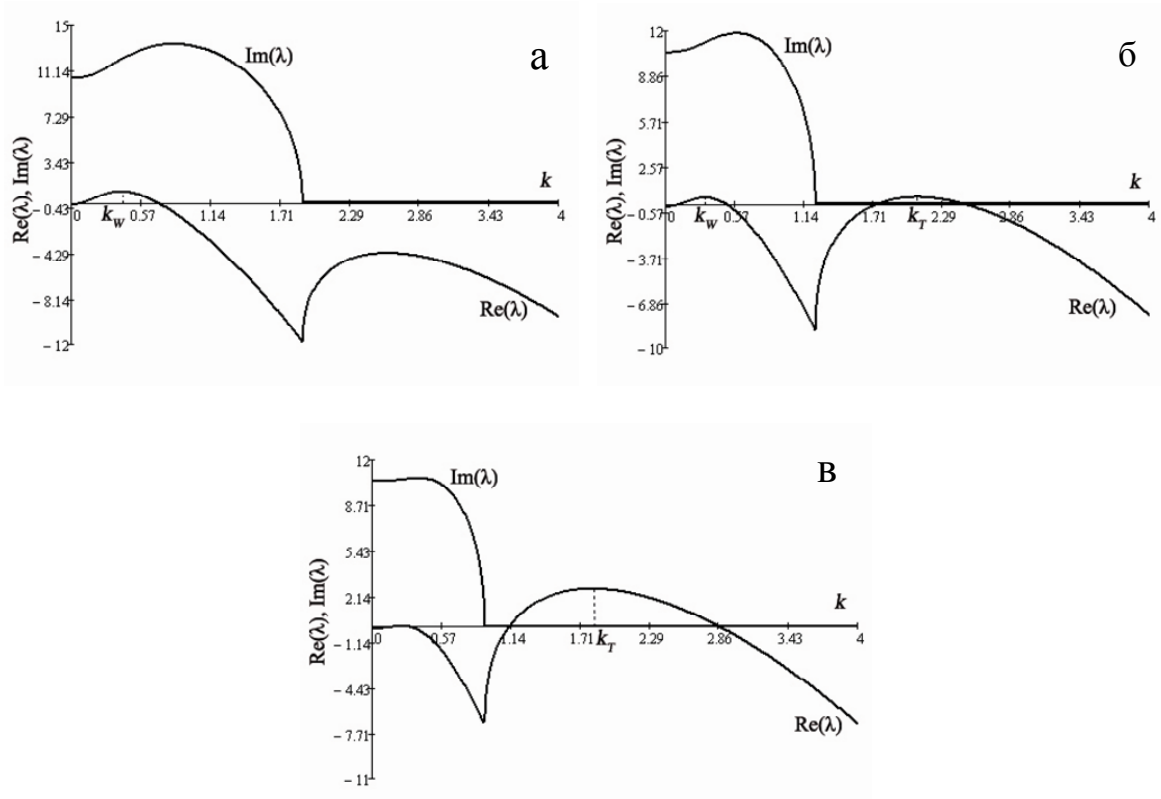


Рис. 2.2. Действительная и мнимая части критического корня линеаризованной модели (2.11): (а) волновая неустойчивость, (б) и тьюринговская неустойчивости одновременно, (в) неустойчивость Тьюринга. Параметры модели: $\mu=10, a=3, b=4, c=2, d=7.5, D_1=1, D_2=6$ (а), 12 (б), 19 (в), $D_3=50$.

Дисперсионные кривые на Рис. 2.2 (б) получены в системе, параметры которой одновременно удовлетворяют условиям возникновения как неустойчивости Тьюринга (2.7) так и волновой неустойчивости (2.9). Бифуркации при этом будут происходить в различных непересекающихся диапазонах волновых чисел, причем $k_T > k_W$ (здесь k_T , k_W - волновые числа, соответствующее максимальному значению действительной части критического корня дисперсионного уравнения в случае тьюринговской и волновой неустойчивостей).

2.5.3. Результаты численных экспериментов

Численное исследование системы (2.11) производилось в области $0 \leq x \leq L$, $0 \leq y \leq L$ методом переменных направлений (см. Приложение). В начальный момент времени система находится в однородном стационарном

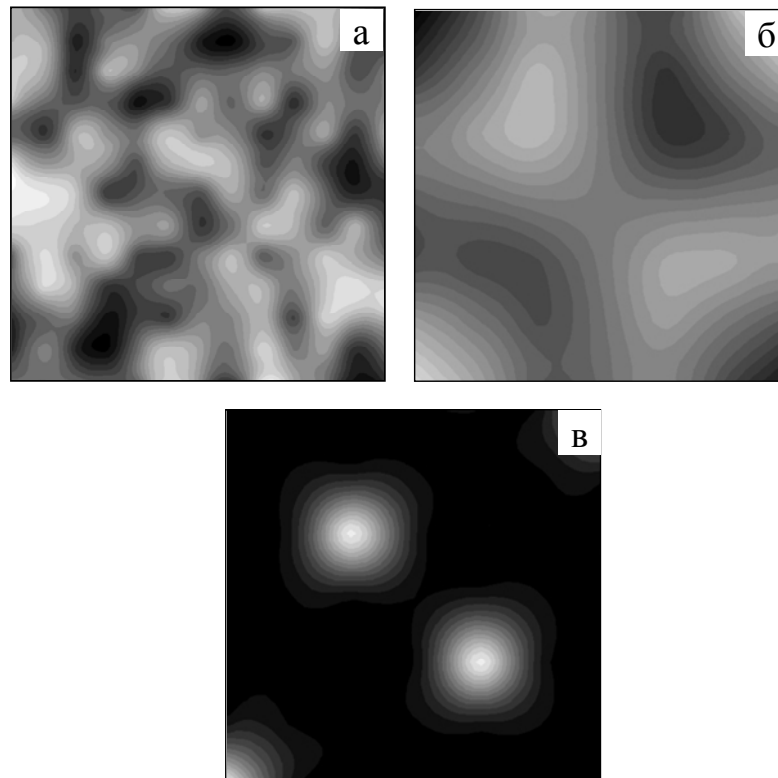


Рис. 2.3. Структуры Тьюринга в модели (2.11) в моменты времени: (а) $t=3$, (б) $t=100$, (в) $t=280$. Параметры модели: $\mu=10$, $a=3$, $b=4$, $c=2$, $d=7.5$, $D_1=1$, $D_2=9$, $D_3=50$. Размер области 6×6 .

состоянии (со значениями $u^0 = a$, $v^0 = b/a$, $w^0 = ac/d$), модулированном случайным пространственным шумом.

Рассмотрим случай, когда реализуются обе бифуркации (дисперсионные кривые (б) на Рис. 2.2). Как известно, характерный масштаб пространственной структуры (длина волны) и диапазон значений волнового числа связаны соотношением $\lambda = \frac{2\pi}{k}$. Ранее было отмечено, что $k_T > k_W$, поэтому в области относительно небольшого размера может возникать лишь неустойчивость Тьюринга. Стационарная диссипативная структура, которая формируется в этом случае, показана на Рис. 2.3. В качестве граничных условий были выбраны нулевые потоки.

Если увеличить размер области, в системе возникнет и будет доминировать волновая неустойчивость. Пространственно-временная структура, которая формируется при этом, зависит от конкретного выбора параметров. В наших численных экспериментах мы наблюдали бегущие волны, показанные на Рис. 2.4. В качестве граничных условий были выбраны нулевые потоки (условия Неймана).

Границы области оказывают достаточно сильное влияние на вид возникающих пространственно-временных структур. Если изменить граничные условия на циклические, в системе так же формируются бегущие волны, но иного вида. Это продемонстрировано на Рис. 2.5.

В области параметров, близкой к бифуркационной кривой, в системе с нулевыми потоками на границах реализуются стоячие волны, как показано на Рис. 2.6. В системе с циклическими граничными условиями структуры такого рода не формируются. Это подтверждает Рис. 2.7, который демонстрирует, как небольшое локальное возмущение порождает бегущие волны.

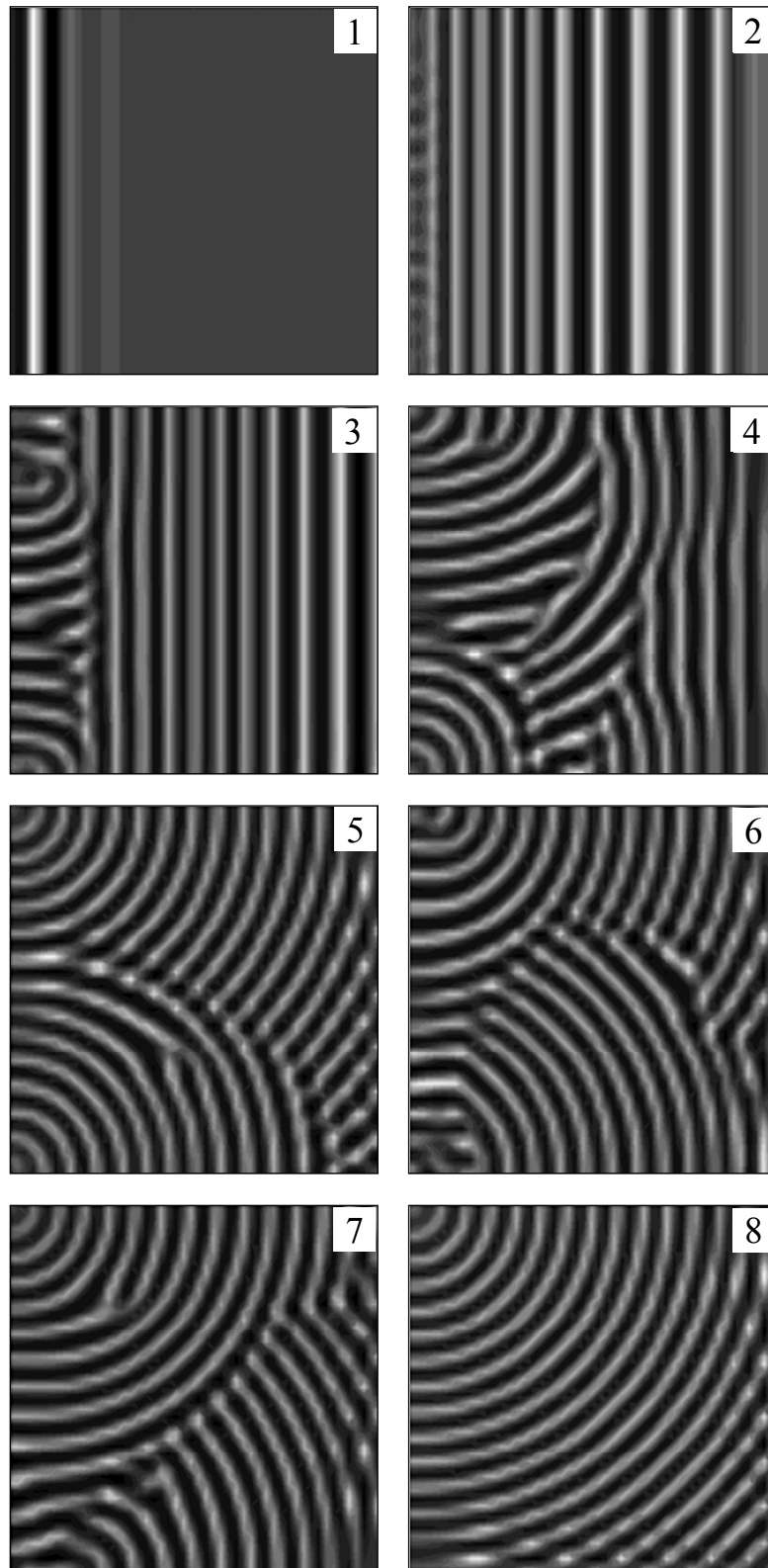


Рис. 2.4. Бегущие волны в модели (2.11) в моменты времени: (1) $t=30$, (2) $t=160$, (3) $t=280$, (4) $t=480$, (5) $t=1000$, (6) $t=1160$, (7) $t=1315$, (8) $t=1600$. В качестве граничных условий выбраны нулевые потоки. Параметры модели: $\mu=10$, $a=3$, $b=4$, $c=2$, $d=7.5$, $D_1=1$, $D_2=9$, $D_3=50$. Размер области 300×300 .

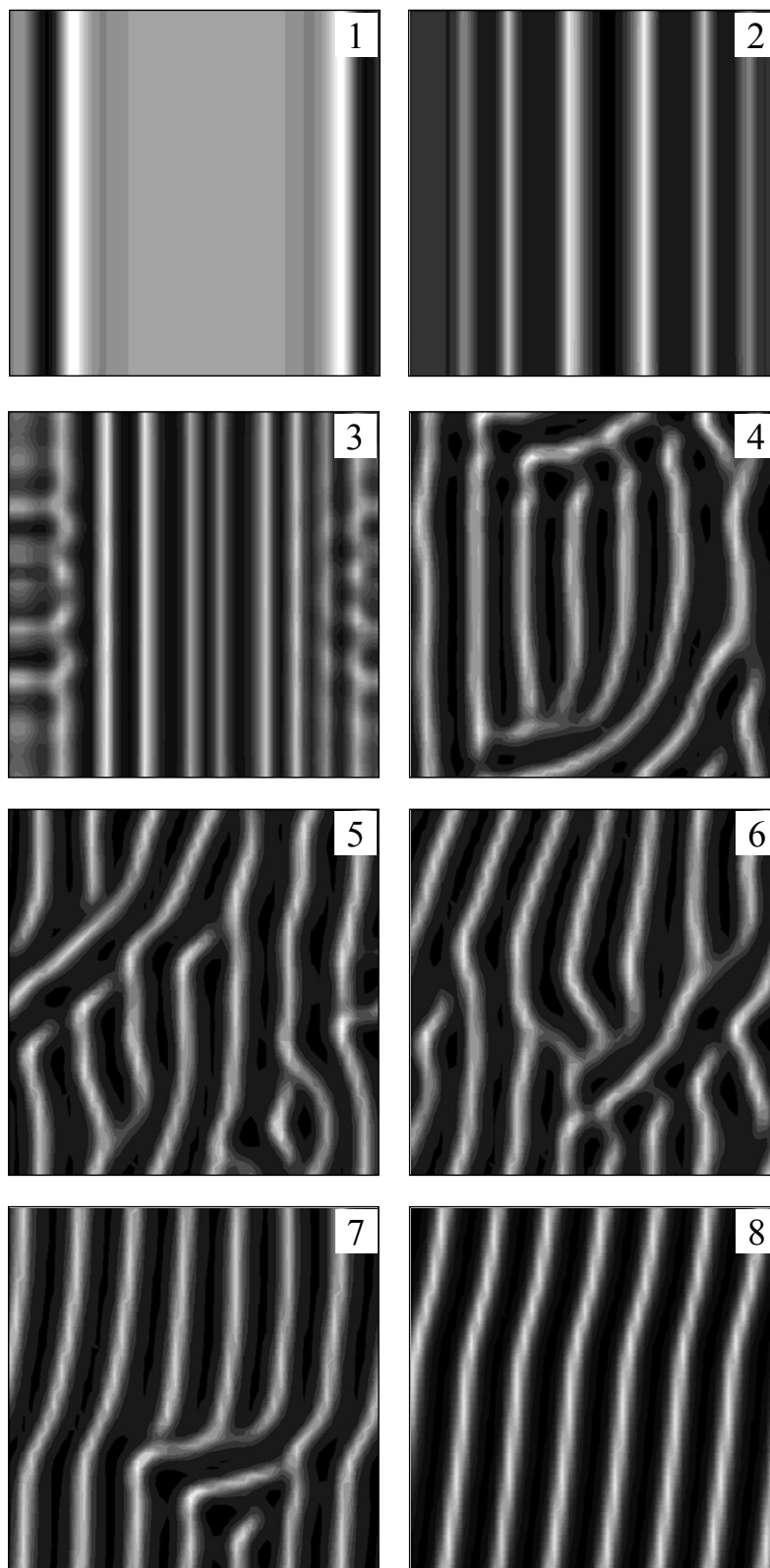


Рис. 2.5. Бегущие волны в модели (2.11) в моменты времени: (1) $t=2$, (2) $t=5$, (3) $t=10$, (4) $t=20$, (5) $t=25$, (6) $t=40$, (7) $t=100$, (8) $t=150$. Циклические граничные условия. Параметры модели: $\mu=10$, $a=3$, $b=4$, $c=2$, $d=7.5$, $D_1=1$, $D_2=9$, $D_3=50$. Размер области 300×300 .

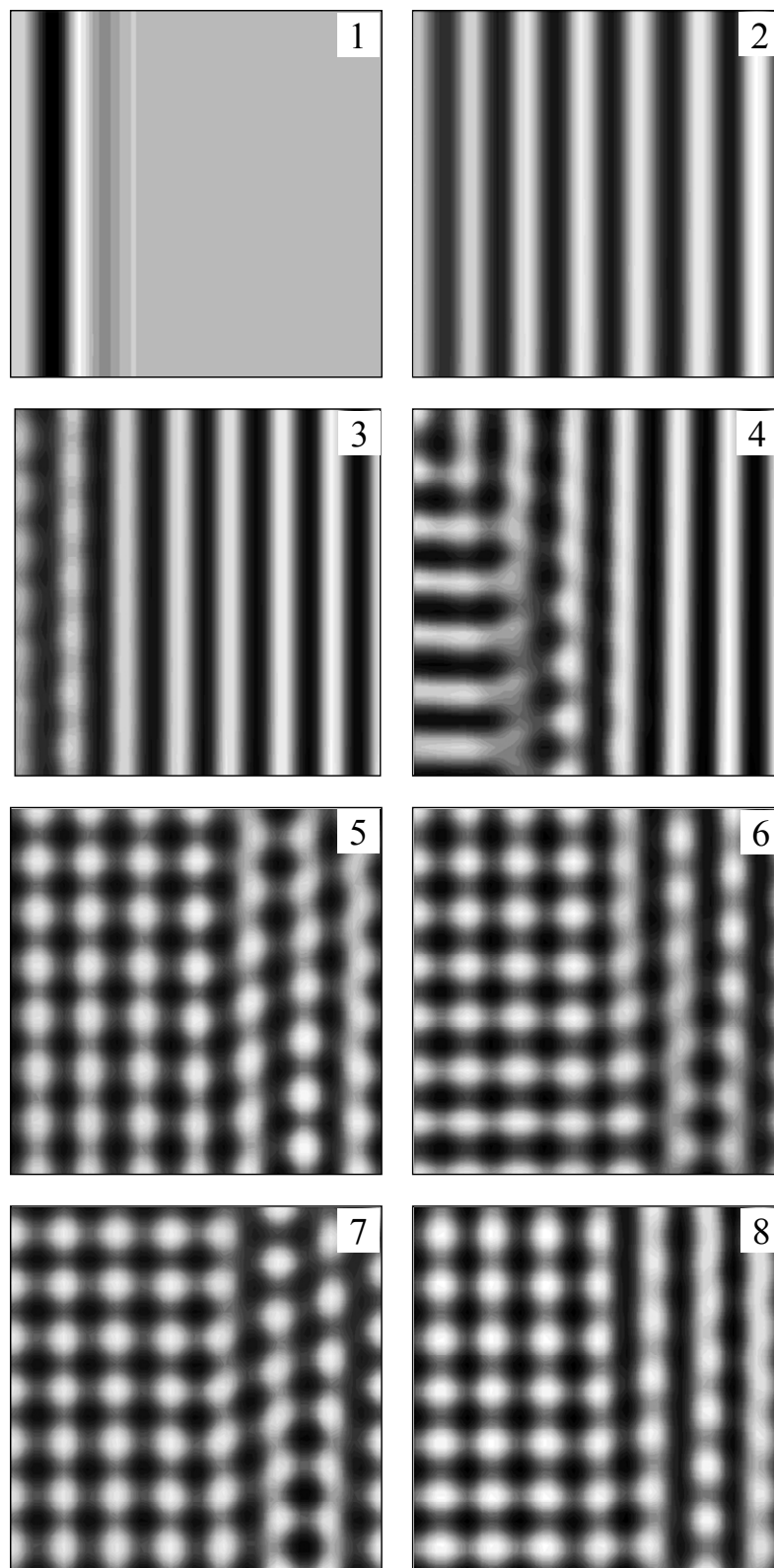


Рис. 2.6. Стоячие волны в модели (2.11) в моменты времени: (1) $t=2.5$, (2) $t=25$, (3) $t=50$, (4) $t=64$, (5) $t=116.5$, (6) $t=116.6$, (7) $t=116.65$, (8) $t=116.75$. В качестве граничных условий выбраны нулевые потоки. Параметры модели: $\mu=10$, $a=3$, $b=4$, $c=2$, $d=5.5$, $D_1=1$, $D_2=9$, $D_3=50$. Размер области 150×150 .

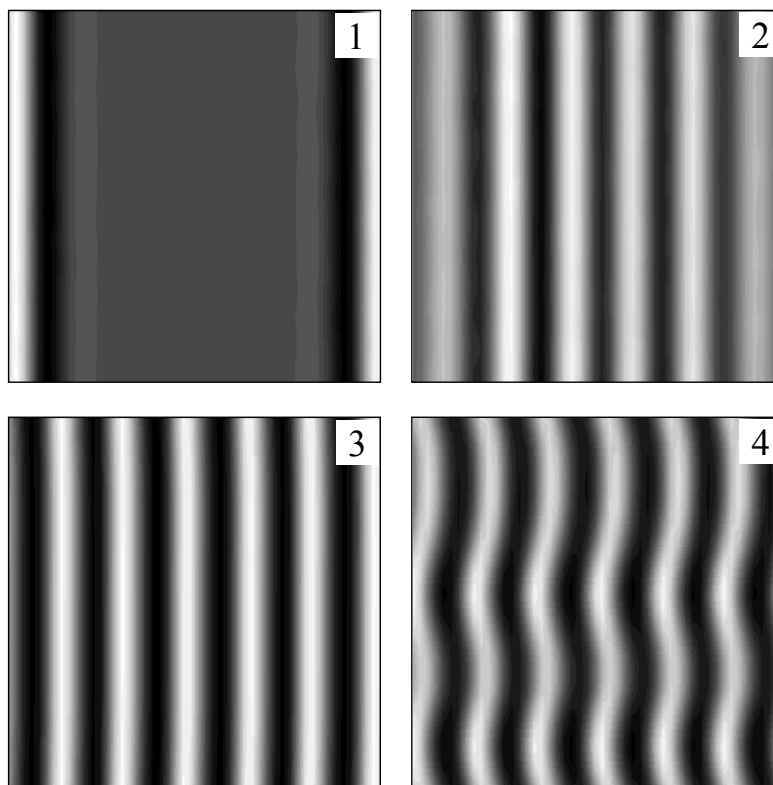


Рис. 2.7. Бегущие волны в модели (2.11) в моменты времени: (1) $t=2$, (2) $t=15$, (3) $t=100$, (4) $t=450$. Циклические граничные условия. Параметры модели: $\mu=10$, $a=3$, $b=4$, $c=2$, $d=5.5$, $D_1=1$, $D_2=11$, $D_3=50$. Размер области 150×150 .

2.6. Выводы по Главе 2

В данной главе проведено исследование возникновения диффузионной неустойчивости в системе из трех уравнений типа «реакция-диффузия». В общем виде получены условия как тьюринговской, так и волновой неустойчивостей. Выявлены качественные свойства, которыми должна обладать система для того, чтобы в ней могла произойти та или другая бифуркация. В случае тьюринговской бифуркации в системе необходимо наличие автокаталитической переменной (присутствие положительного члена на главной диагонали матрицы линеаризации), которая имеет достаточно малый коэффициент диффузии по сравнению с двумя другими. Эти условия совпадают с таковыми для двухкомпонентной реакционно-диффузионной модели.

Для развития волновой неустойчивости система должна удовлетворять несколько иным условиям, а именно: помимо того, что она должна содержать автокаталитическую переменную, необходимо, чтобы сумма двух членов на главной диагонали матрицы линеаризации была положительной, то есть 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.

Были выделены области в параметрическом пространстве, отвечающие существованию той или иной бифуркации. Показано, что условия тьюринговской и волновой неустойчивостей не противоречат друг другу и могут выполняться одновременно. При этом бифуркации будут происходить в различных непересекающихся диапазонах волновых чисел: характерный масштаб, соответствующий тьюринговской неустойчивости, всегда меньше масштаба волновой неустойчивости.

В численных экспериментах показано, что при выполнении соответствующих условий в нелинейной модели возникают пространственно-временные структуры, которые предсказываются линейным анализом: при выполнении условий тьюринговской бифуркации формируется стационарная диссипативная структура, а при выполнении условий волновой бифуркации наблюдаются бегущие или стоячие волны. Конкретный характер структур в последнем случае зависит от выбора параметров модели и граничных условий. Для того чтобы понять, какой именно тип структур возникает в результате волновой бифуркации, необходим нелинейный анализ, и это будет предметом наших дальнейших исследований.

ГЛАВА 3

ПРОСТРАНСТВЕННО-ВРЕМЕННЫЕ СТРУКТУРЫ В МНОГОМЕРНОЙ АКТИВНОЙ СРЕДЕ, ОБУСЛОВЛЕННЫЕ МНОГОМОДОВЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ ВБЛИЗИ ВОЛНОВОЙ БИФУРКАЦИИ

3.1. Введение

Линейный анализ не описывает эволюцию системы после того как произошла бифуркация. Возникает необходимость учета нелинейных взаимодействий.

Волновая неустойчивость является причиной возникновения разнообразных пространственно-временных структур в активных средах [Zhabotinsky et al., 1995; Berenstein, 2010]. Однако непосредственно вблизи бифуркации, как правило, наблюдается только два типа структур: бегущие и стоячие волны [Zhabotinsky et al., 2000]. Эффективным методом их изучения является построение и последующее исследование амплитудных уравнений. Подобная задача решалась в работе [Livshits, 1983] для одномерного случая. В многомерном пространстве возникает проблема, заключающаяся в вырождении по направлениям, вклад в формирование структуры может вносить много (в случае неограниченной области – бесконечно много) неустойчивых мод. Ситуацию можно упростить, рассмотрев дискретный набор мод, взаимодействующих между собой в ограниченной области и удовлетворяющих граничным условиям. Процедура построения амплитудных уравнений вблизи бифуркации на основе кинетических уравнений, например, системы уравнений типа «реакция-диффузия», хорошо известна (смотрите, например, [Kuramoto, 1984; Nicolis, 1995; Nicola,

2001]) и основана на разложении по малому параметру, являющемуся некоторой степенью бифуркационного параметра (в случае волновой бифуркации – это квадратный корень из бифуркационного параметра) и последующему применению условий разрешимости к уравнениям для старших порядков. В результате в уравнение для амплитуды A_k любой из мод войдут линейный и кубический члены по данной амплитуде, члены вида $A_k|A_j|^2$, описывающие взаимодействие данной моды с каждой из остальных, а также члены вида $A_{kl}^*A_jA_{jl}$, соответствующие так называемому четырехволновому взаимодействию. Здесь A_{kl} – амплитуда встречной волны, а A_j и A_{jl} – амплитуды любой другой пары волн, движущихся навстречу друг другу. Учет последних членов сильно усложняет ситуацию, делая практически невозможным аналитическое исследование. С другой стороны, при переходе к действительным уравнениям для модулей комплексных амплитуд у этих членов появляются зависящие от времени множители с нулевым средним и случайной фазой. Можно предполагать, что они частично компенсируют друг друга, а также обращаются в ноль в результате усреднения на промежуточных временах. Исходя из этого, мы в дальнейшем пренебрежем этими членами, и тогда амплитудные уравнения приобретают вид

$$\partial_t \tilde{A}_k = \tilde{A}_k - (1 - ic_1) \tilde{A}_k |\tilde{A}_k|^2 - h(1 - ic_2) \tilde{A}_k \cdot \sum_{j=1, j \neq k}^N |\tilde{A}_j|^2, \quad k \in \overline{1, N}. \quad (3.1)$$

Здесь \tilde{A}_k – комплексные амплитуды мод, соответствующих одинаковым по модулю, но разным по направлению волновым векторам, ставших неустойчивыми в результате волновой бифуркации. Параметр h характеризует силу конкуренции между модами; параметры c_1 и c_2 определяют отношение мнимых и действительных частей коэффициентов перед соответствующими кубическими членами.

Основной целью данной работы является анализ многомодового взаимодействия вблизи волновой бифуркации, описываемого уравнениями (3.1). Мы покажем, что в зависимости от параметра h в среде формируются либо стоячие, либо бегущие волны. В первом случае выживают все взаимодействующие моды, а во втором остается только какая-то одна, при этом остальные обращаются в ноль. Структуры иного рода возникнуть не могут. Этот аналитический результат проиллюстрирован на примере моде-

ли Гирера-Майнхарда, расширенной добавлением третьего уравнения, описывающего еще один быстро диффундирующий ингибитор. Мы проведем нелинейный анализ данной модели и выразим коэффициент h в уравнениях (3.1) через ее параметры. Тем самым мы обозначим в параметрическом пространстве области существования тех или иных структур. Будут представлены результаты систематического численного исследования модели для соответствующих наборов параметров, которые будут сопоставлены с теоретическими предсказаниями.

3.2. Анализ стационарных решений модели

Представим комплексные амплитуды \tilde{A}_k в виде $\tilde{A}_k = A_k \exp(i\varphi)$, где $A_k = |\tilde{A}_k|$. Подставив их в уравнения (3.1), получим для модулей амплитуд следующую систему уравнений:

$$\partial_t A_i = A_i - A_i^3 - A_i \cdot h \sum_{j=1, j \neq i}^N A_j^2, \quad i \in \overline{1, N}. \quad (3.2)$$

Эти уравнения включают единственный параметр h . Остальные параметры, присутствующие в уравнениях (3.1) входят в уравнения для фаз φ_k , которые мы здесь не приводим. Найдем стационарные точки уравнений (3.2), которые являются решениями системы уравнений

$$A_i^{st} \left(1 - (A_i^{st})^2 - h \sum_{j=1, j \neq i}^N (A_j^{st})^2 \right) = 0, \quad i \in \overline{1, N}.$$

Положим, что оно дается набором

$$\begin{cases} A_i^{st} \neq 0, & i \in \overline{1, p}, \\ A_i^{st} = 0, & i \in \overline{p+1, N}, \end{cases}$$

где p - некоторое целое число из интервала $\overline{1, N}$. Для двух последовательных отличных от нуля амплитуд A_{i-1}^{st} , A_i^{st} запишем:

$$1 - (A_{i-1}^{st})^2 - h \sum_{j=1, j \neq i-1}^p (A_j^{st})^2 = 0, \quad 1 - (A_i^{st})^2 - h \sum_{j=1, j \neq i}^p (A_j^{st})^2 = 0, \quad i \in \overline{2, p}.$$

Вычитая одно уравнение из другого, получим $A_{i-1}^{st} = A_i^{st}$. Таким образом, все амплитуды A_i^{st} , отличные от нуля для $i \in \overline{1, p}$, равны между собой.

Используя этот факт, мы сразу находим, что для всех $i \in \overline{1, p}$ справедливо

$$A_i^{st} = \frac{1}{\sqrt{1+(p-1)h}}.$$

Итак, показано, что помимо тривиального решения, которое, очевидно, неустойчиво, все стационарные точки системы (3.2) с точностью до перестановки индексов имеют вид

$$A_i^{st} = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{1+(p-1)h}}, & i \in \overline{1, p}, \\ 0, & i \in \overline{p+1, N}, \end{cases} \quad (3.3)$$

где p - некоторое целое число из интервала $\overline{1, N}$.

Исследуем теперь устойчивость стационарной точки (3.3). Линеаризуем уравнения (3.2) в её окрестности

$$\begin{cases} \delta \dot{A}_i = \frac{2}{1+(p-1)h} (-\delta A_i - h \sum_{\substack{j=1, \\ j \neq i}}^p \delta A_j), & i \in \overline{1, p}, \\ \delta \dot{A}_i = \frac{(1-h)}{1+(p-1)h} \delta A_i, & i \in \overline{p+1, N}. \end{cases} \quad (3.4)$$

Представив малые отклонения от стационарной точки δA_i и δA_j пропорциональными $\sim \exp(\frac{\lambda t}{1+(p-1)h})$, подставим их в систему (3.4) и получим характеристическое уравнение, которое после некоторых преобразований удастся свести к виду

$$[\lambda + 2(1+(p-1)h)][\lambda - 2(h-1)]^{p-1}[\lambda - (1-h)]^{N-p} = 0.$$

Таким образом, стационарная точка (3.3) имеет следующий набор собственных чисел:

$$\lambda_i = \begin{cases} -2(1+(p-1)h), & i = 1 \\ 2(h-1), & i \in \overline{2, p} \\ 1-h, & i \in \overline{p+1, N} \end{cases} \quad (3.5)$$

Анализ собственных чисел (3.5) в зависимости от значения h дает следующий результат:

- если $h \in (1, \infty)$, то с точностью до перестановки индексов устойчиво решение $A_1^{st} = 1$, $A_i^{st} = 0$, $i \in \overline{2, N}$, соответствующее $p = 1$;
- если $h \in (-\frac{1}{N-1}, 1)$, то устойчиво решение $A_i^{st} = \frac{1}{\sqrt{1 + (N-1)h}}$, $i \in \overline{1, N}$, соответствующее $p = N$;
- для $p \in \overline{2, N-1}$ устойчивых решений нет.

Таким образом, доказано следующее утверждение:

Из всего множества стационарных точек (3.3) системы (3.2), в зависимости от значения коэффициента h , устойчивыми могут быть только те точки, для которых либо, $p = 1$, либо $p = N$. А именно, при $h \in (1, \infty)$ имеется N устойчивых решений, таких, что одна из амплитуд равна единице, а остальные обращаются в ноль; а при $h \in (-\frac{1}{N-1}, 1)$ существует единственное решение $A_i^{st} = \frac{1}{\sqrt{1 + (N-1)h}}$, $i \in \overline{1, N}$.

Итак, в системе (3.1) 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 ($h \in (-\frac{1}{N-1}, 1)$), моды сосуществуют друг с другом, причем имеют одинаковые амплитуды, что соответствует стоячей волне. Промежуточные режимы в системе (3.1) вблизи волновой бифуркации невозможны.

3.3. Численные эксперименты

3.3.1. Математическая модель

Для проведения численных экспериментов мы выбрали модель Гирера-Майнхардта [Gierer, Meinhardt, 1972], в которую добавим третье уравнение, соответствующее второму быстро диффундирующему ингибитору,

$$\begin{cases} \partial_t u = (\rho + \frac{u^2}{v} - \mu u - cu + dw)\Omega + D_1 \nabla^2 u, \\ \partial_t v = u^2 - v + D_2 \nabla^2 v, \\ \partial_t w = cu - dw + D_3 \nabla^2 w. \end{cases} \quad (3.6)$$

Это сделано по той причине, что в двухкомпонентной реакционно-диффузионной модели волновая бифуркация невозможна, в отличие от бифуркации Тьюринга [Борина, Полежаев, 2011]. Сам же выбор конкретной модели достаточно произволен и определяется только тем, чтобы она допускала волновую неустойчивость. Параметры, влияющие на структурообразование, в уравнениях (3.6) это - кинетические константы ρ , Ω , μ , c , d и коэффициенты диффузии D_1 , D_2 , D_3 . Стационарная точка имеет координаты

$$\left(u_0 = \frac{\rho+1}{\mu}, \quad v_0 = \left(\frac{\rho+1}{\mu} \right)^2, \quad w_0 = \frac{c(\rho+1)}{d\mu} \right).$$

3.3.2. Параметрический анализ и вывод амплитудных уравнений

Проводим линейный анализ модели (3.6) и, пользуясь условиями для волновой бифуркации, сформулированными в Главе 2 [Борина, Полежаев, 2011], определяем границу волновой неустойчивости на плоскости параметров (μ, Ω) при фиксированных остальных параметрах (см. Рис. 3.1).

Вблизи этой границы построим амплитудные уравнения, при этом в явном виде найдем взаимосвязь коэффициента h в уравнениях (3.1) и параметров модели (3.6) и, таким образом, определим области существования бегущих или стоячих волн.

Введем новую переменную $\mathbf{u} = (\tilde{u}, \tilde{v}, \tilde{w})^T$, где $\tilde{u}(t) = u(t) - u_0$, $\tilde{v}(t) = v(t) - v_0$, $\tilde{w}(t) = w(t) - w_0$ - отклонение от положения равновесия. Перепишем систему (3.6) в виде

$$\partial_t \mathbf{u}(t) = L(\mu, \Omega) \mathbf{u}(t) + I(\mu, \Omega, \mathbf{u}(t)), \quad (3.7)$$

Здесь L - линейный оператор, включающий в себя диффузионные члены, I - нелинейная часть. Нетрудно проверить, что

$$L(\mu, \Omega) = \begin{pmatrix} (2s(\mu) - \mu - c) \cdot \Omega - D_1 \nabla^2 & -s^2(\mu) \cdot \Omega & d \cdot \Omega \\ \frac{2}{s(\mu)} & -1 - D_2 \nabla^2 & 0 \\ c & 0 & -d - D_3 \nabla^2 \end{pmatrix}, \quad s(\mu) = \frac{\mu}{\rho + 1}.$$

Применим метод многомасштабного разложения по малому параметру [Kuramoto, 1984; Nicolis, 1995], который заключается в том, что в окрестности точки бифуркации вектор $\mathbf{u}(t)$, управляющий параметр μ и временную производную ∂_t можно представить в виде степенного ряда по малому параметру ε

$$\begin{aligned} \mathbf{u} &= \varepsilon \mathbf{u}_1 + \varepsilon^2 \mathbf{u}_2 + o(\varepsilon^3), \\ \mu - \mu_c &= \varepsilon \mu_1 + \varepsilon^2 \mu_2 + o(\varepsilon^3), \quad \partial_t = \partial_{t_0} + \varepsilon \partial_{t_1} + \varepsilon^2 \partial_{t_2} + o(\varepsilon^3). \end{aligned} \quad (3.8)$$

Учитывая зависимость оператора L от параметра μ , а нелинейной функции I от μ и \mathbf{u} , используем разложение

$$\begin{aligned} L &= L_0 + \varepsilon L_1 + \varepsilon^2 L_2 + o(\varepsilon^3), \\ I &= \varepsilon^2 M \mathbf{u}_1 \mathbf{u}_1 + \varepsilon^3 2M \mathbf{u}_1 \mathbf{u}_2 + \varepsilon^3 N \mathbf{u}_1 \mathbf{u}_1 \mathbf{u}_1 + o(\varepsilon^4). \end{aligned} \quad (3.9)$$

Операторы L_0 , L_1 и L_2 нетрудно получить из исходного оператора L , подставив в него μ в виде ряда по ε и произведя разложение по малому параметру. Операторы M , N определяются следующим образом

$$\begin{aligned} M \mathbf{a} \mathbf{b} &= \left((s^4(\mu_c) a_2 b_2 + s^2(\mu_c) a_1 b_1 - s^3(\mu_c) (a_1 b_2 + a_2 b_1)) \cdot \Omega_c \quad a_1 b_1 \quad 0 \right)^T, \\ N \mathbf{a} \mathbf{a} \mathbf{a} &= \left((2s^5(\mu_c) (\bar{a}_1 a_2^2 + 2a_1 |a_2|^2) - s^4(\mu_c) (\bar{a}_2 a_1^2 + 2a_2 |a_1|^2)) \cdot \Omega_c \quad 0 \quad 0 \right)^T, \end{aligned}$$

где векторы $\mathbf{a} = (a_1 \quad a_2 \quad a_3)^T$, $\mathbf{b} = (b_1 \quad b_2 \quad b_3)^T$.

Подставим разложения (3.8) и (3.9) в уравнение (3.7). Очевидно, что мы получим уравнение, содержащее члены $o(\varepsilon)$, $o(\varepsilon^2)$, $o(\varepsilon^3)$, ..., которое будет эквивалентно (3.7) только в том случае, если:

$$\begin{aligned} o(\varepsilon): \quad & (\partial_{t_0} - L_0) \mathbf{u}_1 = 0, \\ o(\varepsilon^2): \quad & (\partial_{t_0} - L_0) \mathbf{u}_2 = -(\partial_{t_1} - L_1) \mathbf{u}_1 + M \mathbf{u}_1 \mathbf{u}_1, \\ o(\varepsilon^3): \quad & (\partial_{t_0} - L_0) \mathbf{u}_3 = -(\partial_{t_1} - L_1) \mathbf{u}_2 - (\partial_{t_2} - L_2) \mathbf{u}_1 + 2M \mathbf{u}_1 \mathbf{u}_2 + N \mathbf{u}_1 \mathbf{u}_1 \mathbf{u}_1. \end{aligned}$$

Уравнение $o(\varepsilon)$ – это задача линейного анализа в точке $\mu = \mu_c$. Его решение в пространственно одномерном случае

$$\mathbf{u}_1 = \mathbf{u}_c (A_L \exp(i(w_c t + k_c x)) + A_R \exp(i(w_c t - k_c x))) + c.c.,$$

где w_c, k_c - критические частота и волновое число; \mathbf{u}_c - критический собственный вектор оператора L_0 ; A_L, A_R - комплексные скалярные амплитуды направо и налево распространяющихся волн; *c.c.* обозначает комплексное сопряжение.

Применяя для уравнений $o(\varepsilon^2)$ и $o(\varepsilon^3)$ условие разрешимости [Kuramoto, 1984; Nicolis, 1995] и суммируя соответствующие результаты, мы получим систему следующих уравнений типа Гинзбурга-Ландау:

$$\begin{aligned} \partial_t A_L &= \eta A_L - g_1 A_L |A_L|^2 - g_2 A_L |A_R|^2, \\ \partial_t A_R &= \eta A_R - g_1 A_R |A_R|^2 - g_2 A_R |A_L|^2. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Здесь η, g_1, g_2 - комплексные коэффициенты, причем

$$\begin{aligned} \eta &= \frac{(\mathbf{v}_c, L_2 \mathbf{u}_c)}{(\mathbf{v}_c, \mathbf{u}_c)}, \\ g_1 &= \frac{\mathbf{v}_c}{(\mathbf{v}_c, \mathbf{u}_c)} \cdot (2M\mathbf{u}_c V_{00} + 2M\mathbf{u}_c V_{20} + 2M\bar{\mathbf{u}}_c W_{02} + 2N\mathbf{u}_c \mathbf{u}_c \bar{\mathbf{u}}_c), \\ g_2 &= \frac{\mathbf{v}_c}{(\mathbf{v}_c, \mathbf{u}_c)} \cdot (2M\mathbf{u}_c V_{00} + M\bar{\mathbf{u}}_c W_{22} + N\mathbf{u}_c \mathbf{u}_c \bar{\mathbf{u}}_c), \end{aligned}$$

где \mathbf{v}_c - решение сопряженной линейной задачи $(\partial_{t_0} - L_0^*)\mathbf{v}_c = 0$,

$$W_{nm} = \frac{M\mathbf{u}_c \mathbf{u}_c}{niw_c - L_0(mk_c)}, \quad V_{nm} = \frac{M\mathbf{u}_c \bar{\mathbf{u}}_c}{niw_c - L_0(mk_c)}, \quad n, m = 0, 2.$$

Подходящим выбором масштаба систему (3.10) можно преобразовать к виду:

$$\begin{aligned} \partial_t A_L &= A_L - (1 - ic_1)A_L |A_L|^2 - h(1 - ic_2)A_L |A_R|^2, \\ \partial_t A_R &= A_R - (1 - ic_1)A_R |A_R|^2 - h(1 - ic_2)A_R |A_L|^2, \end{aligned} \quad (3.11)$$

где c_1, c_2, h - действительные коэффициенты. Последний из них, коэффициент $h = g_2'/g_1'$, означает силу, с которой конкурируют волны, распространяющиеся навстречу друг другу.

Очевидно, что обобщая полученный результат (3.11) для случая многодогового взаимодействия в многомерной среде, мы получим уравнения (3.1).

3.3.3. Результаты численных экспериментов

Было проведено систематическое численное исследование модели (3.6) для параметров, лежащих вблизи границы волновой неустойчивости. На Рис. 3.1 приведена параметрическая плоскость (μ, Ω) модели (3.6), где показаны области бегущих и стоячих волн. Отметим, что мы не можем указать их правые границы, поскольку проведенный анализ справедлив только вблизи бифуркационной кривой. В полном соответствии с тем, что было показано выше, оказалось, что в системе (3.6) вблизи волновой бифуркации возможны лишь два режима. Если параметры подобраны так, что $h \in (1, \infty)$, в системе формируются бегущие волны, а если $h \in (-\frac{1}{4}, 1)$, то в системе возникают стоячие волны.

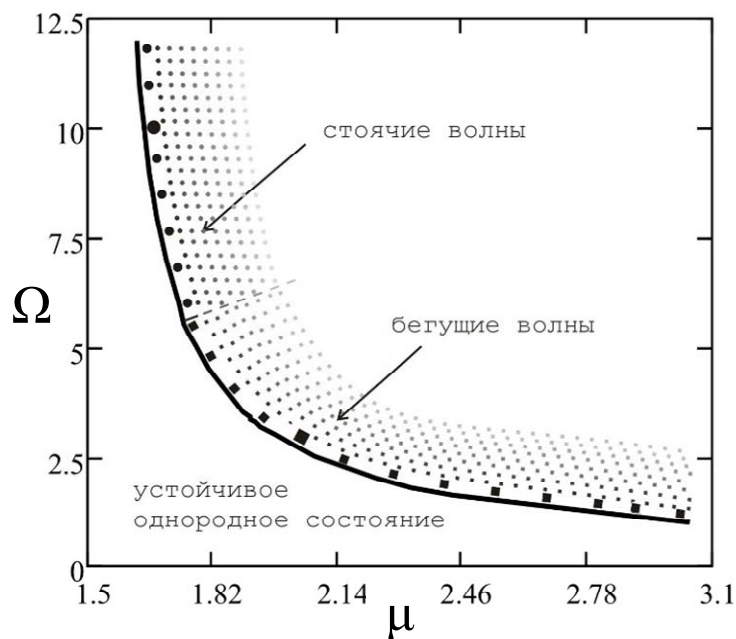


Рис. 3.1. Плоскость параметров μ, Ω модели (3.6). Сплошной линией обозначен порог волновой бифуркации. Указаны области, соответствующие стоячим и бегущим волнам, определенные из параметрического анализа. Здесь же приведены результаты численных экспериментов; кружками и квадратами обозначены реализации, 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 3.2 и 3.3 приведено два примера структур полученных в численных экспериментах (подробная схема изложена в Приложении). Соответствующие параметры обозначены на Рис. 3.1 более крупными значками.

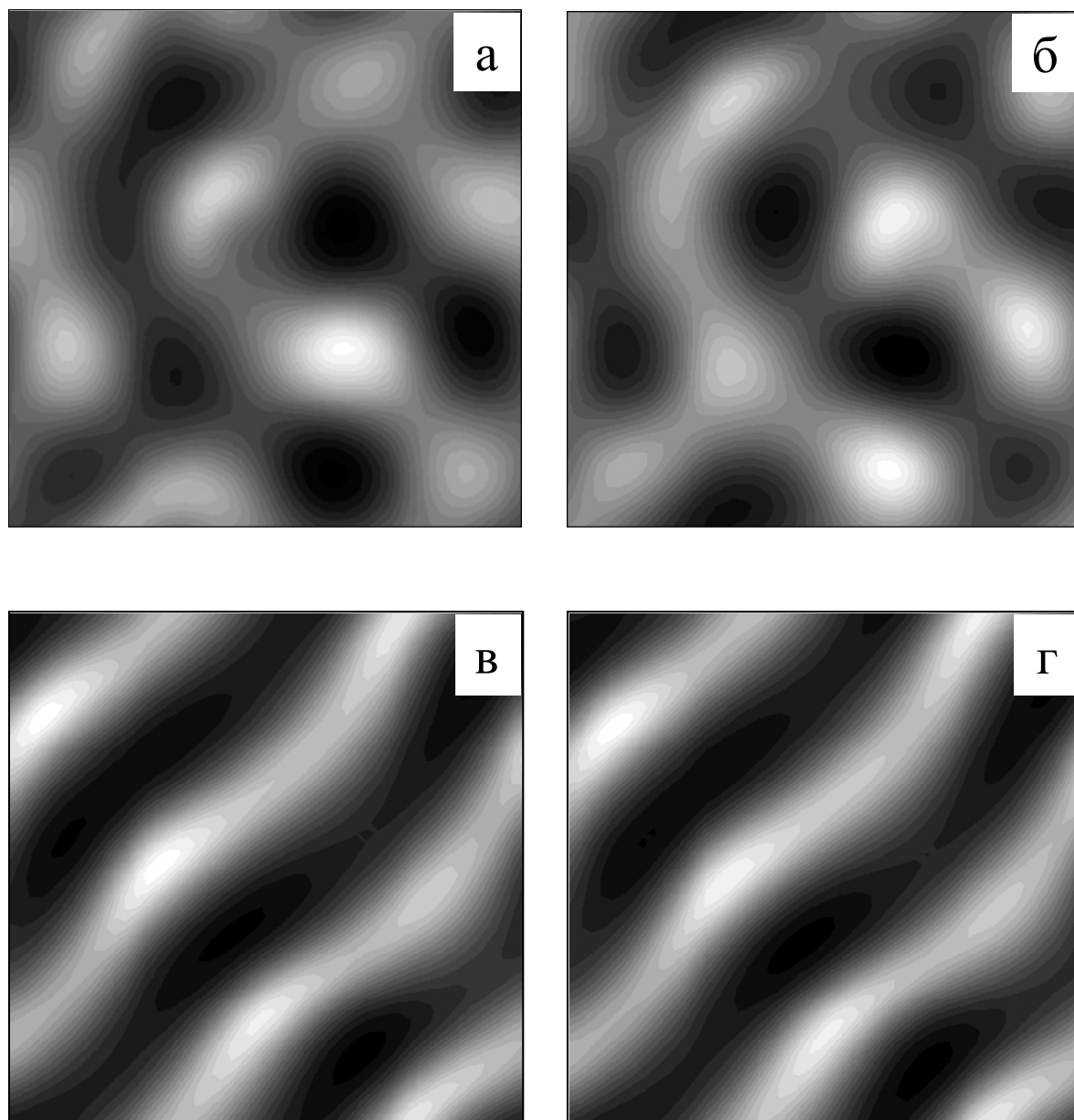


Рис.3.2. Бегущие волны в модели (3.6) в моменты времени t : (а) t_0 , (б) $t_0+2\Delta$, (в) $t_0+900\Delta$, (г) $t_0+936\Delta$, где $t_0=386$, $\Delta=0.16$ - шаг интегрирования. Параметры модели: $\rho=0.23$, $\mu=2$, $\Omega=3$, $c=1$, $d=1$, $D_1=1$, $D_2=1$, $D_3=50$. Размер области 150×150 .

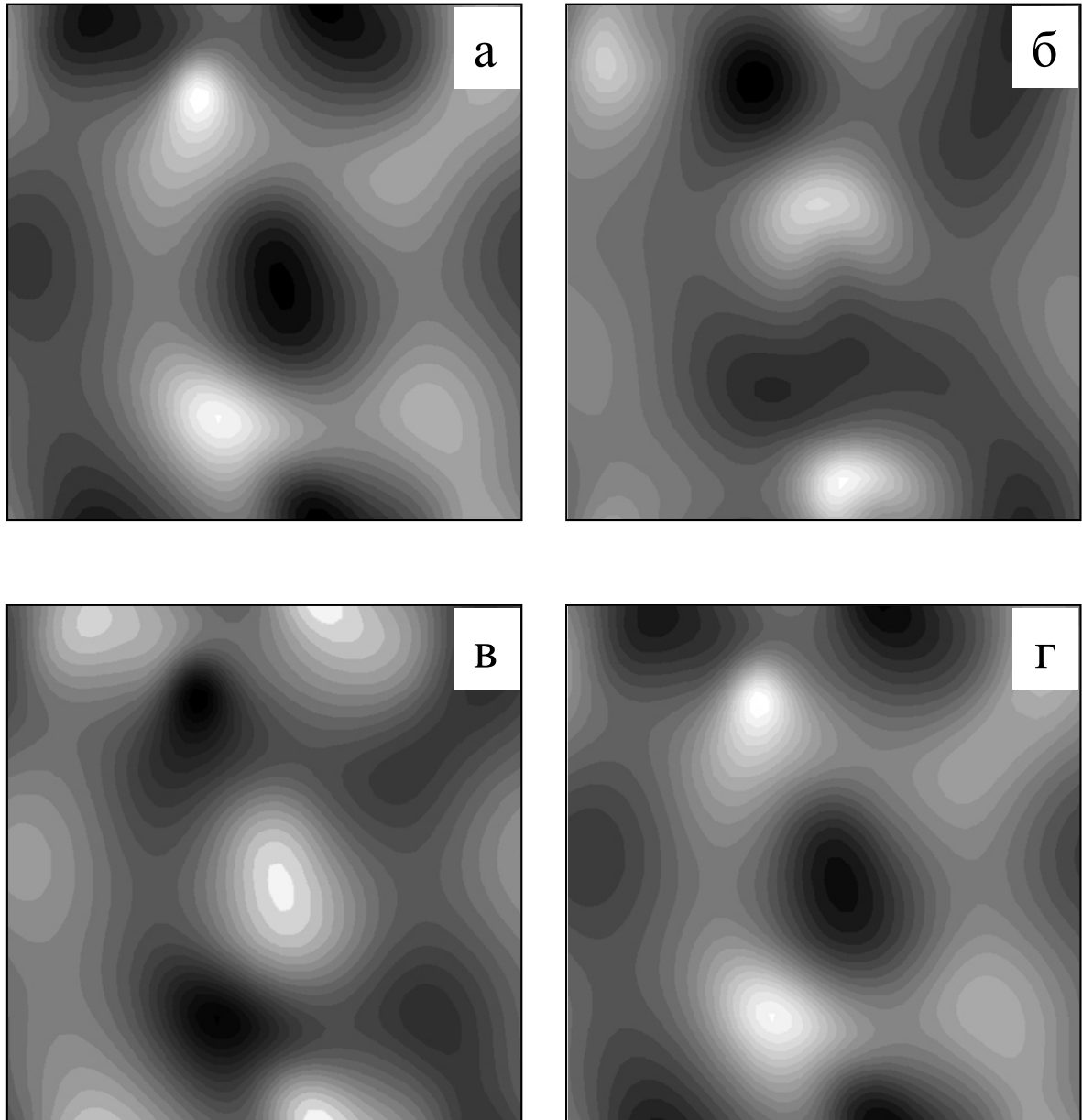


Рис. 3.3. Стоячие волны в модели (3.6) в моменты времени t : (а) t_0 , (б) $t_0+12\Delta$, (в) $t_0+23\Delta$, (г) $t_0+46\Delta$, где $t_0=1755$, $\Delta=0.032$ - шаг интегрирования. Параметры модели: $\rho=0.23$, $\mu=1.65$, $\Omega=10$, $c=1$, $d=1$, $D_1=1$, $D_2=1$, $D_3=50$. Размер области 100×100 .

3.4. Выводы по Главе 3

В данной главе проведено исследование системы амплитудных уравнений (3.1) вблизи волновой бифуркации для N мод, удовлетворяющих граничным условиям и взаимодействующих между собой в ограниченной области.

Показано, что результатом такого взаимодействия в зависимости от величины параметра h возможны лишь два режима: или квазиодномерные бегущие волны (существует только одна ненулевая мода), или стоячие волны (все N мод отличны от нуля). Решение с p ($p \in \overline{2, N-1}$) отличных от нуля мод является неустойчивым и не может быть реализовано.

Для проведения численных экспериментов была выбрана модель Гирера-Майнхардта, расширенная добавлением третьего уравнения для еще одного быстро диффундирующего ингибитора. Выполнен параметрический анализ данной модели и построены амплитудные уравнения вблизи волновой бифуркации. В результате, получена связь между коэффициентом h в соответствующих уравнениях (3.1) и параметрами модели. Выделены области в параметрическом пространстве, отвечающие существованию бегущих или стоячих волн. Результаты численных экспериментов вполне соответствуют теоретическим предсказаниям.

ГЛАВА 4

О МЕХАНИЗМЕ ПРЕКЛЮЧЕНИЯ СТОЯЧЕЙ ВОЛНЫ В БЕГУЩУЮ, СОПРОВОЖДАЮЩЕГОСЯ ДЕЛЕНИЕМ ДЛИНЫ ВОЛНЫ ПОПОЛАМ

4.1. Введение

Волновая бифуркация является причиной возникновения разнообразных пространственно-временных структур в активных средах различной природы [Jakubith et al., 1990; Bertram et al., 2003; Epstein et al., 2008; Zhabotinsky et al., 2000]. Чаще всего возникают либо стоячие, либо бегущие волны. Иногда наблюдается переключение между этими двумя режимами, что было предметом изучения ряда экспериментальных и теоретических работ. Так переход между стоячими и бегущими волнами наблюдали в терморастворимой конвекции [Deane et al., 1987] и в цилиндрической конвекции Рэлея–Бенара [Bogonska, Tuckerman, 2006]. Также переключение наблюдалось в периодически возбуждаемых колебательных системах, например, в конвекции бинарной смеси или в нематических жидких кристаллах [Rehberg, 1988]. Недавно такой переход был индуцирован в реакции Белоусова–Жаботинского внешним периодическим возмущением [Marts, 2008]. Важно, однако, что во всех приведенных случаях длина волны оставалась неизменной.

В работе [Kaminaga et al., 2005] приведено первое экспериментальное наблюдение перехода от стоячей к бегущей волне, в котором волновое число удваивается. Это явление наблюдали в реакции Белоусова–Жаботинского, диспергированной в обращенной микроэмульсии аэрозоля OT/Span [Hou, Shah, 1987]. На Рис. 4.1 приведены экспериментальные результаты, полученные этими авторами.

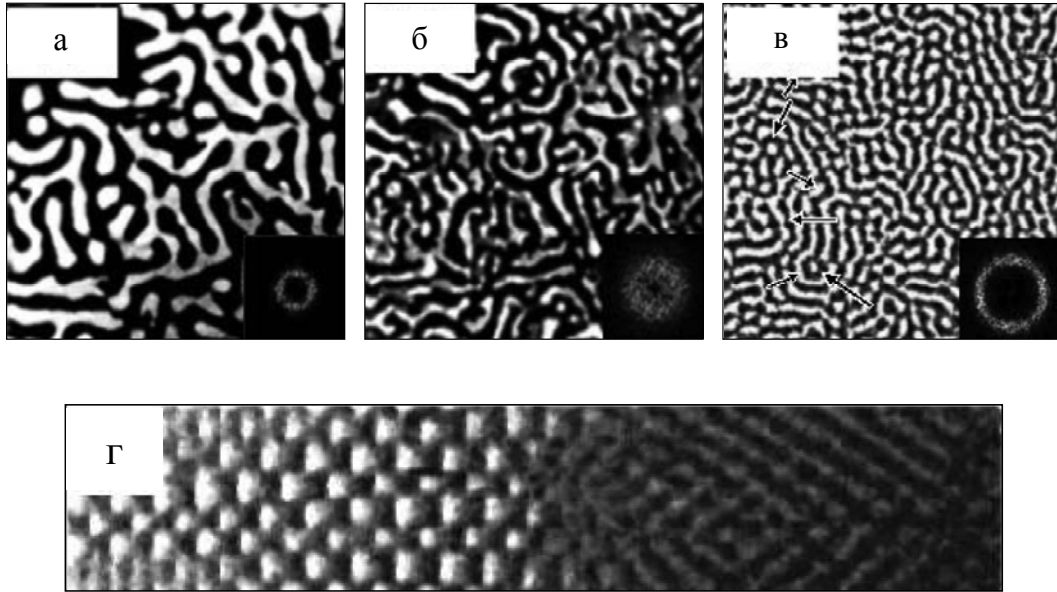


Рис. 4.1. Снимки стоячих волн (а), переходных структур (б) и бегущих волн (в), обнаруженных в BZ-AOT/Span системе. (г) Пространственно-временной график перехода из режима стоячих волн в режим бегущих, сопровождающийся делением длины волны пополам (рисунок взят из работ [Kaminaga et al., 2005]).

В настоящей главе мы предлагаем возможный механизм экспериментально наблюдаемого переключения стоячей волны в бегущую, сопровождающегося делением длины волны пополам. Задача решается в пространственно одномерном случае с помощью построения и последующего исследования амплитудных уравнений [Kuramoto, 1984; Nicolis, 1995]. Полученный результат позволяет провести численный эксперимент, в котором реализуется сценарий соответствующего переключения волн.

4.2. Математическая модель

Математическая модель, объясняющая вышеописанный феномен, основана на нескольких предположениях относительно процессов, происходящих в одномерной активной среде, которые перечислены ниже.

1. Стоячая волна есть результат волновой бифуркации. Волна описывается некоторой переменной u_1 , которую можно представить в виде

$$u_1(r,t) = \tilde{A}_1 e^{i(\omega t + kr)} + \tilde{A}_2 e^{i(\omega t - kr)}.$$

Здесь \tilde{A}_1, \tilde{A}_2 – комплексные амплитуды мод, ставших неустойчивыми в результате бифуркации и соответствующих одинаковым по модулю, но разным по направлению волновым векторам $\pm \vec{k}$ и частоте w .

Если предположить, что бифуркация является суперкритической, то вблизи неё динамика системы взаимодействующих мод может быть описана при помощи амплитудных уравнений типа Гинзбурга-Ландау следующего вида

$$\begin{cases} \dot{\tilde{A}}_1 = \tilde{A}_1 - (1 - ic_1)\tilde{A}_1|\tilde{A}_1|^2 - h_1(1 - ic_2)\tilde{A}_1|\tilde{A}_2|^2, \\ \dot{\tilde{A}}_2 = \tilde{A}_2 - (1 - ic_1)\tilde{A}_2|\tilde{A}_2|^2 - h_1(1 - ic_2)\tilde{A}_2|\tilde{A}_1|^2. \end{cases} \quad (4.1)$$

В этих уравнениях не учитывается пространственная дисперсия мод и поэтому в них отсутствуют производные амплитуд по координате. Это оправдано, если рассматривается ограниченная область [Nicolis, 1995].

В системе (4.1) вблизи волновой бифуркации в зависимости от величины параметра h_1 , соответствующего силе связи между конкурирующими модами, возможны лишь два режима – стоячая или квазиодномерная бегущая волна.

Для того чтобы в системе (4.1) 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. Допустим, что 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:

$$\begin{cases} \dot{\tilde{B}}_1 = -\alpha\tilde{B}_1 + (1 - id_1)\tilde{B}_1|\tilde{B}_1|^2 - (1 - id_3)\beta \cdot \tilde{B}_1|\tilde{B}_1|^4 - h_2(1 - id_2)\tilde{B}_1|\tilde{B}_2|^2, \\ \dot{\tilde{B}}_2 = -\alpha\tilde{B}_2 + (1 - id_1)\tilde{B}_2|\tilde{B}_2|^2 - (1 - id_3)\beta \cdot \tilde{B}_2|\tilde{B}_2|^4 - h_2(1 - id_2)\tilde{B}_2|\tilde{B}_1|^2, \end{cases} \quad (4.2)$$

где α, β - некоторые положительные константы. Коэффициент h_2 - сила связи взаимодействующих мод. Нетрудно показать, что если h_2 достаточно велико: $h_2 > \gamma$, 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. Предположим, что 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: $\omega_2 = 2\omega$. Дисперсионные кривые системы, в которой выполнено условие резонанса, проиллюстрированы на Рис. 4.2.

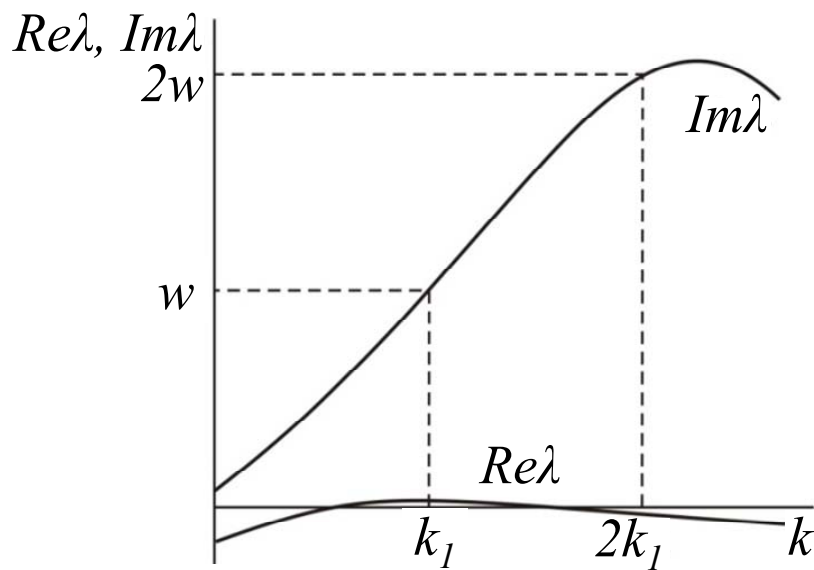


Рис. 4.2. Дисперсионные кривые системы, для которой выполняется условие резонанса: у волны с удвоенным волновым числом частота также в два раза больше.

Если построить амплитудные уравнения, описывающие все четыре взаимодействующие моды, то для модулей амплитуд A_i и B_i , где $A_i = |\tilde{A}_i|$, $B_i = |\tilde{B}_i|$, $i = 1, 2$, мы получим следующую систему уравнений:

$$\begin{cases} \frac{dA_1}{dt} = A_1 - A_1^3 - h_1 A_2^2 A_1 - \delta_1 (B_1^2 + B_2^2) A_1, \\ \frac{dA_2}{dt} = A_2 - A_2^3 - h_1 A_1^2 A_2 - \delta_1 (B_1^2 + B_2^2) A_2, \\ \frac{dB_1}{dt} = -\alpha B_1 + B_1^3 - \beta B_1^5 - h_2 B_2^2 B_1 - \delta_2 (A_1^2 + A_2^2) B_1 + \sigma \cos \psi_1(t) A_1^2, \\ \frac{dB_2}{dt} = -\alpha B_2 + B_2^3 - \beta B_2^5 - h_2 B_1^2 B_2 - \delta_2 (A_1^2 + A_2^2) B_2 + \sigma \cos \psi_2(t) A_2^2, \end{cases} \quad (4.3)$$

Во второй паре уравнений системы (4.3) последние слагаемые в правой части обусловлены резонансом. ψ_i - разность фаз комплексных амплитуд \tilde{A}_i и \tilde{B}_i , медленно меняющаяся со временем, δ_i - силы связи соответствующих взаимодействующих мод, $i = 1, 2$.

4.3. Численные эксперименты

Покажем теперь, основываясь на уравнениях (4.3), каким образом осуществляется переход от стоячей волны к бегущей волне с половинной длиной. В результате случайного начального возмущения амплитуды A_i начнут расти, амплитуды же B_i останутся нулевыми, так как для них исходное состояние является устойчивым. В результате сформируется стоячая волна, при этом амплитуды A_1 и A_2 станут равными $1/\sqrt{1+h_1}$. В свою очередь это приведет к тому, что кривая, определяющая состояния равновесия во второй паре уравнений будет сдвигаться вверх. После этого в некоторый момент времени, когда $\cos \psi_i(t)$ ($i=1$ или 2) станет равным единице, при условии, что $\sigma > \frac{1+h_1}{25\beta} (20\beta\alpha' - 3 + \sqrt{9-20\beta\alpha'}) \sqrt{\frac{3-\sqrt{9-20\beta\alpha'}}{10\beta}}$, где

$\alpha' = \alpha + 2\delta_2/(1+h_1)$, у соответствующей амплитуды B_i исчезнет нулевое устойчивое состояние (см. Рис. 4.2), что приведет к переключению в ненулевое устойчивое состояние. В силу достаточно сильной конкуренции эта мода подавит остальные три, что будет означать переход системы в состояние бегущей волны с половинной длиной.

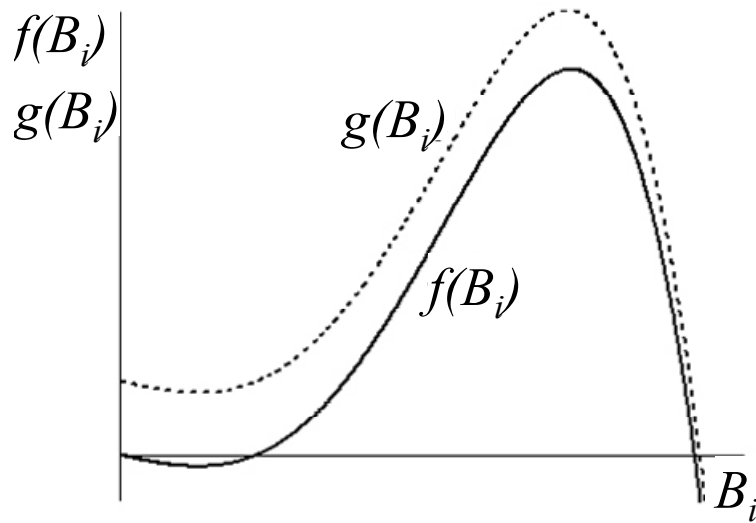


Рис. 4.3. Корни функции $f(B_i) = -\alpha B_i + B_i^3 - \beta B_i^5$ соответствуют стационарным состояниям моды B_i при условии, что остальные амплитуды равны нулю, при этом имеется два устойчивых состояния - нулевое и возбужденное. Когда амплитуды A_1 и A_2 станут равными $1/\sqrt{1+h_1}$, а $\cos\psi_i(t) = 1$, стационарные состояния моды B_i будут определяться корнями функции $g(B_i) = -\left(\alpha + 2\frac{\delta_2}{1+h_1}\right)B_i + B_i^3 - \beta B_i^5 + \frac{\sigma}{1+h_1}$. При достаточно большом значении σ остается только один корень, соответствующий возбужденному состоянию данной моды.

С учетом полученных оценок было найдено численное решение системы (4.2). В начальный момент времени амплитуды имели нулевые значения и возмущались случайным шумом. На Рис. 4.4 приведено изменение во времени амплитуд A_1 , B_1 и B_2 для случая $h_2 > 1 - 4\alpha\beta$ (амплитуда A_2 ведет себя аналогично A_1).

Поведение системы описывается переменной u , являющейся суммой всех четырех мод: $u(r, t) = A_1 e^{i(\omega t + kr)} + A_2 e^{i(\omega t - kr)} + B_1 e^{i(2\omega t + 2kr)} + B_2 e^{i(2\omega t - 2kr)}$. На Рис. 4.5 (а) представлен пространственно-временной график поля результирующей волны u с учетом полученных выше зависимости амплитуд от времени.

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. 4.5 (б). Однако такого явления пока в реальном эксперименте не наблюдалось.

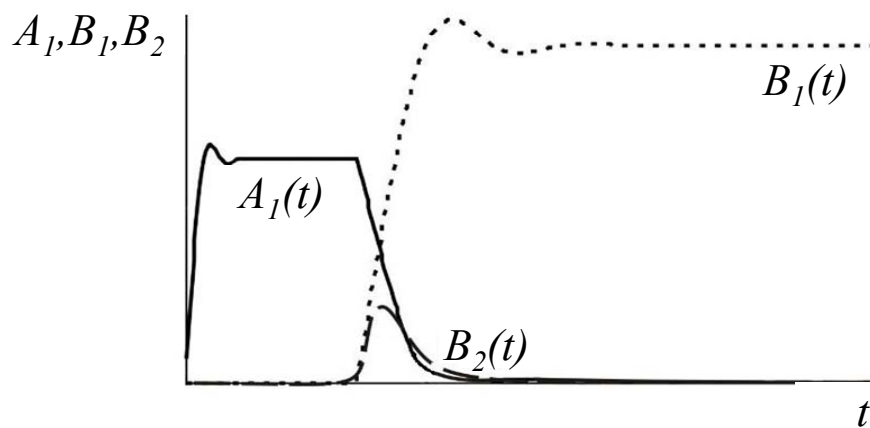


Рис. 4.4. Временная эволюция амплитуд A_1 , B_1 и B_2 для случая перехода «стоячая волна (λ_{sw}) – бегущая волна ($\lambda_{tw} \cong \lambda_{sw}/2$)».

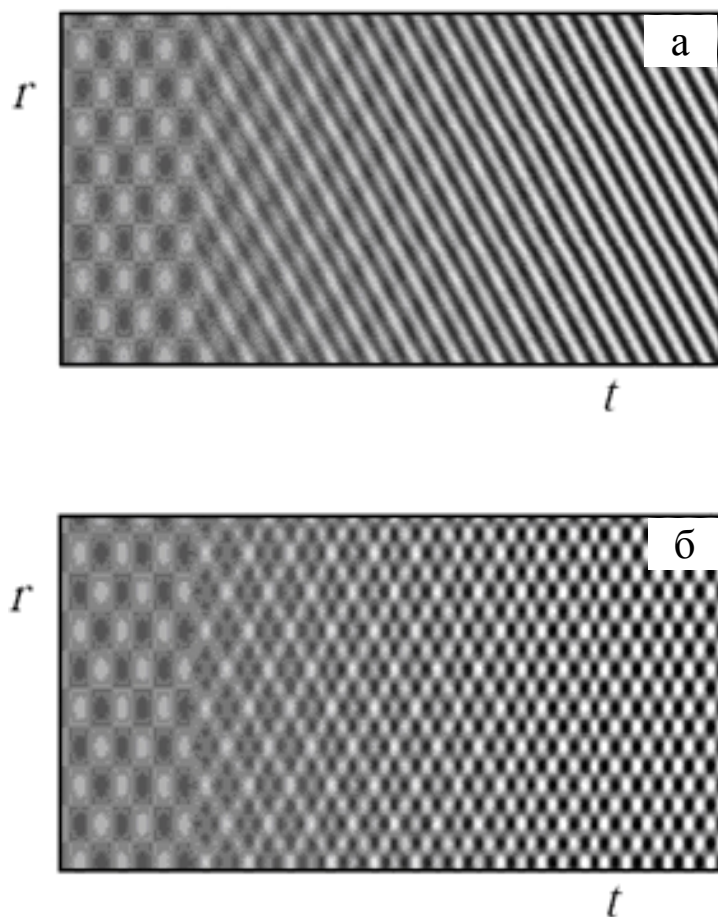


Рис. 4.5. Пространственно-временной график $u(r,t)$ перехода (а) «стоячая волна (λ_{sw}) – бегущая волна ($\lambda_{tw} \cong \lambda_{sw}/2$)», (б) «стоячая волна (λ_{sw}) – стоячая волна ($\lambda_{tw} \cong \lambda_{sw}/2$)» в случае $h_2 < 1 - 4\alpha\beta$.

4.4. Выводы по Главе 4

В данной главе предложен возможный механизм перехода из режима стоячих волн с длиной волны λ_{sw} в режим бегущих волн с половинной длиной волны: $\lambda_{tw} \cong \lambda_{sw}/2$.

Задача решалась в пространственно одномерном случае с использованием аппарата амплитудных уравнений типа Гинзбурга-Ландау. Показано, что переход возможен 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.

Выведены условия на силы связи между взаимодействующими модами, при выполнении которых в модели реализуется сценарий перехода от стоячей к бегущей волне половинного периода, наблюдаемый в эксперименте.

Результат теоретического анализа подтверждается численным моделированием.

Следует сделать два замечания. К сожалению, нам не удалось найти примера реакционно-диффузионной модели, которая обладает требуемыми свойствами. По сути дела требуется решить обратную задачу – по амплитудным уравнениям построить порождающую их кинетическую модель. Эта задача весьма сложна и нами пока не решена.

Условие резонанса с позиции теории динамических систем делает ситуацию негрубой. Однако на наш взгляд это не страшно: в реальной химической системе происходит непрерывный дрейф параметров, и тогда резонанс может в какой-то момент возникнуть, что и приведет к наблюдаемому переключению между режимами.

ГЛАВА 5

О МЕХАНИЗМАХ ФОРМИРОВАНИЯ СЕГМЕНТИРОВАННЫХ ВОЛН В АКТИВНЫХ СРЕДАХ

5.1. Введение

БЖ-АОТ система демонстрирует многообразие неравновесных пространственно-временных структур [Ванаг, 2004]. В частности в этой системе впервые были получены волны, которые по мере распространения разбиваются на сегменты, перемещающиеся без когерентного скручивания в небольшие спирали, как это наблюдали ранее [Agladze et al., 1984; Ouyang, Flesselles, 1996; Mare, Panfilov, 1997]. Эти структуры, так называемые сегментированные или штриховые волны, были обнаружены в виде спиральных и плоских волн (см. Рис. 5.1) в свежеприготовленной микроэмульсии и исчезали спустя 2 - 3 часа [Vanag, Epstein, 2003a; Vanag, Epstein, 2003b]. Впоследствии подборов параметров БЖ-АОТ системы удалось получить долгоживущий режим [Carballido-Landeira et al., 2008].

Сегментированные волны были также найдены в CDMIA реакции [Yang et al., 2005] и в БЖ-СДС системе, являющейся реакционно-конвективно-диффузионной системой [Rossi, Liveri, 2009; Rossi, 2012].

В настоящей главе исследованы возможные механизмы формирования сегментированных волн. Мы предлагаем три варианта:

- взаимодействие двух подсистем, одна из которых возбудима, а другая неустойчива по Тьюрингу;
- «дробление» бегущей волны в окрестности бифуркационной точки ко-размерности два, в которой пересекаются границы тьюринговской и волновой неустойчивостей;

– реализуемое в простых двухкомпонентных моделях типа «реакция-диффузия» взаимодействие двух стационарных состояний: возбудимого и обладающего псевдотьюринговской (согласно [Vanag, Epstein, 2003a]) неустойчивостью.

Теоретические выкладки мы подтвердим численными экспериментами с использованием амплитудных уравнений [Kuramoto, 1984], моделей ФитцХью-Нагумо [FitzHugh, 1962] и Брюсселятор [Glandsdorff, Prigogine, 1971].

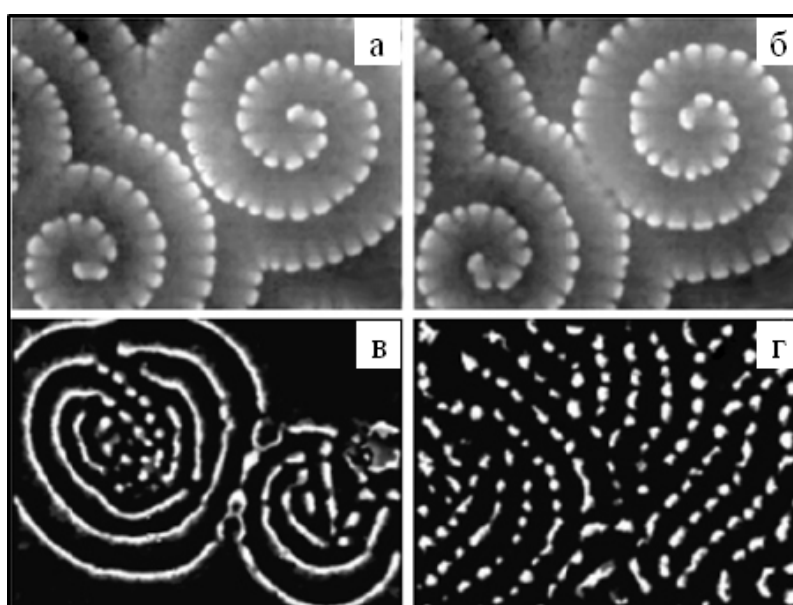


Рис.5.1. (а, б) Сегментированные спирали, (в, г) сегментированные волны (штрих-волны) в БЖ-АОТ-системе. Время между снимками (а) и (б) 66 секунд; между (в) и (г) 1800 секунд. Размер снимков (а, б) 3.72×4.82 мм; (в, г) 2.54×1.88 мм (рисунок взят из работ [Vanag, Epstein, 2003a; Vanag, Epstein, 2003b]).

5.2. Взаимодействие двух подсистем, одна из которых возбудима, а другая обладает тьюринговской неустойчивостью

Рассмотрим случай, когда некоторая распределённая система представляет собой объединение двух подсистем, одна из которых соответствует возбудимой активной среде, а другая потенциально (при соответствующих параметрах) обладает тьюринговской неустойчивостью. Первая под-

система параметрически влияет на вторую подсистему, переводя её в неустойчивое состояние.

В качестве первой подсистемы мы будем использовать модель ФитцХью-Нагумо вида

$$\begin{cases} \frac{du}{dt} = u - u^3/3 - v + D_F \nabla^2 u, \\ \frac{dv}{dt} = (u - \gamma + \delta)\varepsilon, \end{cases} \quad (5.1)$$

где ε - мало. Нас интересует случай, когда нуль-изоклины пересекаются в одной единственной точке (например, как показано на Рис. 5.2 (а)), отвечающей однородному состоянию покоя, устойчивому относительно подпороговых возмущений, но генерирующему одиночный импульс при надпороговом возмущении. Как хорошо известно, в такой системе при соответствующих начальных условиях может сформироваться гладкая спиральная волна, как показано на Рис. 5.2 (б, в).

Для численных экспериментов здесь и далее использовалась собственная программа. Расчёты проводились в ограниченной области методом переменных направлений [Борина, Полежаев, 2011] (подробная схема изложена в Приложении). В качестве граничных использовались условия Неймана.

На Рис. 5.2 (б, в) представлены результаты численного счёта для модели (5.1), демонстрирующие формирование спиральной волны в квадратной области с нулевыми потоками на границах (условия Неймана). В качестве начальных условий использовался отрезок плоской волны со свободным концом.

В качестве второй подсистем мы будем использовать как модель ФитцХью-Нагумо, в которой параметр ε уже не является малым, а коэффициент диффузии ингибиторной переменной отличен от нуля, так и модель «Брюсселятор», имеющую вид:

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = a - (b+1)x + x^2 y + \nabla^2 x, \\ \frac{dy}{dt} = bx - x^2 y + D_B \nabla^2 y. \end{cases} \quad (5.2)$$

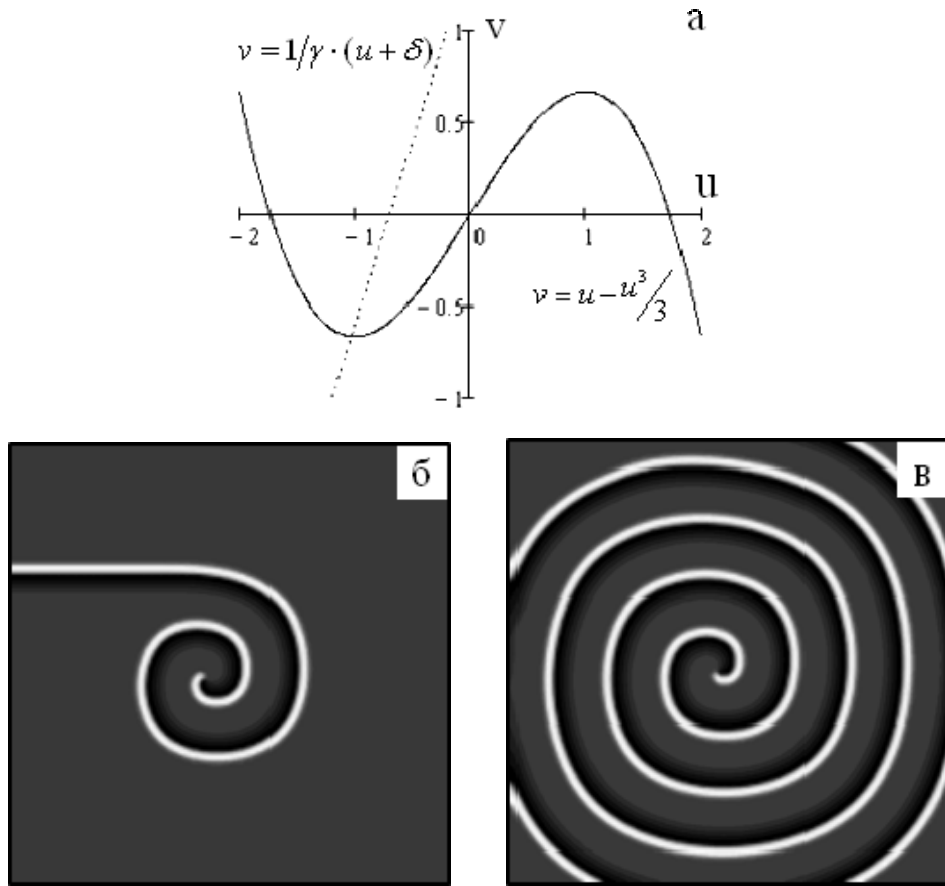


Рис. 5.2. (а) Нуль-изоклины и (б, в) развитие спиральной волны в модели (5.1) в моменты времени (б) $t=120$, (в) $t=300$ (показано пространственное распределение переменной u). Параметры модели: $\varepsilon=0.09$, $\gamma=0.5$, $\delta=0.7$, $D_F=0.1$. Размер области (б), (в) 200×200 .

5.2.1. ФитцХью-Нагумо и Брюсселятор

Составим объединенную систему. При этом один из параметров модели Брюсселятор, a или b (мы рассмотрели оба случая), выберем линейно зависимым от активаторной переменной u модели ФитцХью-Нагумо:

$$\begin{cases} \frac{du}{dt} = u - \frac{u^3}{3} - v + D_F \nabla^2 u, \\ \frac{dv}{dt} = (u - \gamma v + \delta) \varepsilon, \\ \frac{dx}{dt} = a - (b(u) + 1)x + x^2 y + \nabla^2 x, \\ \frac{dy}{dt} = b(u)x - x^2 y + D_B \nabla^2 y, \end{cases} \quad (5.3)$$

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. Здесь и далее мы используем один и тот же набор параметров возбудимой подсистемы, приведенный в подписи к Рис. 5.2. Значения параметров модели Брюсселятор мы подбираем так, что они удовлетворяют условиям бифуркации Тьюринга [Романовский и др., 1984]. Кроме того должны быть соизмеримыми характерные размеры структур, формирующихся в подсистемах: спиральной волны и структур Тьюринга.

Гладкая спиральная волна, развивающаяся в возбудимой подсистеме (показанная на Рис. 5.2) под действием неустойчивости во второй подсистеме

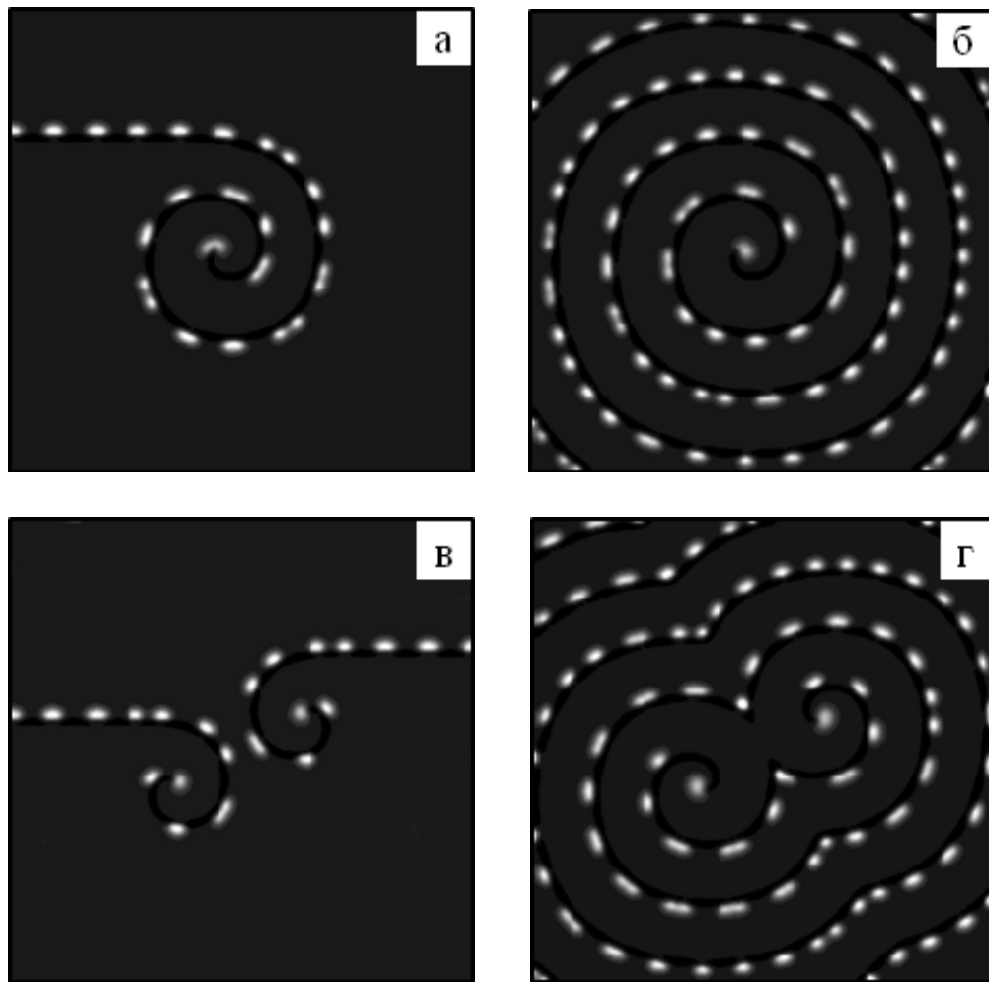


Рис.5.3. (а, б) Развитие одиночной сегментированной спирали (переменная x) и (в, г) взаимодействие двух таких спиралей в моменты времени (а) $t=120$, (б) $t=300$, (в) $t=70$, (г) $t=275$. Параметры модели: $\varepsilon=0.09$, $\gamma=0.5$, $\delta=0.7$, $D_F=0.1$, $a=2$, $D_B=100$, $b_c=1.25$, $\Delta=2$. Размер области 200×200 .

теме начинает дробиться. На Рис. 5.3 представлены результаты численного эксперимента для системы (5.3). В качестве начальных условий для второй подсистемы использовалось однородное распределение, возмущённое случайным шумом. Изображена одиночная сегментированная спираль, а также взаимодействие двух спиралей. На этом и последующих рисунках показано пространственное распределение активаторной переменной потенциально неустойчивой по Тьюрингу подсистемы (в данном случае модели Брюсселятор).

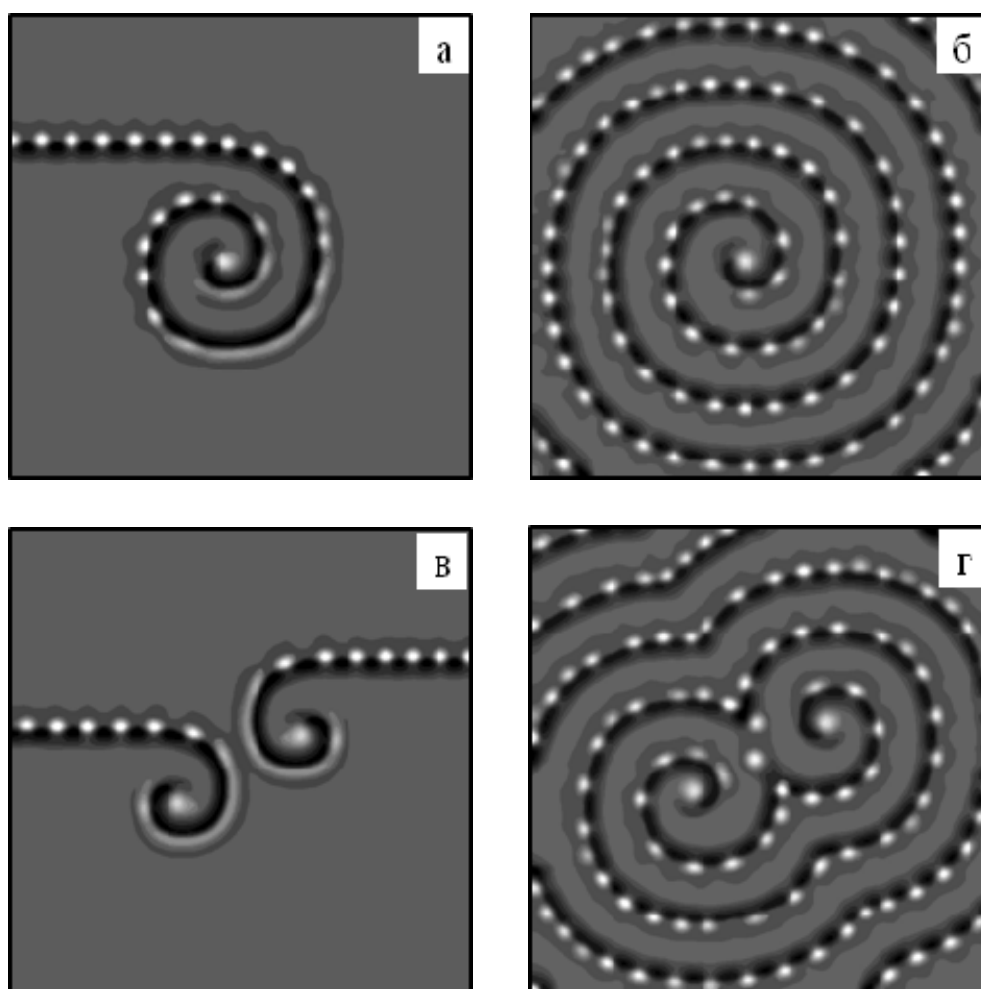


Рис.5.4. (а, б) Развитие одиночной сегментированной спирали и (в, г) взаимодействие двух таких спиралей в моменты времени (а) $t=120$, (б) $t=300$, (в) $t=70$, (г) $t=280$ (переменная x). Параметры модели: $\varepsilon=0.09$, $\gamma=0.5$, $\delta=0.7$, $D_F=0.1$, $b=2$, $D_B=100$, $a_c=4.2$, $\Delta=-1$. Размер области 200×200 .

Рассмотрим теперь случай, когда от переменной u зависит параметр a модели Брюсселятор. $a(u) = \begin{cases} a_c + \Delta \cdot u, & u \geq 0 \\ a_c, & u < 0 \end{cases}$ a_c – значение параметра a в точке бифуркации. Сегментированная спиральная волна, которая формируется в этом случае (Рис.5.4), существенно отличается от предыдущей.

5.2.2. Две модели ФитцХью-Нагумо

Составим систему, объединяющую две модели ФитцХью-Нагумо:

$$\begin{cases} \frac{du}{dt} = u - \frac{u^3}{3} - v + D_1 \nabla^2 u, \\ \frac{dv}{dt} = (u - \gamma_1 v + \delta_1) \varepsilon, \\ \frac{d\tilde{u}}{dt} = (\tilde{u} - \frac{\tilde{u}^3}{3} - \tilde{v} + I(u) + D_2 \nabla^2 \tilde{u}) \alpha, \\ \frac{d\tilde{v}}{dt} = (\tilde{u} - \gamma_2 \tilde{v} + \delta_2 + \nabla^2 \tilde{v}) \alpha. \end{cases} \quad (5.4)$$

где $I(u) = \begin{cases} I_c + \Delta \cdot u, & u \geq 0 \\ I_c, & u < 0 \end{cases}$, I_c – бифуркационное значение параметра I . Формирующаяся в системе (5.4) сегментированная спираль, полученная в численном эксперименте, изображена на Рис. 5.5. Мы также демонстрируем взаимодействие двух спиралей, развивающихся, из отрезка, возмущенного в центре области.

Заметим, что похожие сегментированные спирали наблюдают в системе, состоящей из двух идентичных связанных через задержку по времени моделей ФитцХью-Нагумо [Yuan Guo-Yong et al., 2008].

Если в системе (5.4) изменить один из параметров, влияющих на характерный размер формирующейся тьюринговской структуры, мы получим сегментированную спиральную волну, представленную на Рис. 5.6.

В результате проведенных численных экспериментов мы можем заключить, что в зависимости от свойств взаимодействующих подсистем возможно формирование различных по форме и виду сегментированных волн.

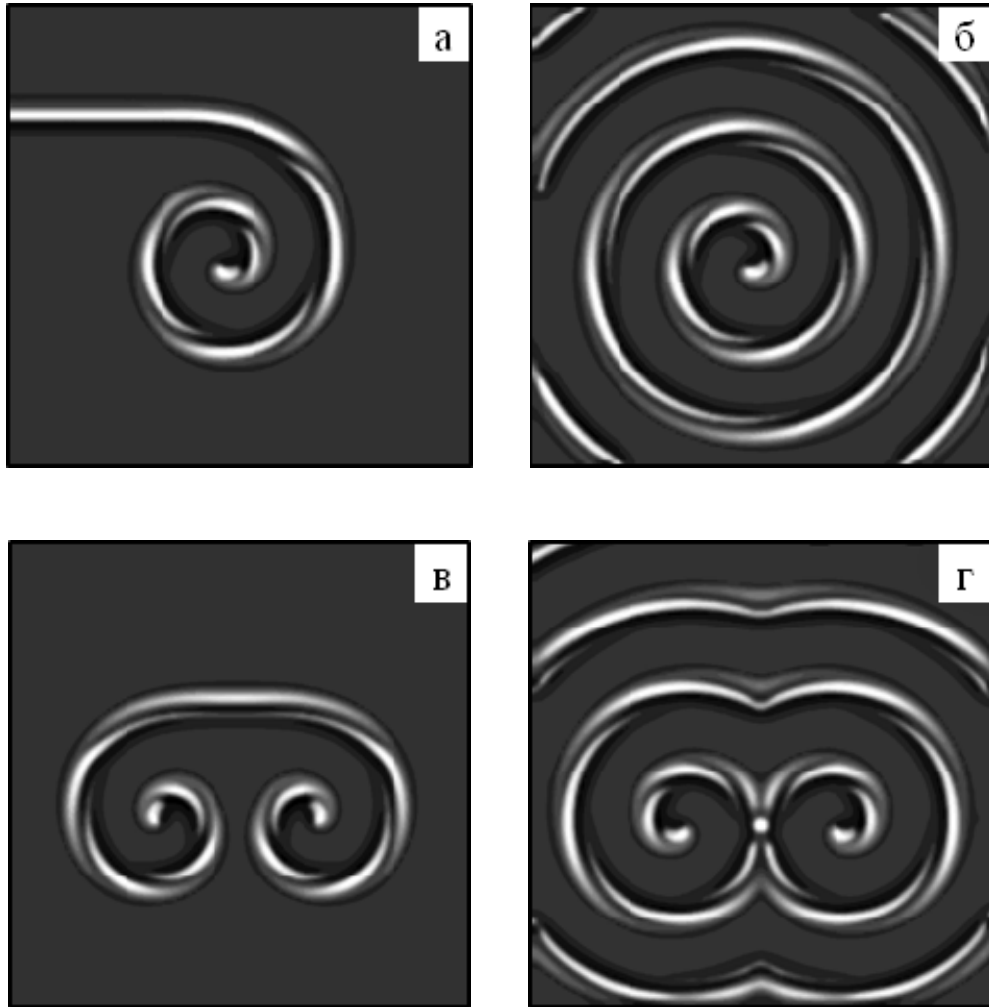


Рис.5.5. (а, б) Развитие одиночной сегментированной спирали и (в, г) взаимодействие двух таких спиралей в моменты времени (а) $t=75$, (б) $t=200$, (в) $t=60$, (г) $t=225$ (переменная \tilde{u}). Параметры модели: $\varepsilon=0.09$, $\gamma_I=0.5$, $\delta_I=0.7$, $D_I=0.1$, $\gamma_2=0.5$, $\delta_2=0.5$, $D_2=0.05$, $\alpha=1$, $I_c=0.1$, $\Delta=0.03$. Размер области 100×100 .

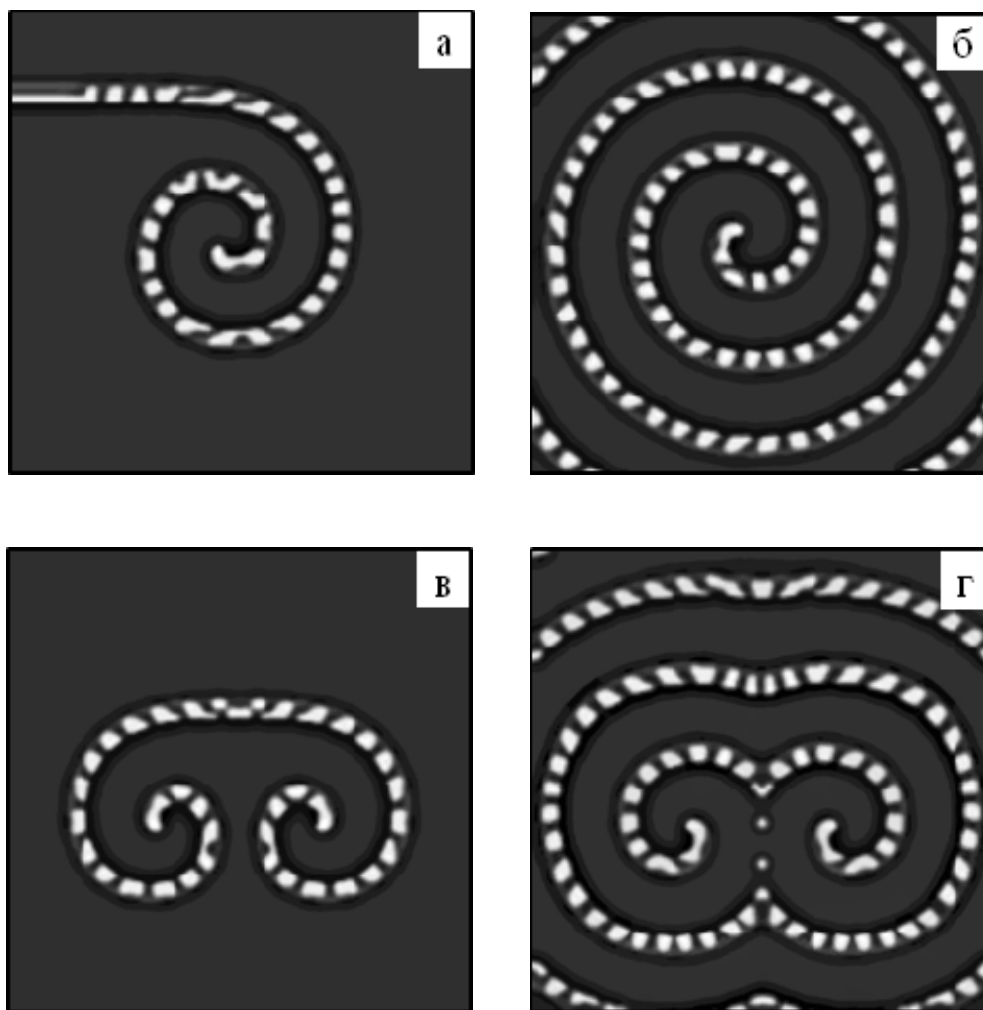


Рис.5.6. (а, б) Развитие одиночной сегментированной спирали и (в, г) взаимодействие двух таких спиралей в моменты времени (а) $t=75$, (б) $t=200$, (в) $t=60$, (г) $t=233$ (переменная \tilde{u}). Параметры модели: $\varepsilon=0.09$, $\gamma_1=0.5$, $\delta_1=0.7$, $D_1=0.1$, $\gamma_2=0.5$, $\delta_2=0.5$, $D_2=0.05$, $\alpha=5$, $I_c=0.1$, $\Delta=0.03$. Размер области 100×100 .

5.3. «Дробление» бегущей волны в окрестности бифуркационной точки коразмерности два, в которой пересекаются границы волновой и тьюринговской неустойчивостей

Допустим, что волна описывается некоторой переменной u . В окрестности точки пересечения границ тьюринговской и волновой неустойчивостей её можно представить в виде суперпозиции соответствующих мод: $u(r,t) = A_T e^{ik_T r} + A_L e^{i(\omega t + k_W r)} + A_R e^{i(\omega t - k_W r)}$.

Здесь A_T - комплексная амплитуда моды, соответствующей волновому вектору k_T , ставшей неустойчивой в результате тьюринговской бифуркации; A_R, A_L - комплексные амплитуды мод, соответствующих одинаковым по модулю, но разным по направлению волновым векторам $\pm k_W$ и частоте ω , ставших неустойчивыми в результате волновой бифуркации.

Если предположить, что бифуркации являются суперкритическими, то вблизи них динамика системы взаимодействующих мод может быть описана при помощи амплитудных уравнений типа Гинзбурга-Ландау следующего вида [Nicola, 2001]

$$\begin{aligned} \partial_t A_T &= \eta_T A_T - |A_T|^2 A_T - h_{TW} (|A_L|^2 + |A_R|^2) A_T, \\ \partial_t A_L &= \eta_W A_L - (1 - ic_1) |A_L|^2 A_L - h_{LR} (1 - ic_2) |A_R|^2 A_L - h_{WT} (1 - ic_3) |A_T|^2 A_L, \\ \partial_t A_R &= \eta_W A_R - (1 - ic_1) |A_R|^2 A_R - h_{LR} (1 - ic_2) |A_L|^2 A_R - h_{WT} (1 - ic_3) |A_T|^2 A_R. \end{aligned} \quad (5.5)$$

Параметры η_T, η_W определяют отклонение от тьюринговской и волновой бифуркаций соответственно; параметры h_{TW}, h_{WT}, h_{LR} характеризуют силу конкуренции между модами; c_1, c_2 и c_3 определяют отношение мнимых и действительных частей коэффициентов перед соответствующими кубическими членами.

В работе [Nicola, 2001] проведено исследование существования и устойчивости стационарных решений системы (5.5). Некоторые полученные результаты представлены в таблице 5.1.

Используя соотношения, приведенные в таблице 5.1, мы провели численный эксперимент для системы амплитудных уравнений (5.5), при

Таблица 5.1

Стационарные режимы	Условия существования	Условия устойчивости
Режим структуры Тьюринга $ A_T \neq 0, A_L = 0, A_R = 0$	$\eta_T > 0$	$\eta_W < h_{WT}\eta_T$
Режим бегущие волны $ A_T = 0,$ $ A_L = 0, A_R \neq 0$ или $ A_L \neq 0, A_R = 0$	$\eta_W > 0$	$h_{RL} > 1, \eta_W > \frac{\eta_T}{h_{TW}}$
Смешанный режим бегущие волны – структуры Тьюринга $ A_T \neq 0,$ $ A_L \neq 0, A_R = 0$ или $ A_L = 0, A_R \neq 0$	$1 - h_{WT}h_{TW} > 0$	$\eta_W > h_{WT}\eta_T, \eta_W < \frac{\eta_T}{h_{TW}}$

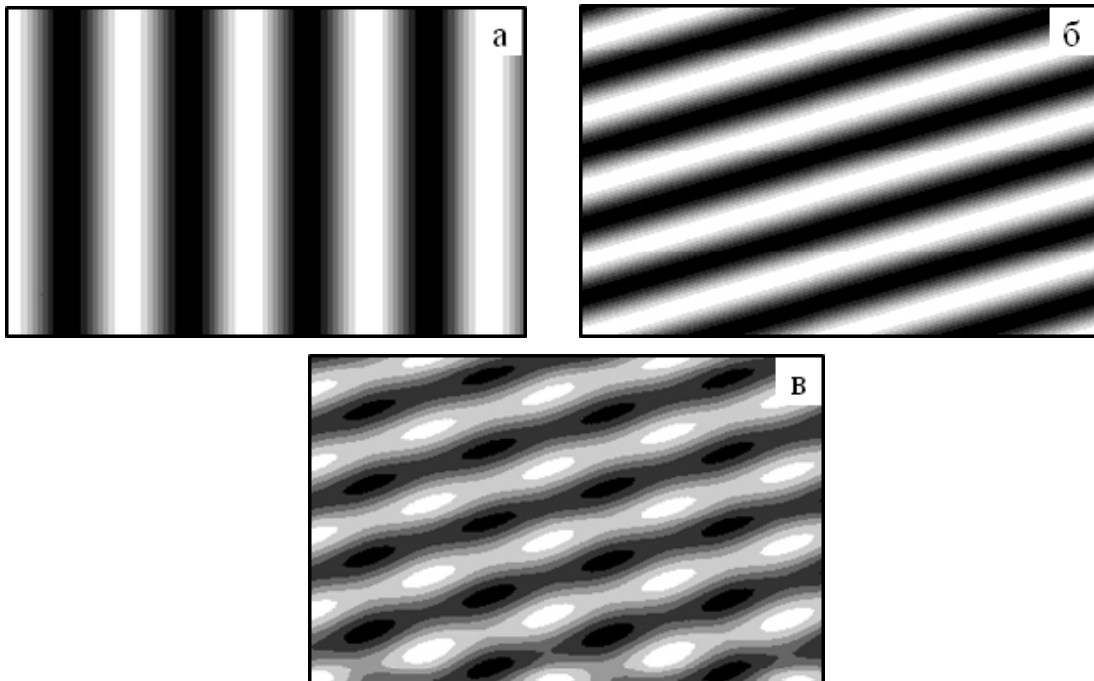


Рис.5.7. Пространственно-временные графики $u(r,t)$ (80 пр. ед.×80 врем ед., время растет снизу вверх) некоторых возможных режимов, возникающих в окрестности бифуркационной точки коразмерности два, в которой пересекаются границы волновой и тьюринговской неустойчивостей: (а) структур Тьюринга, (б) бегущих волн, (в) смешанного режима «бегущие волны - структуры Тьюринга».

этом использовалась программа *MathCad*. На Рис. 5.7 представлены пространственно-временные графики функции $u(r,t)$.

Для нас представляет интерес смешанный режим, образованный наложением бегущих волн и структур Тьюринга. Возникающие при этом пространственно-временные структуры, представляющие собой «дробленные» бегущие волны, показаны на Рис. 5.8 (а). Мы вырезали одну из таких волн, чтобы продемонстрировать ее движение (Рис. 5.8 (б, в)).

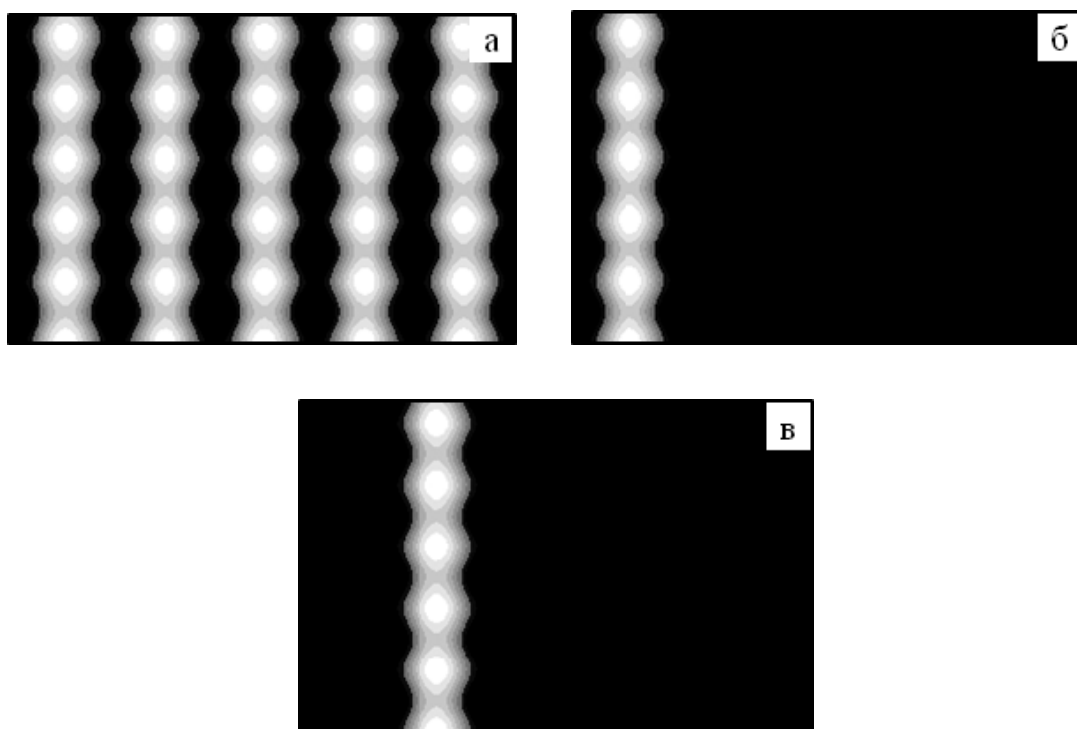


Рис.5.8. (а) «Дробленные» бегущие волны $u(x,y,t)$ в момент времени $t=5$, (б, в) движение одиночной волны: (б) $t=5$, (в) $t=11$. Размер области 250×80 .

5.4. Взаимодействие двух стационарных состояний – возбуждимого и обладающего псевдотьюринговской неустойчивостью

Данный механизм был предложен в работе [Vanag, Epstein, 2003a]. Авторы объясняют сегментирование взаимодействием возбуждимого состояния и состояния, вообще говоря, неустойчивого по Тьюрингу, но с тем

отличаем, что нулевая мода также неустойчива (действительная часть собственного значения характеристического уравнения нулевой моды положительна). Авторы называют такую неустойчивость псевдотьюринговской. В численном эксперименте воспроизводят сегментированные волны в моделях Грея-Скотта и Орегонатор.

Мы предлагаем получить сегментированную волну в модели ФитцХью-Нагумо

$$\begin{cases} \frac{du}{dt} = u - \frac{u^3}{3} - v + \nabla^2 u, \\ \frac{dv}{dt} = (\rho u - v + \delta)\varepsilon + D\nabla^2 v. \end{cases} \quad (5.6)$$

Анализ данной модели показал, что в системе с постоянными значениями параметров невозможно одновременное выполнение условий возбудимости среды (малое ε) и псевдотьюринговской неустойчивости. Однако это становится возможным, если один из параметров, например, параметр ρ , выбрать в виде кусочно-линейной функции $\rho(u) = \begin{cases} \rho_1, & u \geq 0 \\ \rho_2, & u < 0 \end{cases}$. При этом допустимый диапазон параметров, таких что выполнены условия, необходимые для формирования сегментированной волны, очень узок. Дело в том, что одна из особых точек, ответственная за возбудимое состояние, должна располагаться около экстремума кривой изоклины $du/dt=0$, а обе другие особые точки должны находиться вблизи другого экстремума, что налагает жёсткие ограничения на параметры. Заметим, что системы с кусочно-линейными функциями широко используются при моделировании процессов в различных распределенных, в том числе реакционно-диффузионных, системах [Crampin et al., 2002; Nekorkin., Kazantsev, 2002; Mendez et al., 2007].

На Рис. 5.9 показаны нуль-изоклины и дисперсионные кривые системы (5.6). Поясним, что λ_1 и λ_2 являются критическими собственными значениями характеристических уравнений модели (5.6), линеаризованной соответственно около левой и правой особых точек. Дисперсионные кривые представляют собой зависимость действительной части каждого из λ_1 и λ_2 от величины волнового числа k .

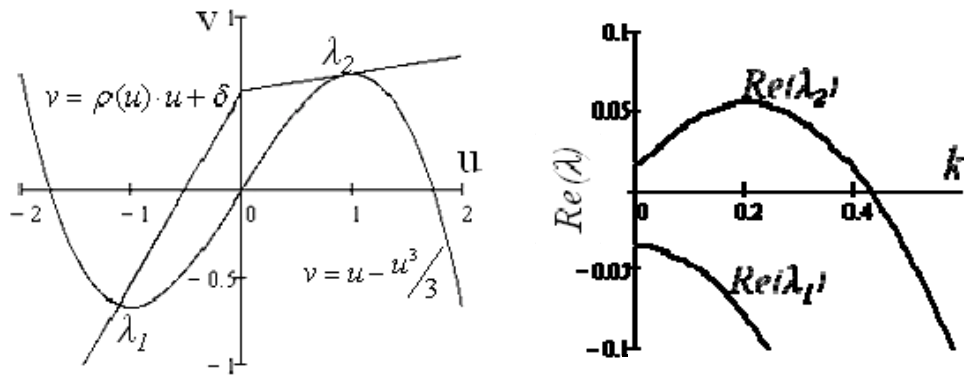


Рис.5.9. Нуль-изоклины и дисперсионные кривые модели ФитцХью-Нагумо. Параметры модели: $\varepsilon=0.09$, $\delta=0.568$, $\rho_1=1.1$, $\rho_2=0.1016$, $D=1.2$.

Возникающая в системе (5.6) сегментированная волна изображена на Рис. 5.10. Отметим, что полученный режим не является долгоживущим и со временем волна, распадаясь на сегменты, исчезает.

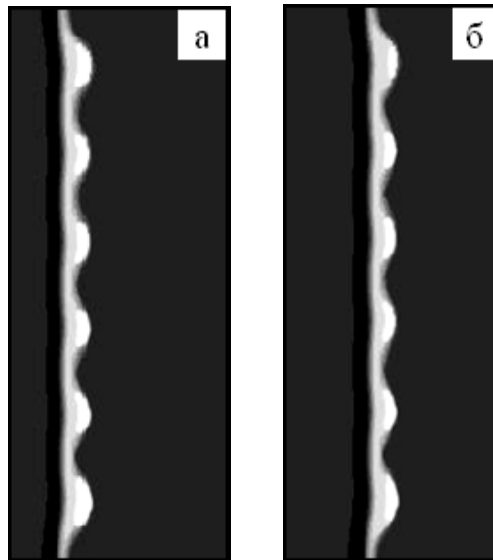


Рис.5.10. Сегментированная волна в модели ФитцХью-Нагумо в моменты времени (а) $t=50$, (б) $t=60$. Параметры модели: $\varepsilon=0.09$, $\delta=0.568$, $\rho_1=1.1$, $\rho_2=0.1016$, $D=1.2$. Размер области 65×200 .

5.5. Выводы по Главе 5

В данной работе предложены три возможных механизма формирования сегментированных волн и спиралей. Структуры такого рода были об-

наружены в пространственно-распределенной реакции Белоусова-Жаботинского, диспергированной в обращенной микроэмульсии аэрозоля ОТ.

Первый механизм обусловлен взаимодействием двух подсистем, одна из которых возбудима, а другая неустойчива по Тьюрингу. Показано, как под воздействием поперечной неустойчивости из однородной спиральной волны формируется сегментированная спираль. В зависимости от свойств подсистем мы демонстрируем несколько различных по виду и форме сегментированных спиральных волн, как таких, которые уже наблюдались в экспериментах, так и пока полученных.

В качестве второго механизма мы предложили «дробление» бегущей волны в окрестности бифуркационной точки коразмерности два, в которой пересекаются границы тьюринговской и волновой неустойчивостей. Проведен анализ соответствующих амплитудных уравнений. Результат подтвержден численными экспериментами.

Наконец, мы показали, что сегментированные волны могут возникать в некоторых простых двухкомпонентных моделях типа «реакция-диффузия», имеющих более одного стационарного состояния, в частности, в модели ФитцХью-Нагумо.

На наш взгляд наиболее вероятным кандидатом для объяснения наблюдаемых структур является первый механизм. Прежде всего, это единственный механизм, который реализуется в широком диапазоне параметров. При этом система может находиться как около бифуркации (как это происходит в случае «дробления» бегущей волны), так и вдали от неё. Кроме того, структуры, которые возникают по этому сценарию, являются долгоживущими в отличие от сегментированных волн, возникающих по третьему механизму. Наконец, этот механизм демонстрирует большое количество различных по виду и форме сегментированных волн и спиралей. Варьируя значения соответствующих параметров, определяющих характерный размер формирующихся в подсистемах структур, нетрудно получить желаемый размер сегментов или волны в целом.

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. Результат 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 подкрепляются 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 ЦИТИРУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Agladze K.I., Krinsky V.I., Pertsov A.M. Chaos in the Non- Stirred Belousov-Zhabotinskii Reaction is Induced by Interaction of Waves and Stationary Dissipative Structures// *Nature*, 1984, v. 308, p. 834-835
2. Belousov B. P. Oscillations and Travelling Waves in Chemical Systems, ed. R. J. Field and M. Burger, Wiley, New York, 1985, p. 605
3. Berenstein I. Pattern formation in a reaction-diffusion-advection system with wave instability// *Chaos*, 2012, v. 22 (2), p. 023112.
4. Biancalani T., Fanelli D., Di Patti F. Stochastic Turing patterns in the Brusselator model// *Phys. Rev. E*, 2010, v. 81, p. 046215
5. Boronska K., Tuckerman L.S. Standing and travelling waves in cylindrical Rayleigh–Benard convection// *J. Fluid Mech.*, 2006, v. 559, p. 279–298
6. Bray W.C. A periodic reaction in homogeneous solution and its relation to catalysis// *J. Am. Chem. Soc.*, 1921, v. 43, p. 1262
7. Bray W.C, Liebhafsky H.A. Reactions involving hydrogen peroxide, iodine and iodate ion. I. Introduction.// *J. Am. Chem. Soc.*, 1931, v. 53, p. 38–44
8. Bullara D., De Decker Y., Lefever R. Nonequilibrium chemistry in confined environments: A lattice Brusselator model// *Phys. Rev. E*, 2013, v. 87, p. 062923
9. Buric N., Todorovic K., Rankovic D., Vasovic N. Mean field approximation for noisy delay coupled excitable neurons// *Physica A*, 2010, v. 389, p. 3956
10. Carballido-Landeira J., Berenstein I., Taboada P., Mosquera V., Vanag V.K., Epstein I.R., Perez-Villar V., Munuzuri A.P. Long-lasting dashed waves in a reactive microemulsion// *Phys.Chem.Chem.Phys.*, 2008, v. 10, p. 1094–1096

11. Castets V., Dulos E., Boissonade J., Kepper P.D. Experimental evidence of a sustained standing Turing-type nonequilibrium chemical pattern // *Phys. Rev. Lett.*, 1990, v.64, p.2953-2956
12. Chance B., Pye E.K., Ghosh A.K., Hess B. Eds. *Biological and Biochemical Oscillators*, Academic Press: New York, 1973, p. 285-350
13. Crampin E.J., Gaffney E.A., Maini P.K. Mode doubling and tripling in reaction-diffusion patterns on growing domains: a piece-wise linear model // *J. Math. Biol.*, 2002, v. 44. p. 107-128
14. De T.K, Maitra A. Solution behaviour of Aerosol OT in non-polar solvents// *Adv. Colloid Interface Sci.*, 1995, v. 59, p. 95
15. De Wit A. Spatial patterns and spatiotemporal dynamics in chemical systems// *Advances in Chemical Physics*, 1999, v. 109, p. 435 - 513
16. Deane A.E., Knobloch E., Toomre J. Traveling waves and chaos in thermosolutal convection // *Phys. Rev. E*, 1987, v. 36, p. 2862–2869
17. Eiswirth M., Ertl G. Kinetic oscillations in the catalytic CO oxidation on a Pt(110) surface// *Surf. Sci.*, 1986, v. 177, p. 90
18. Epstein I.R., Berenstein I.B., Dolnik M., Vanag V.K., Yang L., Zhabotinsky A.M. Coupled and forced patterns in reaction-diffusion systems// *Phil. Trans. R. Soc. A*, 2008, v. 366, p. 397–408
19. Epstein I.R., Pojman J.A. *An Introduction to Nonlinear Chemical Dynamics* New York: Oxford Univ. Press, 1998
20. Fanelli D., Cianci C., Di Patti F. Turing instabilities in reaction-diffusion systems with cross diffusion// *Eur. Phys. J. B*, 2013, v. 86, p. 142
21. Field R.J., Koros E., Noyes R.M. Oscillations in chemical systems. Thorough analysis of temporal oscillation in bromate-cerium-malonic acid system// *J. Amer. Chem. Soc.*, 1972, v. 94, p. 8649-64
22. Field R.J., Noyes R.M. (a) Oscillations in chemical systems. IV. Limit cycle behavior in a model of a real chemical reaction// *J. Chem. Phys.*, 1974, v. 60, p. 1877-84

23. Field R.J., Noyes R.M. (b) Oscillations in chemical systems. IV. Quantitative explanation of band propagation in the Belousov-Zhabotinsky reaction// *J. Amer. Chem. Soc.*, 1974, v. 96, p. 2001-2006
24. Fisher R.A. The Wave of Advantageous Genes// *Ann. Eugenics*, 1937, v. 7, p. 355-369
25. FitzHugh R. Impulses and physiological states in theoretical models of nerve membrane// *Biophysical J.*, 1961, v. 1, p. 445-466
26. FitzHugh R. Motion picture of nerve impulse propagation using computer animation// *Journal of Applied Physiology*, 1968, v. 25, p. 628-630
27. FitzHugh R. Mathematical models of excitation and propagation in nerve. *Biological Engineering*, ed. Schwan H.P., McGraw-Hill Book Co: New York, 1969, p. 1-85
28. Gierer A. Generation of biological patterns and form: Some physical, mathematical, and logical aspects// *Progr. Biophys. molec. Biol*, 1981, v. 37, p. 1-47
29. Gierer A. The Hydra model - a model for what?// *Int. J. Dev. Biol.*, 2012, v. 56, p. 437-445
30. Gierer A., Meinhardt H. A theory of biological pattern formation// *Kybernetik*, 1972, v. 12, p. 30-39
31. Gong Y., Christini D.J. Antispiral Waves in Reaction-Diffusion Systems// *Phys. Rev. Lett.*, 2003, v. 90, p. 8
32. Goodwin R.M. A Growth Cycle// *Socialism, Capitalism and Economic Growth*, Feinstein, C.H. (ed.), Cambridge University Press, 1967
33. Hodgkin A., Huxley A. A quantitative description of membrane current and its application to conduction and excitation in nerve// *J. Physiol*, 1952, v. 117, p. 500-544
34. Hoekstra A.G., Kroc J., Sloot P. Simulating complex systems by cellular automata. Springer, 2010, p.360

35. Hou M. J., Shah D. O. Effects of the Molecular Structure of the Interface and Continuous Phase on Solubilization of Water in Water/Oil Microemulsions// *Langmuir*, 1987, v. 3, p. 1086-1096
36. Imbihl R., Cox M.P., Ertl G., Kinetic oscillations in the catalytic CO oxidation on Pt(100): Theory// *J. Chem. Phys.*, 1986, v. 84, p. 3519
37. Imbihl R., Ertl G. Oscillatory Kinetics in Heterogeneous Catalysis// *Chem. Rev.*, 1995, v. 95, p. 697
38. Izhikevich E.M. Dynamical systems in neuroscience: the geometry of excitability and bursting// *Dynamical Systems*. The MIT press, 2007
39. Jahnke W., Skaggs W.E., Winfree A.T. Chemical vortex dynamics in the Belousov-Zhabotinskii reaction and in the two-variable Oregonator model// *J. Phys. Chem.*, 1989, v. 93 (2), p. 740–749
40. Jost C., Devulder G., Vucetich J.A., Peterson R., Arditi R. The wolves of Isle Royale display scale-invariant satiation and density dependent predation on moose// *J. Anim. Ecol.*, 2005, v. 74 (5), p. 809–816
41. Kadar S., Amemiya T., Showalter K. Reaction Mechanism for Light Sensitivity of the $\text{Ru}(\text{bpy})_3^{2+}$ - Catalyzed Belousov-Zhabotinsky Reaction// *J. Phys. Chem. A*, 1997, v. 101 (44), p. 8200–8206
42. Kaminaga A., Vanag V.K., Epstein I.R. Wavelength Halving in a Transition between Standing Waves and Traveling Waves // *Phys. Rev. Lett.*, 2005, v. 95, p. 058302
43. Kaminaga, A., Vanag, V.K., Epstein I.R. A reaction–diffusion memory device// *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2006, v. 45, p. 3087–3089
44. Kepper P.D., Boissonade J., Epstein I.R. Chlorite-Iodide reaction: a versatile system for the study of nonlinear dynamical behavior// *J. Phys. Chem.*, 1990, v. 94 (17), p. 6525–6536
45. Kepper P.D., Epstein I.R., Kustin K. A Systematically Designed Homogeneous Oscillating Reaction: The Arsenite-Iodate-Chlorite System// *J. Am. Chem. Soc.*, 1981, v. 103, p. 2133-2134

46. Kepper P.D., Epstein I.R., Kustin K., Orban M., "Batch oscillations and spatial wave patterns in chlorite oscillating systems," *Journal of Physical Chemistry*, vol. 86 (2), pp. 170–171, 1982.
47. Kinoshita S., Iwamoto M., Tateishi K., Nobuhiko J.S., Ueyama D. Mechanism of spiral formation in heterogeneous discretized excitable media// *Phys. Rev. Lett. E*, 2013, v. 87, p. 062815
48. Koch C. *Biophysics of Computation: Information Processing in Single Neurons*// Oxford University Press / ed. Stryker M. Oxford University Press, 1999, v. 428, p. 562
49. Krug H.J., Pohlmann L., Kuhnert L. Analysis of the modified complete Oregonator accounting for oxygen sensitivity and photosensitivity of Belousov-Zhabotinskii systems// *J. Chem. Phys.*, 1990, v. 94, p. 4862
50. Kuhnert L. A new optical photochemical memory device in a light-sensitive chemical active medium// *Nature London*, 1986, v. 319, p. 393
51. Kuhnert L., Agladze K.I., Krinsky V.I. Image processing using light-sensitive chemical waves// *Nature*, 1989, v. 337, p. 244-247
52. Kuramoto Y. *Chemical Oscillations, Waves, and Turbulence*. - Springer-Verlag, Berlin, 1984, 198 p.
53. Lengyel I., Epstein I.R. Modeling of Turing Structures in the Chlorite—Iodide—Malonic Acid—Starch Reaction System// *Science*, 1991, 251 (4994), p. 650-652
54. Lengyel I., Epstein I.R. A chemical approach to designing Turing patterns in reaction-diffusion systems// *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, 1992, v. 89, p. 3977
55. Lengyel I., Rabai G., Epstein I.R. Batch oscillation in the reaction of chlorine dioxide with iodine and malonic acid// *J. Am. Chem. Soc.*, 1990, v. 112, p. 4606
56. Lesley M., Schmidt L.D. Chemical Autocatalysis in the NO + CO Reaction on Pt(100)// *Chem. Phys. Letters*, 1983, v. 102, p. 459
57. Livshits M.A. Chemical Waves as a Result of Instability in Reaction-Diffusion Systems// *Z. Phys. B - Condensed Matter*, 1983, v. 53, p. 83-88

58. Lotka A.J. Contribution to the Theory of Periodic Reaction// J. Phys. Chem., 1910, v. 14 (3), p. 271–274
59. Lotka A.J. Analytical Note on Certain Rhythmic Relations in Organic Systems// Proc. Natl. Acad. Sci. U.S., 1920, v. 6, p. 410–415
60. Lotka A.J. Elements of Physical Biology, Williams and Wilkins, 1925
61. Mare A.F.M., Panfilov A.V. Spiral Breakup in Excitable Tissue due to Lateral Instability// Phys. Rev. Lett., 1997, v. 78, p. 1819-1822
62. Marts B., Lin A. L. Transition from traveling to standing waves in the 4:1 resonant Belousov-Zhabotinsky reaction // Phys. Rev. Lett. E., 2008, v. 77, p. 026211
63. Meinhardt H. Models of biological pattern formation. London, UK: Academic Press, 1982, v. 6, p. 211
64. Meinhardt H. The Algorithmic Beauty of Sea Shells. 3rd enlarged edition Springer, Heidelberg, New York, 2003, p. 236
65. Meinhardt H. Models of biological pattern formation: from elementary steps to the organization of embryonic axes// Curr. Top. Dev. Biol., 2008, v. 81, p. 1-63
66. Meinhardt H. Modeling pattern formation in hydra: a route to understanding essential steps in development// Int. J. Dev. Biol., 2012, v. 56, p. 447-462
67. Meinhardt H. Turing's theory of morphogenesis of 1952 and the subsequent discovery of the crucial role of local self-enhancement and long-range inhibition// Interface Focus, 2012, v. 2, №. 4, p. 407-416
68. Meinhardt H., Klingler M. A model for pattern formation on the shells of mollusks// J. theor. Biol, 1987, v. 126, p. 63-69
69. Maini P.K., Othmer H.G. Mathematical models for biological pattern formation. N.-Y., Springer, 2001, p. 317
70. Maini P.K., Woolley T.E., Baker R.E., Gaffney E.A., Lee S.S. Turing's model for biological pattern formation and the robustness problem// Interface Focus, 2012, v. 2, p. 487–496

71. Mendez V., Ortega-Cejas V., Zemskov E.P., Casas-Vazquez J. Transition from pushed-to-pulled fronts in piecewise linear reaction-diffusion systems // *Physica A*, 2007, v. 5, p. 51-64
72. Mihaliuk E., Sakurai T., Chirila F., Showalter K. Feedback Stabilization of Unstable Propagating Waves// *Phys. Rev. E*, 2002, v. 65, p. 0656021
73. Mihaliuk E., Sakurai T., Chirila F., Showalter K. Design and Control of Wave Propagation Patterns in Excitable Media// *Science*, 2002, v. 296, p. 14
74. Mikhailov A.S., Showalter K. Control of waves, patterns and turbulence in chemical systems// *Physics Reports*, 2006, v. 425, p. 79 – 194
75. Morris C., Lecar H. Voltage oscillations in the barnacle giant muscle fiber// *Biophysical journal*, 1981, v. 35, № 1, p. 193–213
76. Murray J.D. *Mathematical biology. I: Introduction*. N.-Y., Springer, 2002, p. 553
77. Murray J.D. *Mathematical biology. II: Spatial models and biomedical applications*. N.-Y., Springer, 2003, p. 811
78. Nagumo J., Animoto S., Yoshizawa S. An active pulse transmission line simulating nerve axon// *Proc. Inst. Radio Engineers*, 1962, v. 50, p. 2061-2070
79. Nasritdinov G., Dalimov R.T. Limit cycle, trophic function and the dynamics of intersectoral interaction// *Current Research J. of Economic Theory*, 2010, v. 2 (2), p. 32–40
80. Nekorkin V.I., Dmitrichev A.S., Bilbault J.M., Binczak S. Polymorphic and regular localized activity structures in a two-dimensional two-component reaction diffusion lattice with complex threshold excitation// *Physica D*, 2010, v. 239, p. 972-987
81. Nekorkin V.I., Kazantsev V.B. Autowaves and solitons in a threecomponent reaction-diffusion system // *Int. J. of Bifurcation and Chaos*, 2002, v. 12, № 11, p. 2421-2434
82. Nekorkin V.I., Shapin D.S., Dmitrichev A.S., Kazantsev V.B., Binczak S., Bilbault J.M. Heteroclinic contours and self-replicated solitary waves in a

- reaction–diffusion lattice with complex threshold excitation// *Physica D*, 2008, v. 237, p. 2463–2475
83. Nicola E.M. Interfaces between Competing Patterns in Reaction-diffusion Systems with Nonlocal Coupling. PhD Thesis. Dresden 2001.
 84. Nicolis G. Introduction to nonlinear science. – Cambridge University Press, 1995, 254 p.
 85. Nicolis G., Prigogine I. Self-Organization in Nonequilibrium Systems. Wiley, New York, 1977, p. 491
 86. Orban M., Kepper P.D., Epstein I.R. Kustin K. New family of homogeneous chemical oscillators: chlorite–iodate–substrate// *Nature*, 1981, v. 292, p. 816 - 818
 87. Ouyang Q., Flesselles J.-M. Transition from spirals to defect turbulence driven by a convective instability// *Nature*, 1996, v. 379, p. 143-145
 88. Ouyang Q., Swinney H.L. Transition from a uniform state to hexagonal and striped Turing patterns// *Nature*, 1991, v. 352, p. 610 - 612
 89. Peard M.G., Cullis C.F. A periodic chemical reaction. The reaction between hydrogen peroxide and iodic acid// *Trans. Faraday Soc.*, 1951, v. 47, p. 616-630
 90. Pena B. Inestabilidades de Turing en Sistemas de Reaccion-Diffusion. Tesis doctoral de la Facultad de Ciencias Universidad de Navarra, 2002
 91. Pena B., Perez-Garcia C. Stability of Turing patterns in the Brusselator model// *Phys. Rev. E*, 2001, v. 64, p. 05621
 92. Prigogine I., Lefever R. Symmetry Breaking Instabilities in Dissipative Systems// *J. Chem. Phys.*, 1968, v. 48, p. 1695
 93. Pullela S.R., Cristancho D., He P., Luo D., Hall K.R., Chen Z. Temperature dependence of the Oregonator model for the Belousov-Zhabotinsky reaction// *Phys.Chem.*, 2009, v. 11, p. 4236–4243
 94. Schwartz S.B., Schmidt L.D. The NO + CO reaction on clean Pt(100): Multiple steady states and oscillations// *Surf. Sci.*, 1988, v. 206, p. 169

95. Steele A.J., Tinsley M., Showalter K. Collective behavior of stabilized reaction-diffusion wave// *Chaos*, 2008, v. 18, p. 026108
96. Technau U., Steele R.E. Evolutionary crossroads in developmental biology: Cnidaria// *Development*, 2011, v. 138, p. 1447-1458
97. Tian C., Lin Z., Pedersen M. Instability induced by cross-diffusion in reaction-diffusion system// *Nonlinear Anasis Real World Applications*, 2010, v.11, p.1036-1045
98. Trembley A. Memoires pour servir a l'histoire d'un genre de polypes d'eau douce, a bras en forme de cornes. Jean & Herman Verbeek, Leide, 1744
99. Turring A.M. The chemical basis of morphogenesis// *Philos. Trans. R. Soc. Lond. B. Biol. Sci.*, 1952, v. 237, p. 37-72
100. Tyson J.J., Fife P.C. Target patterns In a realistic model of the Belousov-Zhabotinskii reactlon// *J. Chem. Phys.*, 1980, v. 73, p. 2224
101. Rehberg I., Rasenat S., Fineberg J., de la Torre Juarez M., Steinberg V. Temporal Modulation of Traveling Waves // *Phys. Rev. Lett.*, 1988, v. 61, p. 2449–2452
102. Rice F.O., Reiff O.M. The Thermal Decomposition of Hydrogen Peroxide// *J. Phys. Chem.*, 1927, v. 31 (9), p. 1352–1356
103. Rossi F., Budroni M.A., Marchettini N., Carballido-Landeira J. Segmented waves in a reaction-diffusion-convection system// *Chaos*, 2012, v. 22, p. 037109
104. Rossi F., Liveri M.L.T. Chemical self-organization in self-assembling biomimetic systems// *Ecological Modelling*, 2009, v. 220, p. 1857–1864
105. Rossi F., Vanag V.K., Epstein I.R. Pentanary Cross-Diffusion in Water-in-Oil Microemulsions Loaded with Two Components of the Belousov-Zhabotinsky Reaction// *Chemistry*, 2013, v. 17 (7), p. 2138-2145
106. Vanag V.K., Epstein I.R. Pattern formation in a tunable medium: the Belousov-Zhabotinsky reaction in an aerosol OT microemulsion// *Phys Rev Lett.*, 2001, v. 87, p. 228301

107. Vanag V.K., Epstein I.R. Inwardly Rotating Spiral Waves in a Reaction-Diffusion System // *Science*, 2001, v. 835, p. 294
108. Vanag V.K., Epstein I.R. Packet waves in a reaction-diffusion system // *Phys. Rev. Lett.*, 2002, v.88, p. 088303
109. Vanag V.K., Epstein I.R.(a) Dash waves in a reaction-diffusion system // *Phys. Rev. Lett.*, 2003, v.90, p. 098301
110. Vanag V.K., Epstein I.R.(b) Segmented spiral waves in a reaction-diffusion system. // *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, 2003, v. 100, p. 14635
111. Vanag V.K., Epstein I.R. Resonance-induced oscillons in a reaction-diffusion system // *Phys. Rev. E*, 2006, v.73, p. 016201
112. Vanag V.K., Epstein I.R. Design and control of patterns in reaction-diffusion systems // *Chaos*, 2008, v. 18, p. 026107
113. Vanag V.K., Yang L., Dolnik M., Zhabotinsky A.M. Epstein I.R. Oscillatory cluster patterns in a homogeneous chemical system with global feedback // *Nature*, 2000, v. 406, p. 389-391
114. Volterra V. Variazioni e fluttuazioni del numero d'individui in specie animali conviventi // *Mem. Acad. Lincei Roma*, 1926, v. 2, p. 31–113
115. Volterra V. Variations and fluctuations of the number of individuals in animal species living together in *Animal Ecology*, Chapman, R.N. (ed), McGraw–Hill, 1931
116. Wang Q., Lu Q., Chen G., Feng Z., Duan L. Bifurcation and synchronization of synaptically coupled FHN models with time delay // *Chaos Solitons Fractals*, 2009, v. 39, p. 918
117. Wangersky P.J. Lotka-Volterra population models // *Ann. Rev. Ecol. Syst.*, 1978, v. 9, p. 189-218
118. Webster G., Wolpert L. Studies on pattern regulation in hydra // *J. Embryol. exp. Morph.*, 1966, v. 16, p. 91-104
119. Wei D.Q., Luo X.S., Zhang B., Qin Y.H. Controlling chaos in space-clamped FitzHugh-Nagumo neuron by adaptive passive method // *Nonlinear Anal. RWA*, 2010, v. 11, p. 1752–1759

120. Winfree A.T. Spiral Waves of Chemical Activity// *Science*, 1972, v. 175, № 4022, p. 634-636
121. Wu D., Zhu S. Stochastic resonance in an optical bistable system subjected to cross-correlated additive white noise and multiplicative colored noise// *Phys. Lett. A*, 2008, v. 372, p. 5299
122. Yang L., Berenstein I., Epstein I.R. Segmented waves from a spatiotemporal transverse wave instability// *Phys. Rev. Lett.*, 2005, v.95, p. 038303
123. Yang L., Dolnik M., Zhabotinsky A.M., Epstein I.R. Pattern formation arising from interactions between Turing and wave instabilities// *J. Chem. Phys.*, 2002, v. 117, №. 15, p. 7259- 7265
124. Yang L., Dolnik M., Zhabotinsky A.M., Epstein I.R. Turing patterns beyond hexagons and stripes// *Chaos*, 2006, v. 16, p. 037114
125. Yuan Guo-Yong, Yang Shi-Ping, Wang Guang-Rui, Chen Shi-Gang. Segmented Spiral Waves and Anti-phase Synchronization in a Model System with Two Identical Time-Delayed Coupled Layers// *Commun. Theor. Phys.*, 2008, v. 49, p. 174–180
126. Zaikin A.N., Zhabotinsky A.M. Concentration wave propagation in two-dimensional liquid-phase self-oscillating system// *Nature*, v. 1970225, p. 535-537
127. Zhabotinsky A.M. A history of chemical oscillations and waves// *Chaos*, 1991, v. 1, p. 379.
128. Zhabotinsky A.M., Dolnik M., Epstein I.R. Pattern formation arising from wave instability in a simple reaction-diffusion system// *J. Chem. Phys.*, 1995, v. 103, p. 10306
129. Zhabotinsky A.M., Dolnik M., Epstein I.R., Rovinsky A.B. Spatio-temporal patterns in a reaction-diffusion system with wave instability// *J. Chem. Science*, 2000, v. 55, p. 223
130. Zhao Y., Billings S.A., Coca D., Guo Y., Ristic R.I., De Matos L.L. Identification of a Temperature Dependent FitzHugh-Nagumo model for the Belousov-Zhabotinskii Reaction// *Int. J. Bifurcation Chaos*, 2011, v. 21, p. 3249-3258

131. Zykov V.S., Showalter K., Wave front interaction model of stabilized propagating wave segments// *Phys. Rev. Lett.*, 2005, v. 94, p. 0683021
132. Белоусов Б.П. Периодически действующая реакция и её механизм. Сборник рефератов по радиационной медицине за 1958 г. -М: Медгиз, 1959, с.145
133. 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
134. Борина М.Ю., Полежаев А.А. Пространственно-временные структуры в многомерной активной среде, обусловленные многомодовым взаимодействием вблизи волновой// *Известия Вузов. ПНД*, 2012, т. 20, № 6, с. 15-24
135. Вавилин В.А., Гулак П.В., Жаботинский А.М., Заикин А.Н. Комплексные ионы железа - катализаторы автоколебательной реакции окисления малоновой кислоты и ее аналогов броматом// *Ж. Изв. АН СССР Сер. Хим.*, 1969, т. 11, стр. 2618-2622.
136. Ванаг В.К. Волны и динамические структуры в реакционно-диффузионных системах. Реакция Белоусова-Жаботинского в обращенной микроэмульсии// *УФН*, 2004, т. 174. №9, стр. 991-1010
137. Васильев В.А., Романовский Ю.М., Яхно В.Г. Автоволновые процессы. - М.: Наука, 1987, стр. 240
138. Винер Н., Розенблют А. Проведение импульсов в сердечной мышце. Математическая формулировка проблемы проведения импульсов в сети связанных возбудимых элементов, в частности в сердечной мышце// *Кибернетический сборник. Вып. 3. М.: Изд. иностр. лит.*, 1961, стр. 7–56
139. Вольтерра В. Математическая теория борьбы за существование. - М.: Наука, 1976, 286 стр.
140. Гленсдорф П., Пригожин И. Термодинамическая теория структуры, устойчивости и флуктуаций. — М.: Мир, 1973. — 280 стр.

141. Еленин Е.Г., Куркина Е.С. Диффузионная неустойчивость в трехкомпонентных системах типа реакция-диффузия. Реакция (NO+CO)/Pt(100)// Математическое моделирование, 1994, т.6, № 8, с. 17-32
142. Жаботинский А.М. Периодический ход окисления малоновой кислоты в растворе (исследование кинетики реакции Белоусова), Биофизика, 1964, т.9 стр. 306-311
143. Жаботинский А.М. Концентрационные колебания – М. : Наука, 1974. – 179 с.
144. Жаботинский А.М., Заикин А.Н.(а) О механизме возникновения ведущих центров// Колебательные процессы в биологических и химических системах. Труды симпозиума. 1971. т. 2, стр. 288-291
145. Жаботинский А.М., Заикин А.Н.(б) Колебательные процессы в биологических и химических системах. – НЦБИ АН СССР. Пущино, 1971, стр. 314-317
146. Зельдович Я.Б., Франк-Каменецкий Д.А. К теории равномерного распространения пламени// Журн. Физ. Химии, 1938, т. 19, №. 9, стр. 693-697
147. Колмогоров А.Н., Петровский И.Г., Пискунов Н.С. Исследование уравнения диффузии, соединенной с возрастанием вещества, и его применение к одной биологической проблеме // Бюлл. МГУ, секция А, 1937, т. 1., № 6, стр.1-25
148. Кринский В.И., Медвинский А.Б., Панфилов А.В. Эволюция автоволновых вихрей. – М.: Знание, 1986, 48 с.
149. Лобанов А.И. Модели клеточных автоматов// Компьютерные исследования и моделирование, 2010, т. 2, № 3, стр. 273–293
150. Лобанов А.И., Петров И.Б. Лекции по вычислительной математике. - М.: Бином, 2006, стр. 523
151. Лоскутов А.Ю., Михайлов А.С. Введение в синергетику. - М.: Наука, 1990, стр. 272

- 152.Малинецкий Г.Г., СтепанцевМ.Е., Моделирование движения толпы при помощи клеточных автоматов// Известия ВУЗов. Сер. Прикладная нелинейная динамика, 1997, т. 5, стр. 75-79
- 153.Некоркин В.И., Дмитричев А.С., Шапин Д.С., Казанцев В.Б. Динамика модели нейрона со сложно-пороговым возбуждением// Матем. моделирование, 2005, т. 17, № 6, стр. 75–91
- 154.Романовский Ю.М., Степанова Н.В., Чернавский Д.С. Математическое моделирование в биофизике. Введение в теоретическую биофизику. М.-Ижевск, ИКИ-РХД, 2004, стр. 472
- 155.Федоренко Р.П. Введение в вычислительную физику. - М.: Изд-во МФТИ, 1994, стр. 504
- 156.Цыганов М.А., Бикташев В.Н., Бриндли Д., Холден А.В., Иваницкий Г.Р. Волны в кросс-диффузионных системах — особый класс нелинейных волн// УФН, 2007, т. 177, стр. 275–300
- 157.Юджин Одум. Экология. - М.: Мир, 1986. т.1- 328с.; т.2 - 376с.

СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ 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, стр. 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, стр. 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, стр. 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, стр. 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". Пушкино, Россия, 2011, стр. 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, стр. 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, стр. 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, стр. 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, стр. 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, стр. 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 междуна-

родной конференции "Математика, компьютер, образование". Пушкино, Россия, 2013, стр. 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

ПРИЛОЖЕНИЕ

Схема численных экспериментов

Рассмотрим двумерную задачу для системы трех уравнений типа «реакция-диффузия»

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = f(u, v, w) + D_u \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) u, \\ \frac{\partial v}{\partial t} = g(u, v, w) + D_v \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) v, \\ \frac{\partial w}{\partial t} = h(u, v, w) + D_w \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) w. \end{cases} \quad (\text{П.1})$$

В области $0 \leq t \leq T$, $0 \leq x \leq L$, $0 \leq y \leq L$ требуется найти функции $u(t, x, y)$, $v(t, x, y)$ и $w(t, x, y)$, такие что они удовлетворяют системе (П.1), определены начальным условием $f'(u_0, v_0, w_0) = 0$, $g'(u_0, v_0, w_0) = 0$, $w'(u_0, v_0, w_0) = 0$ (в начальный момент времени система находится в однородном стационарном состоянии), и краевыми условиями Неймана на боковых стенках области.

Построим равномерную сетку с координатами $t_n = n \cdot dt$, $x_k = k \cdot dx$, $y_m = m \cdot dy$. Здесь dt - временной, а dx , dy - пространственные шаги, $n = 0, 1, \dots, N$, $k = 0, 1, \dots, K$, $m = 0, 1, \dots, M$. Решение задачи будем искать в виде сеточных функций $\{u_{k,m}^n, v_{k,m}^n, w_{k,m}^n\}$ методом переменных направлений с использованием дробного промежуточного шага [Федоренко, 1994]. Поскольку разностные уравнения для определения переменных $\{u_{k,m}^n\}$, $\{v_{k,m}^n\}$ и $\{w_{k,m}^n\}$ аналогичны друг другу, мы продемонстрируем процедуру их построения на примере функции u .

Рассмотрим пару шагов. Положим, что $u_{k,m}^n$ нам известно. Определим значение $u_{k,m}^{n+1}$. При этом переход от слоя $u_{k,m}^n$ к слою $u_{k,m}^{n+1}$ совершим с ис-

пользованием дробного промежуточного шага $u_{k,m}^{n+1/2}$. При построении разностных уравнений мы используем схему Кранка-Николсон на верхнем слое и явную схему на нижнем [Лобанов, Петров, 2006].

1. Вычисляем $u_{k,m}^{n+1/2}$, аппроксимируя производную по x на верхнем слое, а производную по y - на нижнем

$$\frac{u_{k,m}^{n+1/2} - u_{k,m}^n}{dt} = \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_{k,m}^{n+1/2} + \left(\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right)_{k,m}^n, \quad (\text{П.2})$$

$$\text{где } \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_{k,m}^{n+1/2} = \frac{D}{2dx^2} \left[(u_{k-1,m}^{n+1/2} - 2u_{k,m}^{n+1/2} + u_{k+1,m}^{n+1/2}) + (u_{k-1,m}^n - 2u_{k,m}^n + u_{k+1,m}^n) \right],$$

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right)_{k,m}^n = \frac{D}{dy^2} \left[u_{k,m-1}^n - 2u_{k,m}^n + u_{k,m+1}^n \right].$$

Считая, что шаг по направлениям одинаков, то есть $dx = dy = dr$, перепишем (П.2) в виде

$$\begin{aligned} -u_{k-1,m}^{n+1} + u_{k,m}^{n+1} \cdot (2 + c_u) - u_{k+1,m}^{n+1} = \\ = c_u u_{k,m}^n + (u_{k-1,m}^n - 2u_{k,m}^n + u_{k+1,m}^n) + 2(u_{k,m-1}^n - 2u_{k,m}^n + u_{k,m+1}^n), \end{aligned} \quad (\text{П.3})$$

где $c_u = \frac{2dr^2}{D_1 dt}$. Решая данное уравнения методом потоковой прогонки, найдём значение $u^{n+1/2}$ [Лобанов, Петров, 2006].

Заметим, что в диссертационной работе наряду с граничными условиями Неймана, используются циклические условия. В этом случае для решения уравнения (П.3) следует выбрать метод циклической прогонки.

2. Второй дробный шаг $u_{k,m}^{n+1/2} \rightarrow u_{k,m}^{n+1}$ осуществляется аналогично, но с переменной ролей x и y :

$$\frac{u_{k,m}^{n+1} - u_{k,m}^{n+1/2}}{dt} = \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_{k,m}^{n+1} + \left(\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right)_{k,m}^{n+1/2} + f_{k,m}^{n+1/2},$$

$$\text{где } \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_{k,m}^{n+1} = \frac{D}{dx^2} \left[u_{k-1,m}^{n+1/2} - 2u_{k,m}^{n+1/2} + u_{k+1,m}^{n+1/2} \right],$$

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right)_{k,m}^{n+1} = \frac{D}{2dy^2} \left[(u_{k,m-1}^{n+1} - 2u_{k,m}^{n+1} + u_{k,m+1}^{n+1}) + (u_{k,m-1}^{n+1/2} - 2u_{k,m}^{n+1/2} + u_{k,m+1}^{n+1/2}) \right].$$