

УДК: 519.8

## Диффузионная неустойчивость в трехкомпонентной модели типа «реакция–диффузия»

М. Ю. Борина<sup>а</sup>, А. А. Полежаев<sup>б</sup>

Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН,  
119991, г. Москва, Ленинский проспект, 53

E-mail: <sup>а</sup> mariazhur@mail.ru, <sup>б</sup> apol@lpi.ru

Получено 17 мая 2011

В данной работе 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 численных экспериментах показано, что при выполнении соответствующих условий в нелинейной модели возникают структуры, которые предсказываются линейным анализом.

Ключевые слова: диффузионная неустойчивость, бифуркация Тьюринга, волновая бифуркация

### Diffusion instability in a threevariable reaction–diffusion model

M. U. Borina, A. A. Polezhaev

*P. N. Lebedev Physical Institute of the Russian Academy of Sciences, Leninskiy prospekt, 53, Moscow, 119991, Russia*

**Abstract.** — Investigation of occurrence of diffusion instability in a set of three reaction–diffusion equations is carried out. In the general case the condition for both Turing and wave instabilities are obtained. Qualitative properties of the system, in which the bifurcation of each of the two types can take place, are clarified. In numerical experiments it is shown that if the corresponding conditions are met in the nonlinear model, spatiotemporal patterns are formed, which are predicted by linear analysis.

Keywords: diffusion instability, Turing instability, wave instability

Citation: *Computer Research and Modeling*, 2011, vol. 3, no. 2, pp. 135–146 (Russian).

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ (проект № 11-01-00392).

## 1. Введение

Неравновесные пространственно-временные структуры возникают в системах различной природы: физических, химических, биологических. Мощным стимулом к их изучению послужило обнаружение автоволн в реакции Белоусова–Жаботинского [Zaikin, Zhabotinsky, 1970]. В течение долгого времени автоволны были основным объектом как экспериментальных, так и теоретических исследований [Fields, Burger, 1985; Kapral, Showalter, 1995; Zhabotinsky, 1991]. Другой тип пространственно-временных структур — стационарные структуры (их еще принято называть диссипативными) — был теоретически обоснован еще Тьюрингом в его последней (предсмертной) работе [Turing, 1952] в 1952 году, но в эксперименте их удалось получить значительно позже [Castets et al., 1990]. Автоволны и диссипативные структуры являются наиболее известными и изученными примерами пространственно-временных структур в распределенных нелинейных неравновесных системах. Однако, как стало совершенно очевидно в последнее время, разнообразие структур, которые могут возникать в системах такого рода, значительно больше. Это было, в частности, продемонстрировано в цикле работ В. Ванага с сотрудниками [Vanag, Epstein, 2002; Vanag, Epstein, 2003; Cherkashin et al., 2008], в которых экспериментально исследованы структуры в реакции Белоусова–Жаботинского, протекающей в микроэмульсии (в нанокapельках). Эта система оказалась весьма богатой на различные структуры. В частности, в ней удалось наблюдать такие новые типы волн как антиспирали, волновые пакеты, стоячие волны, штрихволны, сегментированные спирали, а также колеблющиеся кластеры и локализованные колеблющиеся пятна — осциллоны (см. обзор [Ванаг, 2004] и ссылки в нем). К настоящему времени эти структуры экспериментально изучены достаточно досконально, кроме того, многие из них были воспроизведены в численных расчетах на примерах конкретных моделей [Vanag, Epstein, 2002; Vanag, Epstein, 2003; Cherkashin et al., 2008; Muratov, Osipov, 2001; Zykov et al., 1998; Yang et al., 2005]. Однако систематической теории, которая объяснила бы эти структуры и выявила условия их возникновения, до сих пор не создано. В работе Тьюринга [Turing, 1952] были получены условия возникновения стационарных диссипативных структур на примере модели типа «реакция–диффузия», содержащей два уравнения. Было показано, что в системе должен присутствовать автокатализ, а коэффициенты диффузии компонентов должны быть различными (точнее, автокаталитическая переменная должна иметь меньший коэффициент диффузии). Неустойчивость однородного состояния в системе, которая приводит к формированию диссипативной структуры, носит название тьюринговской неустойчивости и относится к диффузионным неустойчивостям. В данном случае в соответствующей линеаризованной системе одно из собственных чисел становится положительным в некотором диапазоне волновых чисел, оставаясь действительным. 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. Именно волновая неустойчивость ответственна за образование некоторых наблюдаемых в эксперименте структур, например, стоячих волн и волновых пакетов. Как хорошо известно, 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.

Основной целью данной работы является выведение в конечном виде условий возникновения неустойчивости в системе из трех уравнений типа «реакция–диффузия» для частного случая диагональной матрицы диффузии. В частности, мы 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 статьи приведены результаты численного счета для этой модели для наборов параметров, соответствующих различным областям параметрического пространства, при этом продемонстрировано, что при выполнении соответствующих условий в системе действительно возникают структуры, которые согласуются с предсказаниями линейного анализа и которые сходны тем, что наблюдаются в эксперименте [Ванаг, 2004].

## 2. Линейный анализ модели

Рассмотрим систему из трех дифференциальных уравнений следующего вида:

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

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 (1)), причем оно устойчиво в отсутствие диффузии. Найдем условия, при которых диффузия приводит к нарушению однородного состояния. Линеаризуем уравнения (1) около стационарной точки  $(u^0, v^0, w^0)$ :

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

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  $\exp(ikr + \lambda t)$  и подставив в систему (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

$$\lambda^3 - A\lambda^2 + B\lambda - C = 0, \tag{3}$$

где

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

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. Как легко проверить, коэффициенты кубического уравнения и его корни связаны соотношениями

$$\begin{aligned} A &= \lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3, \\ B &= \lambda_1\lambda_2 + \lambda_1\lambda_3 + \lambda_2\lambda_3, \\ C &= \lambda_1\lambda_2\lambda_3, \\ AB - C &= (\lambda_1 + \lambda_2)(\lambda_1 + \lambda_3)(\lambda_2 + \lambda_3). \end{aligned} \quad (4)$$

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

$$\begin{cases} A < 0, \\ B > 0, \\ C < 0, \\ AB - C < 0. \end{cases} \quad (5)$$

Поскольку в отсутствие диффузии ( $k^2 = 0$ ) однородное стационарное состояние системы по предположению устойчиво, то неравенства (5) принимают вид

$$\begin{cases} \sigma < 0, \\ \Sigma > 0, \\ \Delta < 0, \\ \sigma\Sigma - \Delta < 0. \end{cases} \quad (6)$$

Определим те значения параметров, при которых однородное состояние системы становится неустойчивым, то есть существуют такие  $k \neq 0$ , что хотя бы для одного  $\lambda_i(k^2)$  ( $i = 1, 2, 3$ ),  $Re\lambda_i(k^2) > 0$ . Нарушение любого из неравенств (5) означает, что в системе произошла бифуркация потери устойчивости однородного состояния. Однако, в силу условий (6),  $A < 0$  при любых  $k$ . Второе неравенство в (5) не может быть нарушено, если выполняются все остальные условия. Таким образом, либо нарушается условие  $C < 0$ , что в силу соотношений (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.

## 2.1. 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

$$C_{\max}(k_0^2) = \Delta + \frac{1}{27\delta_T^2} [2(\beta_T^2 - 3\alpha_T\delta_T)^{\frac{3}{2}} + \beta_T(2\beta_T^2 - 9\alpha_T\delta_T)] > 0, \quad (7)$$

при этом одновременно должны выполняться неравенства (6).

Неравенство (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 (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 (1) неустойчиво по Тьюрингу, если параметры этой системы удовлетворяют условиям

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

## 2.2. 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

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

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

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

Таким образом, для того чтобы в системе имела место волновая неустойчивость, наряду с выполнением неравенств (6) необходимо выполнение условия

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

Как и в случае, рассмотренном выше, неравенство (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 (9) можно представить в более простом приближенном виде. Пусть для определенности ( $a_{11} + a_{22} > 0$ ) и  $D_1 \gg D_2, D_3$ . Положим  $D_1 = D$ ,  $D_2 = \epsilon q D$ ,  $D_3 = \epsilon D$ , где  $\epsilon$  — мало, а  $q$  порядка единицы. Тогда

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

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

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

Таким образом, в предположении большого коэффициента диффузии третьей переменной ( $D_3 \gg D_1, D_2$ ), в реакционно-диффузионной системе типа (1) возникнет волновая неустойчивость, если параметры этой системы удовлетворяют условиям

$$(a_{11} + a_{22}) > 0, \quad \sigma < 0, \quad \Sigma > 0, \quad \Delta < 0, \quad \sigma\Sigma - \Delta < 0, \quad \left( \frac{D_1 + D_2}{D_3} \right)^2 < \frac{4}{27} \frac{(a_{11} + a_{22})^3}{(\Delta - \sigma\Sigma)}. \quad (10)$$

### 3. Численные эксперименты

#### 3.1. Математическая модель

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

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= \mu(a - (1 + b)u + u^2v - cu + dw) + D_1\nabla^2u, \\ \frac{\partial v}{\partial t} &= bu - u^2v + D_2\nabla^2v, \\ \frac{\partial w}{\partial t} &= cu - dw + D_3\nabla^2w. \end{aligned} \quad (11)$$

Стационарная точка системы (11) имеет координаты  $(a, b/a, ac/d)$ . С учетом этого находим матрицу коэффициентов линеаризованной модели (11):  $A = \begin{pmatrix} \mu(b - c - 1) & \mu a^2 & \mu d \\ -b & -a^2 & 0 \\ d & 0 & -c \end{pmatrix}$

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

### 3.2. 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 (6). Используя точные условия бифуркаций (7) и (9), выделим области в плоскости параметров  $d, D_2$ , отвечающие неустойчивостям Тьюринга ( $\Omega_1$ ) и волновой ( $\Omega_2$ ) (рис. 1). Область их пересечения ( $\Omega_1 \cap \Omega_2$ ) соответствует наличию обеих неустойчивостей. В области  $\Omega_0$  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).

Дисперсионные кривые на рис. 2(б) получены в системе, параметры которой одновременно удовлетворяют условиям возникновения как неустойчивости Тьюринга (7) так и волновой неустойчивости (9). Бифуркации при этом будут происходить в различных непересекающихся диапазонах волновых чисел, причем  $k_T > k_W$  (здесь  $k_T, k_W$  — волновые числа, соответствующие максимуму в случае тьюринговской и волновой неустойчивостей соответственно).

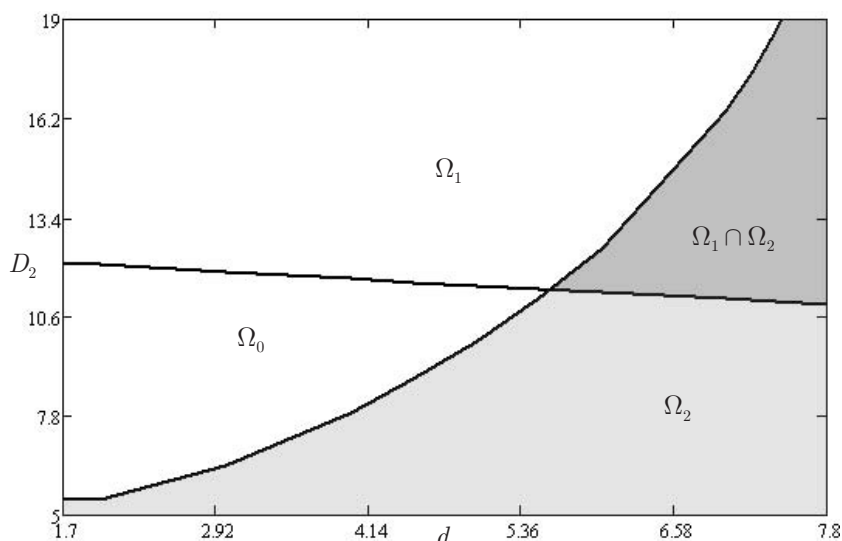


Рис. 1. Плоскость параметров  $d, D_2$  модели (11). Области  $\Omega_1$  (неустойчивость Тьюринга),  $\Omega_2$  (волновая неустойчивость),  $\Omega_1 \cap \Omega_2$  (волновая и тьюринговская неустойчивости одновременно),  $\Omega_0$  (устойчивое состояние). Параметры модели:  $\mu = 10$ ,  $a = 3$ ,  $b = 4$ ,  $c = 2$ ,  $D_1 = 1$ ,  $D_3 = 50$

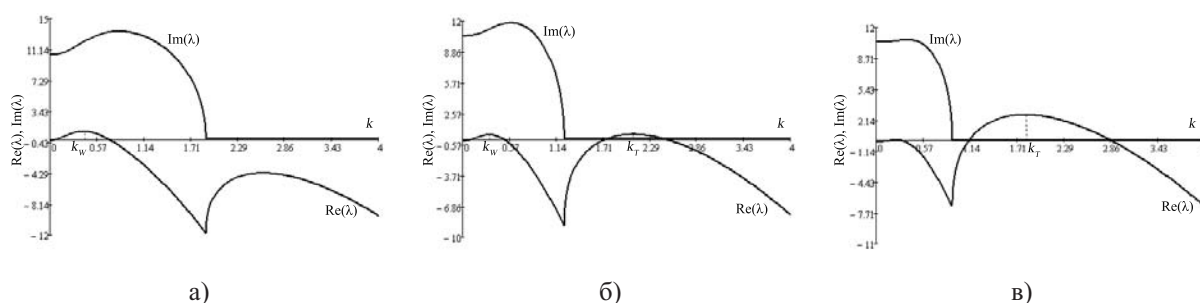


Рис. 2. Действительная и мнимая части критического корня линеаризованной модели (11): (а) волновая неустойчивость, (б) волновая и тьюринговская неустойчивости одновременно, (в) неустойчивость Тьюринга. Параметры модели:  $\mu = 10$ ,  $a = 3$ ,  $b = 4$ ,  $c = 2$ ,  $d = 7.5$ ,  $D_1 = 1$ ,  $D_2 = 6$  (а), 12 (б), 19 (в),  $D_3 = 50$

### 3.3. Схема численного эксперимента

Численное исследование системы (11) производилось в области  $0 \leq x \leq L$ ,  $0 \leq y \leq L$  методом переменных направлений [Федоренко, 1994]. В начальный момент времени система находится в однородном стационарном состоянии (со значениями  $u^0 = a$ ,  $v^0 = b/a$ ,  $w^0 = ac/d$ ).

Рассмотрим пару шагов:  $u^n$  известно. Вычисляем сначала  $u^{n+1}$ , а затем  $u^{n+2}$ .

1. Первый шаг:  $u^n \rightarrow u^{n+1}$ . Используем схему

$$\frac{u_{k,m}^{n+1} - u_{k,m}^n}{dt} = D_1 \left[ \left( \frac{\partial^2 u}{\partial^2 x} \right)_{k,m}^{n+1} + \left( \frac{\partial^2 u}{\partial^2 y} \right)_{k,m}^n \right], \quad (12)$$

где

$$\begin{aligned} \left( \frac{\partial^2 u}{\partial^2 x} \right)_{k,m}^{n+1} &= \frac{D_1}{2dx^2} [(u_{k-1,m}^{n+1} - 2u_{k,m}^{n+1} + u_{k+1,m}^{n+1}) + (u_{k-1,m}^n - 2u_{k,m}^n + u_{k+1,m}^n)], \\ \left( \frac{\partial^2 u}{\partial^2 y} \right)_{k,m}^n &= \frac{D_1}{dy^2} [(u_{k,m-1}^n - 2u_{k,m}^n + u_{k,m+1}^n)]. \end{aligned}$$

Здесь производная по  $x$  аппроксимируется на верхнем слое, а производная по  $y$  — на нижнем. Перепишем (12) в виде

$$-u_{k-1,m}^{n+1} + u_{k,m}^{n+1}(2 + c_u) - u_{k+1,m}^{n+1} = c_u u_{k,m}^n + (u_{k-1,m}^n - 2u_{k,m}^n + u_{k+1,m}^n) + 2(u_{k,m-1}^n - 2u_{k,m}^n + u_{k,m+1}^n),$$

где  $c_u = \frac{2dr^2}{D_1 dt}$  (считаем, что  $dx = dy = dr$ ).

Решая последние уравнения методом прогонки [Лобанов, Петров, 2006], найдём значение  $u^{n+1}$ .

2. Второй шаг:  $u^{n+1} \rightarrow u^{n+2}$ . Он осуществляется по аналогичной схеме, но с переменной ролей  $x$  и  $y$ :

$$\frac{u_{k,m}^{n+2} - u_{k,m}^{n+1}}{dt} = D_1 \left[ \left( \frac{\partial^2 u}{\partial^2 x} \right)_{k,m}^{n+1} + \left( \frac{\partial^2 u}{\partial^2 y} \right)_{k,m}^{n+2} \right] + f_{k,m}^n,$$

где

$$\begin{aligned} \left( \frac{\partial^2 u}{\partial^2 x} \right)_{k,m}^{n+1} &= \frac{D_1}{dx^2} [(u_{k-1,m}^{n+1} - 2u_{k,m}^{n+1} + u_{k+1,m}^{n+1})], \\ \left( \frac{\partial^2 u}{\partial^2 y} \right)_{k,m}^{n+2} &= \frac{D_1}{2dy^2} [(u_{k,m-1}^{n+2} - 2u_{k,m}^{n+2} + u_{k,m+1}^{n+2}) + (u_{k,m-1}^{n+1} - 2u_{k,m}^{n+1} + u_{k,m+1}^{n+1})]. \end{aligned}$$

Разностные уравнения для определения  $v$  и  $w$  аналогичны приведенным выше.

### 3.4. Результаты численных экспериментов

Рассмотрим случай, когда реализуются обе бифуркации (дисперсионные кривые (б) на рис. 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. 3. Система возбуждалась случайным пространственным шумом. 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. 4. Система возбуждалась случайным пространственным шумом. В качестве граничных условий были выбраны нулевые потоки.

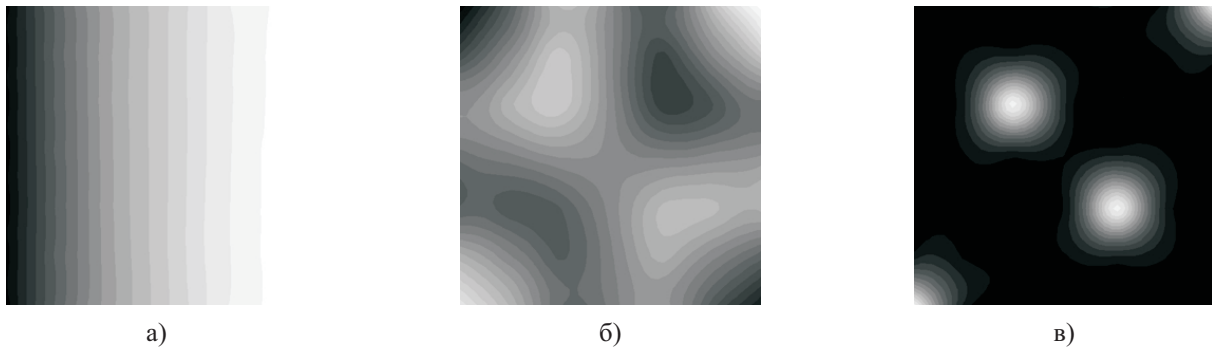


Рис. 3. Структуры Тьюринга в модели (11) в моменты времени: а)  $t = 3$ , б)  $t = 100$ , в)  $t = 280$ . В качестве граничных условий выбраны нулевые потоки. Параметры модели:  $\mu = 10$ ,  $a = 3$ ,  $b = 4$ ,  $c = 2$ ,  $d = 7.5$ ,  $D_1 = 1$ ,  $D_2 = 9$ ,  $D_3 = 50$ . Размер области  $6 \times 6$

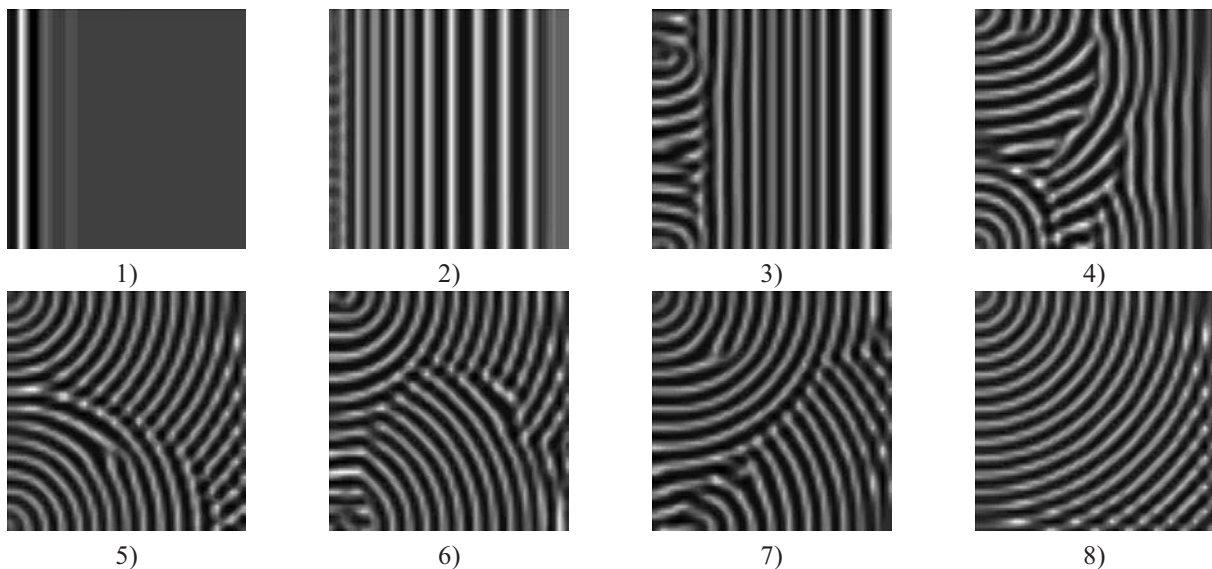


Рис. 4. Бегущие волны в модели (11) в моменты времени: 1)  $t = 30$ , 2)  $t = 160$ , 3)  $t = 280$ , 4)  $t = 480$ , 5)  $t = 1000$ , 6)  $t = 1160$ , 7)  $t = 1315$ , 8)  $t = 1600$ . В качестве граничных условий выбраны нулевые потоки. Параметры модели:  $\mu = 10$ ,  $a = 3$ ,  $b = 4$ ,  $c = 2$ ,  $d = 7.5$ ,  $D_1 = 1$ ,  $D_2 = 9$ ,  $D_3 = 50$ . Размер области  $300 \times 300$

Границы области оказывают достаточно сильное влияние на вид возникающих пространственно-временных структур. Если изменить граничные условия на циклические, в системе также формируются бегущие волны, но иного вида. Это продемонстрировано на рис. 5.

В области параметров, близкой к бифуркационной кривой, в системе с нулевыми потоками на границах реализуются стоячие волны, как показано на рис. 6. В системе с циклическими граничными условиями структуры такого рода не формируются. Это подтверждает рис. 7, который демонстрирует, как небольшое локальное возмущение порождает бегущие волны.

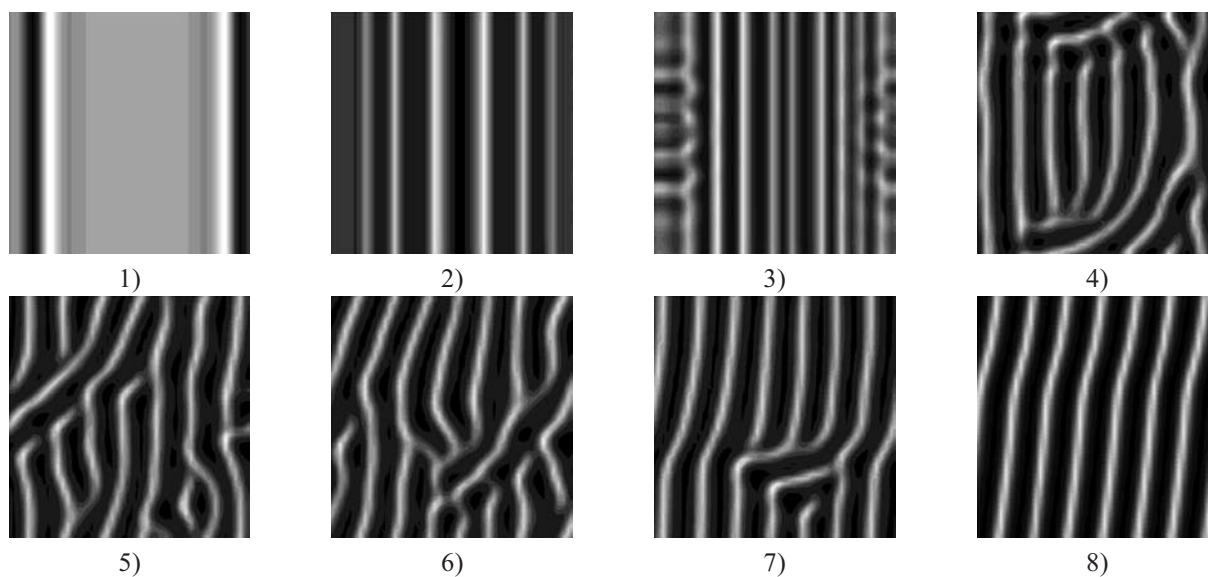


Рис. 5. Бегущие волны в модели (11) в моменты времени: 1)  $t = 2$ , 2)  $t = 5$ , 3)  $t = 10$ , 4)  $t = 20$ , 5)  $t = 25$ , 6)  $t = 40$ , 7)  $t = 100$ , 8)  $t = 150$ . Циклические граничные условия. Параметры модели:  $\mu = 10$ ,  $a = 3$ ,  $b = 4$ ,  $c = 2$ ,  $d = 7.5$ ,  $D_1 = 1$ ,  $D_2 = 9$ ,  $D_3 = 50$ . Размер области  $300 \times 300$

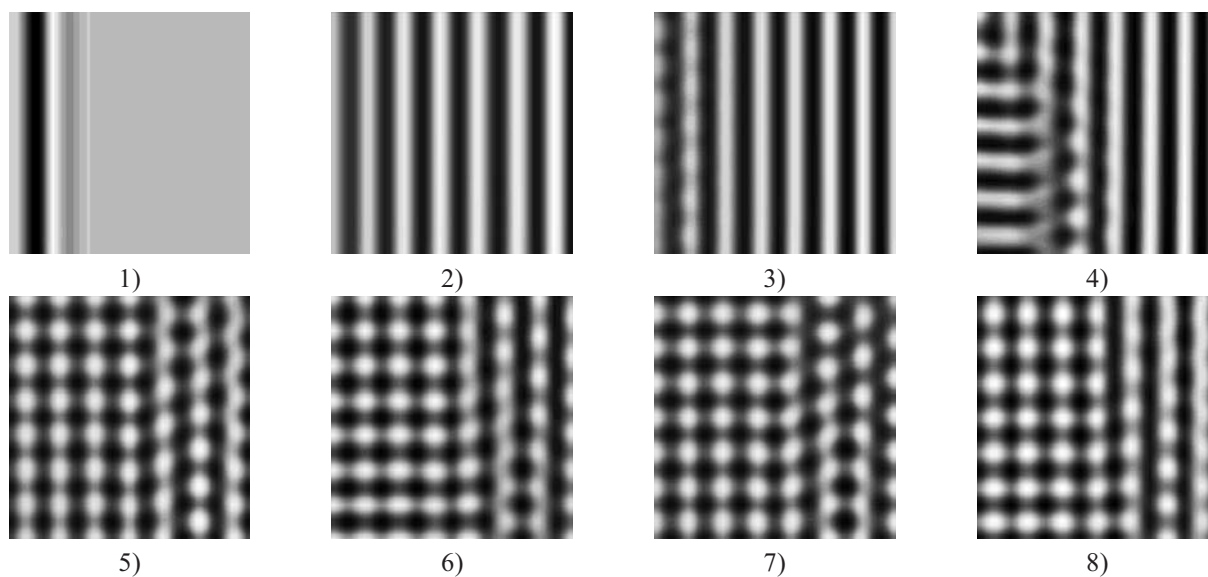


Рис. 6. Стоячие волны в модели (11) в моменты времени: 1)  $t = 2.5$ , 2)  $t = 25$ , 3)  $t = 50$ , 4)  $t = 64$ , 5)  $t = 116.5$ , 6)  $t = 116.6$ , 7)  $t = 116.65$ , 8)  $t = 116.75$ . В качестве граничных условий выбраны нулевые потоки. Параметры модели:  $\mu = 10$ ,  $a = 3$ ,  $b = 4$ ,  $c = 2$ ,  $d = 5.5$ ,  $D_1 = 1$ ,  $D_2 = 11$ ,  $D_3 = 50$ . Размер области  $150 \times 150$

#### 4. Обсуждение

В данной работе приведены результаты исследования 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

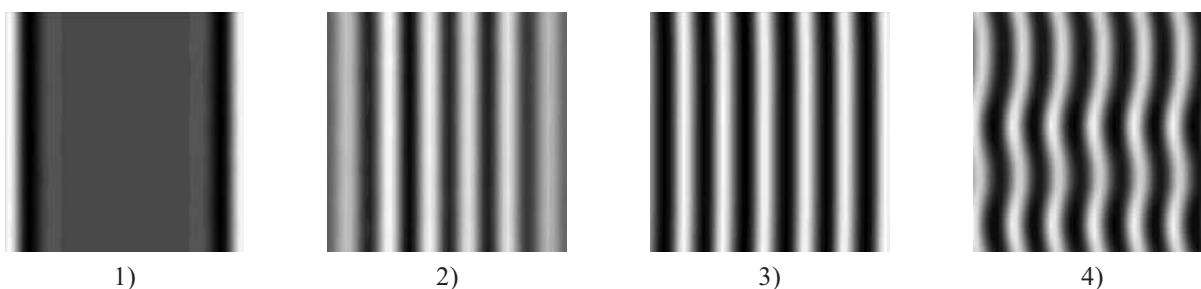


Рис. 7. Бегущие волны в модели (11) в моменты времени: 1)  $t = 2$ , 2)  $t = 15$ , 3)  $t = 100$ , 4)  $t = 450$ . Циклические граничные условия. Параметры модели:  $\mu = 10$ ,  $a = 3$ ,  $b = 4$ ,  $c = 2$ ,  $d = 5.5$ ,  $D_1 = 1$ ,  $D_2 = 11$ ,  $D_3 = 50$ . Размер области  $150 \times 150$

другими. Эти условия совпадают с таковыми для двухкомпонентной реакционно-диффузионной модели [Романовский и др., 1984].

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 как от граничных условий, так и от свойств модели, которые не могут быть выявлены линейным анализом. Для того чтобы понять, какой именно тип структур возникает в результате волновой бифуркации, необходим нелинейный анализ, и это будет предметом наших дальнейших исследований.

## Список литературы

- 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.
- Cherkashin A.A., Vanag V.K., Epstein I.R.* Discontinuously propagating waves in the bathoferroin-catalyzed Belousov-Zhabotinsky reaction incorporated into a microemulsion // *The Journal of Chemical Physics.* 2008. — V. 128. 204508 [6pages].
- Fields R.J., Burger M.* Oscillations and travelling waves in chemical systems. — New York: Wiley, 1985. — 681 p.
- Kapral R., Showalter K.* Chemical waves and patterns. — Dordrecht: Kluwer, 1995. — 524 p.

- Muratov A. M., Osipov V. V.* Spike autosolitons and pattern formation scenarios in the two-dimensional Scott mode // *Eur. Phys. J. B.* 2001. — V. 22. P. 213–221.
- Turing A. M.* The chemical basis of morphogenesis // *Philos. Trans. R. Soc. Lond. B. Biol. Sci.* 1952. — V. 237. P. 37–72.
- Vanag V. K., Epstein I. R.* Packet waves in a reaction-diffusion system // *Phys. Rev. Lett.* 2002. — V. 88. 088303 [4pages].
- Vanag V. K., Epstein I. R.* Dash waves in a reaction-diffusion system // *Phys. Rev. Lett.* 2003. — V. 90. 098301 [4pages].
- Yang L., Berenstein I., Berenstein I. R.* Segmented waves from a spatiotemporal transverse wave instability // *Phys. Rev. Lett.* 2005. — V. 95. 038303 [4 pages].
- Zaikin A. N., Zhabotinsky A. M.* Concentration wave propagation in two-dimensional liquid-phase self-oscillating system // *Nature.* 1970. — V. 225. P. 535–537.
- Zhabotinsky A. M.* A history of chemical oscillations and waves // *Chaos.* 1991. — V. 1. P. 379–386.
- Zykov V. S., Mikhailov A. S., Müller S. C.* Wave instabilities in excitable media with fast inhibitor // *Phys. Rev. Lett.* 1998. — V. 81. P. 2811–2814.
- Ванаг В. К.* Волны и динамические структуры в реакционно-диффузионных системах. Реакция Белоусова–Жаботинского в обращенной микроэмульсии // *УФН*, 2004. — Т. 174. № 9. С. 991–1010.
- 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.
- Лобанов А. И., Петров И. Б.* Лекции по вычислительной математике. — М.: Бином, 2006. — С. 253–257.
- Романовский Ю. М., Степанова Н. В., Чернавский Д. С.* Математическая биофизика. — М.: Наука, 1984. — 304 с.
- Федоренко Р. П.* Введение в вычислительную физику. — М.: Изд-во МФТИ, 1994. — С. 133–137.