

ПРОСТРАНСТВЕННО-ВРЕМЕННЫЕ СТРУКТУРЫ В АКТИВНОЙ СРЕДЕ, ВЫЗВАННЫЕ ДИФFUЗИОННОЙ НЕУСТОЙЧИВОСТЬЮ*

А. А. Полежаев, М. Ю. Борина

Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва

В работе обсуждаются результаты исследования моделей типа «реакция-диффузия», обладающих диффузионной неустойчивостью и возникающих в таких системах пространственно-временных структур. В частности, в общем виде приведены условия как тьюринговой, так и волновой неустойчивостей в системах из трёх уравнений рассматриваемого типа с диагональной матрицей диффузии. Описаны качественные свойства, которыми должна обладать система для того, чтобы в ней могла произойти та или другая бифуркация. Приведены результаты исследования возможных типов пространственно-временных структур, возникших в ограниченной области в результате взаимодействия нескольких мод, ставших неустойчивыми вследствие волновой бифуркации. Показано, что в результате конкуренции мод в зависимости от величины параметра, определяющего силу взаимодействия, возможны лишь два режима: квазиодномерные бегущие волны (существует только одна ненулевая мода) или стоячие волны (все моды отличны от нуля). Обсужден возможный механизм перехода из режима стоячих волн в режим бегущих волн с половинной длиной волны, наблюдавшегося экспериментально в пространственно-распределенной реакции Белоусова–Жаботинского, диспергированной в обращенной микроэмульсии аэрозоля.

Ключевые слова: Активная среда, диффузионная неустойчивость, волновая бифуркация, амплитудные уравнения.

Введение

Пространственно-временная самоорганизация в активных средах давно является предметом экспериментальных и теоретических исследований [1–3]. Весьма важную роль в изучении этих явлений сыграла модельная химическая система – так называемая реакция Белоусова–Жаботинского [4], в которой в пространственно-распределённом случае удалось вначале наблюдать спиральные и концентрические автоволны [5, 6], а позднее также и стационарные диссипативные структуры [7]. Качественно новые результаты в исследовании реакции Белоусова–Жаботинского были

*Статья написана по материалам доклада на X Международной школе «Хаотические автоколебания и образования структур», 7–12 октября 2013 г. Саратов, Россия.

получены группой В. Ванага: они создали экспериментальную систему, в которой реакция протекает в микроэмульсии (растворы реагентов находятся в мицеллоподобных нанок капельках, диспергированных в неполярной жидкости) [8]. Помимо наблюдавшихся ранее, в этой системе удалось получить такие новые типы структур, как антиспирали, волновые пакеты, штрихволны, сегментированные спирали, локализованные колеблющиеся пятна – осциллоны и др. [9–14] (рис. 1).

Теоретический анализ показывает, что основной причиной возникновения большинства из этих структур является диффузионная неустойчивость. На возможность такой неустойчивости указал Алан Тьюринг – выдающийся математик, признанный одним из основателей информатики и теории искусственного интеллекта. Его считают первым теоретиком современного программирования и, наконец, первым в мире хакером. Во время Второй мировой войны Алан Тьюринг возглавлял группу, ответственную за криптоанализ сообщений военно-морского флота Германии. Тьюринг разработал ряд методов взлома, в том числе теоретическую базу для Bombe – машины, использованной для взлома немецкого шифратора Enigma. (Его «хакерская деятельность» внесла во время Второй мировой войны существенный вклад в победу союзных войск над германским флотом, а один из коллег Тьюринга однажды сказал: «Я не берусь утверждать, что мы выиграли войну благодаря Тьюрингу. Однако без него могли бы ее и проиграть».)

В сфере интересов Тьюринга была также математическая биология. В 1952 году в работе «Химическая основа морфогенеза» [15] он 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, систе-

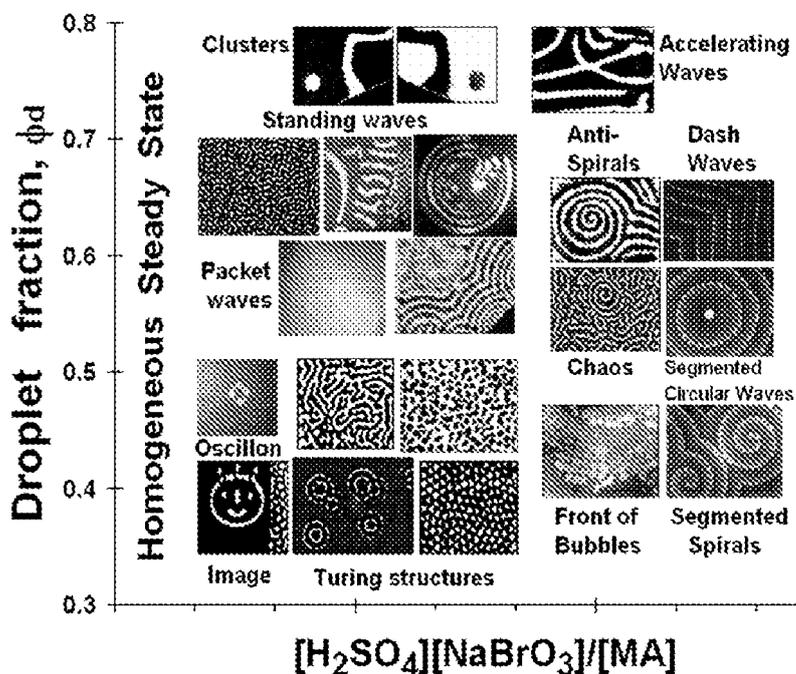


Рис. 1. Таблица структур, экспериментально обнаруженных в реакции Белоусова–Жаботинского, протекающей в микроэмульсии. Конкретный характер структуры зависит как от концентраций исходных реагентов (ось абсцисс), так и от объёмной доли нанок капель (ось ординат) (из работы [14])

ма, находящаяся в отсутствие диффузии в однородном устойчивом состоянии, может потерять устойчивость относительно волн в некотором диапазоне волновых чисел, в котором одно из собственных значений характеристического уравнения линеаризованной системы становится положительным. Ключевую роль здесь играет неустойчивость, обусловленная диффузией, разрушающая исходное стационарное состояние и вызывающая переход в новое, пространственно неоднородное состояние.

Диффузионная неустойчивость, которая приводит к формированию периодических в пространстве и стационарных во времени концентрационных структур, так называемых диссипативных структур, носит название тьюринговской неустойчивости. В этом случае в соответствующей линеаризованной системе одно из собственных чисел становится положительным в некотором диапазоне волновых чисел, оставаясь действительным. Хорошо известно, что в двухкомпонентной модели это возможно, только если в ней присутствует автокатализ и коэффициенты диффузии компонентов различны (точнее, автокаталитическая переменная имеет меньший коэффициент диффузии).

Другой тип диффузионной неустойчивости, называемой 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, фазовая размерность которой не меньше трех.

В данной работе остановимся на нескольких проблемах, связанных с диффузионной неустойчивостью. Во-первых, покажем, как в явном виде выводятся условия возникновения неустойчивости в трехкомпонентной системе типа «реакция-диффузия» для случая диагональной матрицы диффузии. Выявим качественные свойства, которыми должна обладать система, чтобы в ней могла произойти как тьюринговская, так и волновая бифуркация. Покажем, что условия обеих неустойчивостей не противоречат друг другу и могут выполняться одновременно. Полученные результаты позволяют достаточно легко проводить полный параметрический анализ моделей такого рода.

Далее мы обсудим, какие пространственно-временные структуры порождаются волновой бифуркацией в многомерной среде. Проблема заключается в том, что в результате бифуркации одновременно становятся неустойчивыми несколько, а в случае неограниченной области – бесконечно много, мод. Будут выявлены возможные структуры и показано, что единственным определяющим параметром является сила взаимодействия между конкурирующими модами. Численные эксперименты на основе модели Гирера–Майнхарда, расширенной добавлением третьего уравнения, описывающего еще один быстро диффундирующий ингибитор, полностью подтверждают теоретические предсказания.

Наконец, мы обсудим возможный механизм перехода из режима стоячих волн с длиной волны λ_{SW} в режим бегущих волн с половинной длиной волны: $\lambda_{TW} = \lambda_{SW}/2$. Такой переход был обнаружен в пространственно-распределенной реакции Белоусова–Жаботинского, диспергированной в обращенной микроэмульсии аэрозоля ОТ [16].

1. Диффузионная неустойчивость в трехкомпонентной модели типа «реакция-диффузия»

Системы такого рода уже исследовались ранее. Так в работе [17] исследована диффузионная неустойчивость в трехкомпонентных системах типа реакция-диффузия с матрицей диффузии произвольного вида, при этом в общем виде выяснено, какими свойствами совместно должны обладать матрицы Якоби и диффузии, чтобы устойчивое в точечной системе стационарное состояние стало неустойчивым при наличии диффузии. В случае диагональной матрицы диффузии нам удалось вывести условия возникновения как тьюринговской, так и волновой бифуркаций в виде конкретных неравенств для параметров модели [18].

Рассмотрим систему из трех дифференциальных уравнений следующего вида:

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

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, причем оно устойчиво в отсутствие диффузии. Линеаризуем уравнения (1) около стационарной точки

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

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 $\exp(\lambda t + i\vec{k}\vec{r})$ и подставив в систему (2), найдём дисперсионное уравнение.

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

где

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

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 $\theta_i = a_{jj}a_{kk} - a_{jk}a_{kj}$, $i \neq j \neq k$.

Уравнение (3) – кубическое с действительными коэффициентами. Пусть $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ – его корни. Исследуемое состояние устойчиво, если для всех собственных значений характеристического уравнения $\text{Re } \lambda_i(k^2) < 0$, $i = 1, 2, 3$. Как следует из критерия Рауса–Гурвица [19], однородное состояние системы устойчиво тогда и только тогда, когда

$$\begin{cases} A < 0, \\ B > 0, \\ C < 0, \\ AB - C < 0. \end{cases} \quad (4)$$

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 (4) означает, что в системе произошла бифуркация потери устойчивости однородного состояния. Однако, в силу условия устойчивости однородного состояния в отсутствие диффузии, $A < 0$ при любых k . Второе неравенство в (4) не может быть нарушено, если выполняются все остальные условия. Таким образом, либо нарушается условие $C < 0$, что 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.

1.1. 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 $\beta_T^2 - 3\alpha_T \delta_T > 0$. В противном случае парабола имеет локальные экстремумы, при этом максимум равен

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

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

$$C_{\max}(k_0^2) = \Delta + \frac{1}{27\delta_T^2} [2(\beta_T^2 - 3\alpha_T \delta_T)^{\frac{3}{2}} + \beta_T(2\beta_T^2 - 9\alpha_T \delta_T)] > 0. \quad (5)$$

Неравенство (5) 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.

Было показано [18], что в пределе, когда коэффициент диффузии первой, автокаталитической, переменной значительно меньше двух других, однородное стационарное состояние реакционно-диффузионной системы типа (1) обладает тьюринговской неустойчивостью, если параметры этой системы удовлетворяют условиям

$$a_{11} > 0, \sigma < 0, \Sigma > 0, \Delta < 0, \sigma\Sigma - \Delta < 0, \frac{D_2 D_3}{D_1^2} > \frac{27(-\Delta)}{4a_{11}^3}. \quad (6)$$

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

Как и в предыдущем случае, функция $F(k^2)$ имеет локальные экстремумы, если $\beta_V^2 - 3\alpha_V \delta_V > 0$. Для того, чтобы в системе имела место волновая неустойчивость, необходимо выполнение условия

$$F_{\max}(k_0^2) = \sigma\Sigma - \Delta + \frac{1}{27\delta_V^2} [2(\beta_V^2 - 3\alpha_V \delta_V)^{\frac{3}{2}} + \beta_V(2\beta_V^2 - 9\alpha_V \delta_V)] > 0, \quad (7)$$

где k_0^2 – точка максимума функции $F(k^2)$.

Как и в случае, рассмотренном выше, неравенство (7) 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. В пределе, когда он существенно больше двух других ($D_3 \gg D_1, D_2$), в реакционно-диффузионной системе типа (1) возникнет волновая неустойчивость, если параметры этой системы удовлетворяют условиям

$$(a_{11} + a_{22}) > 0, \sigma < 0, \Sigma > 0, \Delta < 0, \sigma\Sigma - \Delta < 0, \left(\frac{D_1 + D_2}{D_3}\right)^2 < \frac{4}{27} \frac{(a_{11} + a_{22})^3}{(\Delta - \sigma\Sigma)}. \quad (8)$$

2. Структуры в многомерной активной среде, возникающие вблизи волновой бифуркации

Непосредственно вблизи волновой бифуркации, как правило, наблюдается два типа структур: бегущие и стоячие волны [20]. В этом случае эффективным методом изучения таких структур является построение и последующее исследование амплитудных уравнений (см., например, [21, 22]). Однако проблема заключается в том, что в многомерном пространстве имеет место вырождение по направлениям, и вклад в формирование структуры может вносить много (в случае неограниченной области – бесконечно много) неустойчивых мод, имеющих одинаковые по модулю волновые

вектора. Ситуация несколько упрощается, когда рассматриваемая область ограничена, поскольку в этом случае набор критических мод, удовлетворяющих граничным условиям, конечен. Этот случай был исследован нами в работе [23]. Уравнения, описывающие амплитуды N взаимодействующих критических мод, имеют вид

$$\partial_t \tilde{A}_k = \tilde{A}_k - (1 - ic_1) \tilde{A}_k |\tilde{A}_k|^2 - h(1 - ic_2) \tilde{A}_k \cdot \sum_{j=1, j \neq k}^N |\tilde{A}_j|^2, \quad k \in \overline{1, N}. \quad (9)$$

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.

Представим комплексные амплитуды \tilde{A}_k в виде $\tilde{A}_k = A_k e^{i\varphi_k}$, где $A_k = |\tilde{A}_k|$. Подставив их в уравнения (9), получим для модулей амплитуд следующую систему уравнений:

$$\partial_t A_i = A_i - A_i^3 - A_i h \sum_{j=1, j \neq i}^N A_j^2, \quad i \in \overline{1, N}. \quad (10)$$

Эти уравнения включают единственный параметр h . Остальные параметры, присутствующие в уравнениях (9), входят в уравнения для фаз φ_k , которые мы здесь не приводим.

Как было показано в работе [23], помимо тривиального решения, которое, очевидно, неустойчиво, все стационарные точки системы (10) с точностью до перестановки индексов имеют вид

$$A_i^{st} = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{1 + (p-1)h}}, & i \in \overline{1, p}, \\ 0, & i \in \overline{p+1, N}, \end{cases} \quad (11)$$

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

Для каждой из стационарных точек (11) имеется следующий набор собственных чисел:

$$\lambda_i = \begin{cases} -2(1 + (p-1)h), & i = 1 \\ 2(h-1), & i \in \overline{2, p} \\ 1-h, & i \in \overline{p+1, N} \end{cases} \quad (12)$$

Анализ собственных чисел (12) 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 $h \in \left(-\frac{1}{N-1}, 1\right)$, 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 (11) системы (10), 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; при $h \in \left(-\frac{1}{N-1}, 1\right)$ существует единственное решение

$$A_i^{st} = \frac{1}{\sqrt{1 + (N-1)h}}, \quad i \in \overline{1, N}.$$

Итак, в системе (9) 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, $h \in \left(-\frac{1}{N-1}, 1\right)$, моды сосуществуют друг с другом, причем имеют одинаковые амплитуды, что соответствует стоячей волне. Промежуточные режимы в системе (9) вблизи волновой бифуркации невозможны.

Полученные теоретические результаты были проверены на примере модели Гирера–Майнхардта [24], в которую было добавлено третье уравнение, соответствующее второму быстро диффундирующему ингибитору [23]. Выполнен параметрический анализ данной модели и построены амплитудные уравнения вблизи волновой бифуркации. При этом в явном виде была установлена взаимосвязь коэффициента h в уравнениях (9) и параметров исходной модели и, таким образом, определены области существования бегущих и стоячих волн. Для соответствующих значений параметров были проведены численные эксперименты, которые полностью подтвердили теоретические предсказания.

3. О механизме переключения стоячей волны в бегущую, сопровождающегося делением длины волны пополам

Основные пространственно-временные структуры в активных средах, порождаемые волновой бифуркацией, – это стоячие и 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 [25] и в цилиндрической конвекции Рэлея–Бенара [26]. Также переключение наблюдалось в периодически возбуждаемых колебательных системах, например, в конвекции бинарной смеси или в нематических жидких кристаллах [27]. Такой переход был индуцирован в реакции Белоусова–Жаботинского внешним периодическим возмущением [28]. Важно, однако, что во всех приведенных случаях длина волны оставалась неизменной.

В работе [16] 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-20 (в так называемой BZ-AOT/Span системе [14]). На рис. 2 приведены экспериментальные результаты, полученные этими авторами.

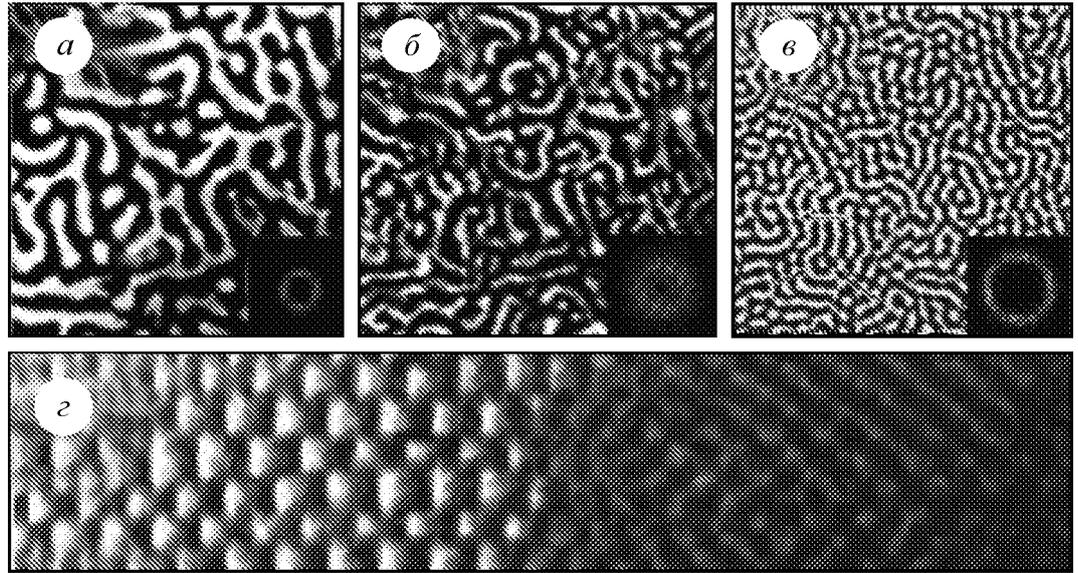


Рис. 2. Снимки стоячих волн (а), переходных структур (б) и бегущих волн (в), обнаруженных в BZ-AOT/Span системе. Пространственно-временной график (г) перехода из режима стоячих волн в режим бегущих, сопровождающийся делением длины волны пополам (из работы [16])

Математическая модель, объясняющая вышеописанный феномен, предложенная нами в работе [29], основана на нескольких предположениях относительно процессов, происходящих в одномерной активной среде, которые перечислены ниже.

1. Стоячая волна есть результат суперкритической волновой бифуркации. Волна описывается 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 $\pm k$ и частоте ω . Как было показано выше, стоячая волна возникает в том случае, когда конкуренция между взаимодействующими модами достаточно мала.

2. Допустим, что в той же системе волна $u_2(r, t) = \tilde{B}_1 e^{i(\omega_2 t + 2kr)} + \tilde{B}_2 e^{i(\omega_2 t - 2kr)}$ с удвоенным по сравнению со стоячей волной волновым числом $2k$ и частотой ω_2 устойчива, но может быть возбуждена жестким образом вследствие субкритической волновой бифуркации. При этом конкуренция между модами достаточно велика.

3. Наконец, 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: $\omega_2 = 2\omega$.

Амплитудные уравнения для модулей амплитуд A_i и B_i , где $A_i = |\tilde{A}_i|$, $B_i = |\tilde{B}_i|$, $i = 1, 2$, имеют вид [29]

$$\begin{cases} \partial_t A_1 = A_1 - A_1^3 - h_1 A_1 A_2^2 - \delta_1 (B_1^2 + B_2^2) A_1, \\ \partial_t A_2 = A_2 - A_2^3 - h_1 A_2 A_1^2 - \delta_1 (B_1^2 + B_2^2) A_2, \\ \partial_t B_1 = -\alpha B_1 + B_1^3 - \beta B_1^5 - h_2 B_1 B_2^2 - \delta_2 (A_1^2 + A_2^2) B_1 + \sigma \cos \psi_1(t) A_1^2, \\ \partial_t B_2 = -\alpha B_2 + B_2^3 - \beta B_2^5 - h_2 B_2 B_1^2 - \delta_2 (A_1^2 + A_2^2) B_2 + \sigma \cos \psi_2(t) A_2^2. \end{cases} \quad (13)$$

Во второй паре уравнений системы (13) последние слагаемые в правой части обусловлены резонансом; ψ_i – разность фаз комплексных амплитуд \tilde{A}_i и \tilde{B}_i , медленно меняющаяся со временем; h_i и δ_i – силы связи соответствующих взаимодействующих мод, $i = 1, 2$.

Покажем теперь, основываясь на уравнениях (13), 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, что приведет к переключению в возбужденное состояние. В силу достаточно сильной конкуренции эта мода подавит три остальные, что будет означать переход системы в состояние бегущей волны с половинной длиной.

С учетом полученных оценок было найдено численное решение системы (13). В начальный момент времени амплитуды имели нулевые значения и возмущались случайным шумом. На рис. 3 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: $u(r, t) = A_1 e^{i(\omega t + kr)} + A_2 e^{i(\omega t - kr)} + B_1 e^{i(\omega_2 t + 2kr)} + B_2 e^{i(\omega_2 t - 2kr)}$. На рис. 4 представлен пространственно-временной график поля результирующей волны u с учетом полученной выше зависимости амплитуд от времени, который качественно аналогичен экспериментальному (см. рис. 2, ε).

Следует сделать два замечания. К сожалению, нам не удалось найти пример 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 пока не решена. Условие резонанса с позиции теории динамических систем делает ситу-

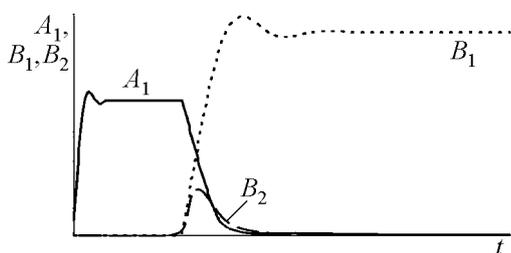


Рис. 3. Временная эволюция амплитуд A_1 , B_1 и B_2 для случая перехода «стоячая волна λ_{SW} – бегущая волна $\lambda_{TW} = \lambda_{SW}/2$ »

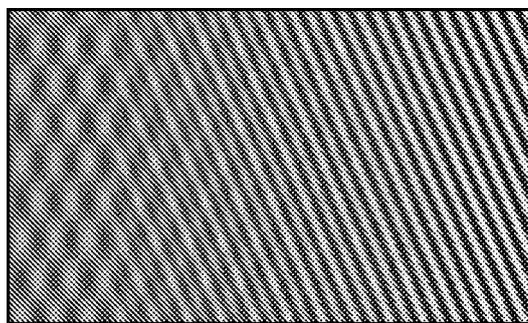


Рис. 4. Пространственно-временной график $u(r, t)$ перехода «стоячая волна λ_{SW} – бегущая волна $\lambda_{TW} = \lambda_{SW}/2$ »

ацию негрубой. Однако, на наш взгляд, это не является в данном случае проблемой: в реальной химической системе происходит непрерывный дрейф параметров, при этом резонанс может в какой-то момент наступить, что и приведет к наблюдаемому переключению между режимами.

Заключение

В данной работе приведены результаты исследования моделей типа «реакция-диффузия», обладающих диффузионной неустойчивостью, и возникающих в таких системах пространственно-временных структур. В частности, в общем виде получены условия как тьюринговской, так и волновой неустойчивостей в системах из трёх уравнений рассматриваемого типа с диагональной матрицей диффузии. 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 [30].

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.

Выявлены структуры, которые могут возникнуть в многомерной активной среде в результате волновой бифуркации. Для этого вблизи границы волновой неустойчивости построены амплитудные уравнения для N взаимодействующих между собой мод, удовлетворяющих граничным условиям. Показано, что в результате такого взаимодействия в зависимости от силы межмодовой конкуренции 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.

Наконец, обсужден возможный механизм перехода из режима стоячих волн с длиной волны λ_{SW} в режим бегущих волн с половинной длиной волны:

$\lambda_{TW} = \lambda_{SW}/2$. Такой переход был обнаружен экспериментально в пространственно-распределенной реакции Белоусова–Жаботинского, диспергированной в обращенной микроэмульсии аэрозоля. Задача решалась в пространственно одномерном случае с использованием аппарата амплитудных уравнений типа Гинзбурга–Ландау. Продемонстрировано, что переход возможен при выполнении нескольких условий, важнейшим из которых является резонанс между модами, соответствующими стоячей и бегущей волнам, заключающийся в том, что у волны с удвоенным волновым числом частота также в два раза больше.

Приведены условия на силы связи между взаимодействующими модами, при выполнении которых в модели реализуется сценарий перехода от стоячей к бегущей волне половинного периода, наблюдаемого в эксперименте. Результат теоретического анализа подтверждается численным моделированием.

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ: грант 14-01-00196.

Библиографический список

1. *Николис Г., Пригожин И.* Самоорганизация в неравновесных системах. М.: Мир, 1979. 512 с.
2. *Пригожин И.* От существующего к возникающему. М.: Наука, 1985. 327 с.
3. *Хакен Г.* Синергетика. М.: Мир, 1980. 406 с.
4. *Zhabotinsky A.M.* A history of chemical oscillations and waves// *Chaos*. 1991. Vol. 1. P. 379.
5. *Fields R.J., Burger M.* Oscillations and travelling waves in chemical systems. New York: Wiley, 1985. 681 p.
6. *Kapral R., Showalter K.* Chemical waves and patterns. Dordrecht: Kluwer, 1995. 524 p.
7. *Castets V., Dulos E., Boissonade J., Kepper P.D.* Experimental evidence of a sustained standing Turing-type nonequilibrium chemical pattern// *Phys. Rev. Lett.* 1990. Vol. 64. P. 2953.
8. *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. Vol. 87. 228301.
9. *Gong Y., Christini D.J.* Antispiral waves in reaction-diffusion systems // *Phys. Rev. Lett.* 2003. Vol. 90. 088302.
10. *Vanag V.K., Epstein I.R.* Packet waves in a reaction-diffusion system // *Phys. Rev. Lett.* 2002. Vol. 88. 088303.
11. *Vanag V.K., Epstein I.R.* Dash waves in a reaction-diffusion system // *Phys. Rev. Lett.* 2003. Vol. 90. 098301.
12. *Yang L., Berenstein I., Epstein I.R.* Segmented waves from a spatiotemporal transverse wave instability // *Phys. Rev. Lett.* 2005. Vol. 95. 038303.
13. *Vanag V.K., Epstein I.R.* Resonance-induced oscillons in a reaction-diffusion system // *Phys. Rev. E.* 2006. Vol. 73. 016201.

14. Ванэг В.К. Волны и динамические структуры в реакционно-диффузионных системах. Реакция Белоусова–Жаботинского в обращенной микроэмульсии // УФН. 2004. Т. 174, № 9. С. 991.
15. Turing A.M. The chemical basis of morphogenesis // Philos. Trans. R. Soc. Lond. B. Biol. Sci. 1952. Vol. 237. P. 37.
16. Kaminaga A., Vanag V., Epstein I. Wavelength halving in a transition between standing waves and traveling waves // Phys. Rev. Lett. 2005. Vol. 95. P. 058302.
17. Еленин Е.Г., Куркина Е.С. Диффузионная неустойчивость в трехкомпонентных системах типа «реакция-диффузия». Реакция (NO+CO)/Pt(100) // Изв. вуз. Математическое моделирование. 1994. Т. 6, № 8. С. 17.
18. Борина М.Ю., Полежаев А.А. Диффузионная неустойчивость в трехкомпонентной модели типа «реакция-диффузия» // Компьютерные исследования и моделирование. 2011. Т. 3, № 2. С. 135.
19. Гантмахер Ф.Р. Теория матриц. М.: Наука, 1967. 576 с.
20. 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. Vol. 55. P. 223.
21. Kuramoto Y. Chemical Oscillations, Waves, and Turbulence. Springer-Verlag, Berlin, 1984. 156 p.
22. Nicolis G. Introduction to nonlinear science. Cambridge University Press, 1995. 254 p.
23. Борина М.Ю., Полежаев А.А. Пространственно-временные структуры в многомерной активной среде, обусловленные многомодовым взаимодействием вблизи волновой бифуркации // Изв. вуз. Прикладная нелинейная динамика. 2012. Т. 20, № 6. С. 15.
24. Gierer A., Meinhardt H. A theory of biological pattern formation // Kibernetik. 1972. Vol. 12. P. 30.
25. Deane A.E., Knobloch E., Toomre J. Traveling waves and chaos in thermosolutal convection // Phys. Rev. E. 1987. Vol. 36. P. 2862.
26. Boronska K., Tuckerman L.S. Standing and travelling waves in cylindrical Rayleigh–Benard convection // J. Fluid Mech. 2006. Vol. 559. P. 279.
27. Rehberg I., Rasenat S., Fineberg J., de la Torre Juarez M., Steinberg V. Temporal modulation of traveling waves // Phys. Rev. Lett. 1988. Vol. 61. P. 2449.
28. Marts B., Lin A.L. Transition from traveling to standing waves in the 4:1 resonant Belousov–Zhabotinsky reaction // Phys. Rev. Lett. E. 2008. Vol. 77. P. 026211.
29. Борина М.Ю., Полежаев А.А. О механизме переключения стоячей волны в бегущую, сопровождающегося делением длины волны пополам // Компьютерные исследования и моделирование. 2012. Т. 4, № 4. С. 673.
30. Романовский Ю.М., Степанова Н.В., Чернавский Д.С. Математическая биофизика. М.: Наука, 1984. 304 с.

Поступила в редакцию 8.05.2014

SPATIAL-TEMPORAL PATTERNS IN ACTIVE MEDIUM CAUSED BY DIFFUSION INSTABILITY

A. A. Polezhaev and M. Yu. Borina

P.N. Lebedev Physical Institute of the Russian Academy of Sciences

The results of investigation of reaction-diffusion type models demonstrating diffusion instability are presented. In particular, in general case the condition for both Turing and wave instabilities are obtained for three equations of this type with the diagonal diffusion matrix. Qualitative properties of the system, in which bifurcations of each of the two types can take place, are clarified. Investigation of a set of amplitude equations, describing interaction of several modes which became unstable due to the wave bifurcation, is carried out. It is shown that as a result of competition between modes depending on the value of the parameter defining the strength of interaction only two regimes are possible: either quasi one-dimensional travelling waves (there exists only one nonzero mode) or standing waves (all the modes are nonzero). A possible mechanism for the transition from standing waves to traveling waves with a half wavelength, observed in the Belousov–Zhabotinsky reaction dispersed in a water-in-oil aerosol microemulsion, is considered.

Keywords: Active medium, diffusion instability, wave bifurcation, amplitude equations.



Полезжаев Андрей Александрович – родился в Москве (1953). Окончил Московский физико-технический институт (1976). Защитил диссертацию на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук (МФТИ, 1979) и доктора физико-математических наук (МГУ, 1994) в области теории нелинейных динамических систем, моделирования процессов пространственно-временной самоорганизации в системах различной природы, математической биофизики. С 1979 года работает в ФИАНе, в настоящее время – заведующим сектором теоретических проблем биофизики. Опубликовал более 100 научных статей по направлениям, указанным выше. Заместитель главного редактора журнала «Компьютерные исследования и моделирование».

119991 Москва, Ленинградский пр-т, 53
Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН
E-mail: apol@lpi.ru



Борина Мария Юрьевна – родилась в 1987 году в Кемерово, окончила Московский инженерно-физический институт (2010). Защитила диссертацию на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук (2013). В настоящее время – младший научный сотрудник ФИАН. Имеет пять публикаций в реферируемых научных журналах.

119991 Москва, Ленинградский пр-т, 53
Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН
E-mail: mariazhur@mail.ru