КОМПЬЮТЕРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ И МОДЕЛИРОВАНИЕ 2015 Т. 7 № 6 С. 1177–1184



ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ И ОСНОВЫ ИХ РЕАЛИЗАЦИИ

УДК: 519.8

Механизм образования осциллонов — уединенных колебательных структур

М. Б. Кузнецов^а, А. А. Полежаев^b

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

E-mail: ^a kuznetsovmb@mail.ru, ^b apol@lpi.ru

Получено 15 июля 2015 г., после доработки 12 декабря 2015 г.

Предложен формальный модельный механизм формирования осциллонов, которые были обнаружены во множестве физических систем, а также в химической реакции Белоусова—Жаботинского, протекающей в обращенной масляной микроэмульсии аэрозоля ОТ. В предложенном механизме возникновение осциллонов происходит в результате взаимодействия двух подсистем. В первой подсистеме при подходящем наборе параметров в результате жесткого локального возбуждения возможно образование уединенных стационарных структур, которые определяют пространственное распределение параметра второй подсистемы, изменение которого вызывают в ней локальные осцилляции.

Ключевые слова: нелинейные динамические системы, осциллон, уединенные стационарные структуры

The mechanism of formation of oscillons — localized oscillatory structures M. B. Kuznetsov, A. A. Polezhaev

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

Abstract. — A formal model mechanism of oscillon formation is proposed. These structures were found in a variety of physical systems and a chemical Belousov–Jabotinsky reaction proceeding in an aerosol OT water-in-oil microemulsion. Via the proposed mechanism oscillons occur as a result of interaction of two subsystems. In the first subsystem for a proper set of parameters solitary stationary structures may arise as a result of hard local excitation. These structures influence spatial distribution of the second subsystem parameter that leads to local oscillations in the subsystem.

Keywords: nonlinear dynamic systems, oscillon, localized stationary structures

Citation: Computer Research and Modeling, 2015, vol. 7, no. 6, pp. 1177-1184 (Russian).

Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ №№ 14-01-00196 и 15-02-03236.

Введение

Пространственно-временные структуры, образующиеся в системах, далеких от состояния термодинамического равновесия, широко распространены в природе. Их наиболее простыми и известными примерами являются стационарные диссипативные структуры и автоволны. Внешнее сходство различных по природе стационарных структур, таких как, например, узоры на шкуре зебры и наносы пустынного песка, наводят на мысль, что за их образованием стоят некие общие независимые от физических деталей принципы, систематическому изучению которых положила начало работа А. Тьюринга 1952 года [Turing, 1952]. В изучении автоволновых процессов классическими являются работы 1937 года Р. Фишера [Fisher, 1937] и Колмогорова, Петровского и Пискунова [Колмогоров, Петровский, Пискунов, 1937], в которых рассматриваются простейшие уравнения типа «реакция-диффузия» применительно к задаче распространения в популяции особей гена, дающего его носителям преимущество в борьбе за выживание. На сегодняшний день исследователи сталкиваются с огромным количеством различных пространственновременных структур в системах физической, химической и биологической природы. Ввиду схожести механизмов образования этих структур результаты, полученные при рассмотрении систем одного типа, могут быть адаптированы к другим. В связи с этим широкую известность приобрела протекающая в колебательном режиме химическая реакция Белоусова-Жаботинского. В зависимости от концентрации исходных реагентов и других факторов эта реакция, проведенная в пробирке, демонстрирует большое число различных колебательных режимов, а в реагирующей смеси, размещенной тонким плоским слоем, возникают волны изменения концентрации [Burger, Field, 1985]. При усложнении процессов переноса в системе значительно усложняются и пространственно-временные структуры, возникающие в ней. Пожалуй, наибольшее разнообразие структур демонстрирует так называемая система БЖ-АОТ, в которой средой реакции Белоусова-Жаботинского является обращенная масляная микроэмульсия аэрозоля торговой марки ОТ [Vanag, 2004]. В этой системе реакция протекает в микрокапельках воды, которые окружены молекулами аэрозоля, при этом некоторые из реагентов могут диффундировать через масло, а также все реагенты диффундируют вследствие столкновений капелек воды. В системе БЖ-АОТ были получены новые для химических систем типы волн, такие как штрих-волны, сегментированные спирали, антиспирали и волновые пакеты [Vanag, Epstein, 2008].

Существуют пространственно-временные структуры, которые, в отличие от приведенных выше примеров, не распространяются на весь объем системы. К ним относятся, например, ло-кализованные стационарные структуры, колеблющиеся уединенные структуры — осциллоны, а также уединенные волны — солитоны. Первые два типа структур также были обнаружены в системе БЖ-АОТ. Уединенные стационарные структуры на однородном фоне, как правило, возникают в результате неустойчивости Тьюринга и стабильны, когда два стационарных состояния — однородное и пространственно-периодическое — обладают примерно одинаковой свободной энергией, причем допустимая разница энергий определяется работой, которую необходимо совершить для смещения фронта между двумя состояниями на длину волны периодической структуры [Ротеаи, 1986]. В случае сосуществования неустойчивостей Тьюринга и Хопфа в системе могут быть получены более сложные структуры, такие как стационарные структуры на осциллирующем фоне или, наоборот, осцилляции на фоне неизменных периодических структур [Тzou et al., 2013; De Wit et al., 1996], а также осциллоны [Vanag, Epstein, 2004], которые могут быть получены и в результате взаимодействия волновой и тьюринговской неустойчивостей [Vanag, Epstein, 2006].

Первое упоминание об осциллонах относится, по-видимому, к 1994 году, где само слово «осциллон» было предложено для описания соответствующих конфигураций поля [Gleiser, 1994]. Значительный интерес вызвала работа американских физиков 1996 года, в которой осциллоны были получены в результате периодического силового воздействия на горизонтально

расположенный слой зернистой среды [Umbanhowar, 1996]. Через год была опубликована статья по математическому моделированию этого эксперимента, результаты которой прекрасно сходятся с экспериментальными [Bizon et al., 1998]. Авторы высказали предположение, что подобное поведение может происходить и в недискретных средах, что вскоре было подтверждено в аналогичном эксперименте с коллоидной суспензией [Lioubashevski et al., 1999]. Возникновение осциллонов под действием периодической силы возможно, когда изначально стационарная пространственно-однородная система находится вблизи бифуркации Хопфа, приводящей к гомогенным колебаниям, притом период внешней силы кратен их периоду [Burke et al., 2008]. В наше время осциллоны все чаще появляются в исследованиях, относящихся к гидродинамике [Shats et al., 2012], теории поля [Amin, Shirokoff, 2010], квантовой механике [Charukhchyan et al., 2014], а также к другим областям.

В данной работе мы предлагаем новый механизм образования осциллона в модельной системе, состоящей из двух подсистем, в одной из которых под действием жесткого возбуждения формируются стационарные локализованные структуры, параметрически влияющие на вторую подсистему, переводя ее в колебательный режим.

Численные эксперименты

Формирование уединенных стационарных структур в первой подсистеме

Рассмотрим первую подсистему, построенную аналогично известной модели ФитцХью– Нагумо, которая является прототипом возбудимой системы [Fitzhugh, 1961]:

$$\dot{u} = D\Delta u - u(u + \alpha)(u - 1) - v,$$

$$\dot{v} = \Delta v + u - v.$$
(1)

Линеаризуем систему вблизи стационарной точки (0, 0) и найдем условия, при которых в системе имеет место неустойчивость Тьюринга, приводящая к самопроизвольному образованию стационарных структур в системе. Дисперсионное уравнение для системы выглядит следующим образом:

$$\begin{vmatrix} \alpha - k^2 D - \lambda & -1 \\ 1 & -1 - k^2 - \lambda \end{vmatrix} = 0.$$

Неустойчивость Тьюринга возникает в диапазоне волновых чисел k, для которых корни $\lambda_{1,2}$ — действительные числа разных знаков. Следовательно, границами области неустойчивости Тьюринга являются такие волновые числа, для каждого из которых один из корней обращается в ноль:

$$k_{1,2}^2 = \frac{\alpha - D \pm \sqrt{(\alpha + D)^2 - 4D}}{2D}.$$

Для существования неустойчивости Тьюринга необходимо, чтобы подкоренное выражение было больше нуля. Кроме того, из условий существования неустойчивости Тьюринга [Васильев, Романовский, 1976] следует условие $\alpha<1$. Учитывая, что квадрат волнового числа должен быть положительным числом, получаем итоговое условие $1>\alpha>2$ $\sqrt{D}-D$. Чтобы возникающие структуры были контрастными, то есть в них чередовались участки быстрого и плавного изменения переменных, диффузия активатора u должна быть много меньше диффузии ингибитора v, поэтому мы выбрали D=0.001. Тогда бифуркация Тьюринга имеет место при $\alpha=2$ $\sqrt{0.001}-0.001\approx0.0622$. При данных значениях параметров бифуркация является субкритической — при прохождении параметром α бифуркационного значения сразу рождаются структуры конечной, достаточно большой, амплитуды. Набор параметров $\alpha=-0.1, D=0.001$ соответствует

добифуркационной ситуации, для которой зависимость действительной части корней от квадрата волнового числа, показанная на рис. 1, явно указывает на отсутствие неустойчивости Тьюринга. Численное моделирование системы с этим набором параметров показывает, что после возмущения малым пространственным шумом системы, находящейся в тривиальном однородном состоянии равновесия, она стремится вернуться в это состояние равновесия. Тем не менее при жестком возбуждении системы численный эксперимент демонстрирует возникновение в ней стационарных пространственно-неоднородных структур.

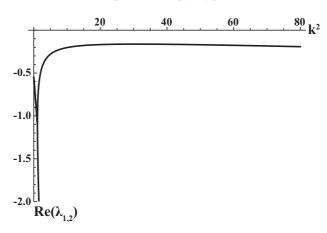


Рис. 1. Зависимость действительной части корней дисперсионного уравнения $\lambda_{1,2}$ системы 1 от квадрата волнового числа $k.\ D=0.001,\ \alpha=-0.1$

Мы проводим вычисления в квадратной области $0 \le x \le L$, $0 \le y \le L$, L = 10, задавая на всей границе условия нулевого потока. Для численного решения используется метод расщепления по физическим процессам — кинетические уравнения решаются методом Рунге–Кутты четвертого порядка, уравнения диффузии — методом потоковой прогонки, с использованием метода переменных направлений. Все эти методы подробно описаны в книге [Федоренко, 1994].

В начальный момент времени распределение переменной u(x,y,0) задается как сумма двух осесимметричных пиков максимальной амплитуды 1 с центрами на одной и двух третях длины диагонали x=y: $u(x,y,0)=1/(1+(\frac{x-L/3}{\delta})^2+(\frac{y-L/3}{\delta})^2)+1/(1+(\frac{x-2L/3}{\delta})^2+(\frac{y-2L/3}{\delta})^2)$, где $\delta=0,4$ параметр, определяющий крутизну пика. Чтобы пики не влияли друг на друга, необходимо, чтобы расстояние между ними превышало характерную диффузионную длину ингибиторной переменной. Распределение переменной v(x,y,0) аналогичное, но с вдвое меньшей амплитудой: $v(x,y,0)=\frac{1}{2}u(x,y,0)$. На рис. 2a показано начальное распределение переменных в разрезе диагонали x=y. Со временем система стремится к пространственно неоднородному стационарному состоянию, профиль которого в том же разрезе изображен на рис. 26.

Взаимодействие неоднородных стационарных структур с потенциально колебательной системой

Рассмотрим систему, в которой описанная выше возбудимая подсистема параметрически влияет на один из параметров модели «брюсселятор» [Glansdorff, Prigogine, Hill, 1973], аналогично тому, как это было сделано в работе [Борина, Полежаев, 2013]:

$$\dot{u} = D\Delta u - u(u + \alpha)(u - 1) - v,$$

$$\dot{v} = \Delta v + u - v,$$

$$\dot{p} = D\Delta p + A + p^2 q - (B + 1)p,$$

$$\dot{q} = D\Delta q - p^2 q + Bp,$$
(2)

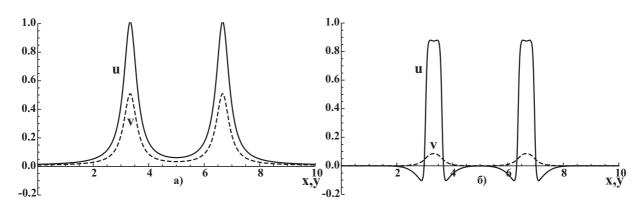


Рис. 2. Распределение переменных системы 1 по диагонали x = y а) в начальный момент времени; б) стационарное состояние. D = 0.001, $\alpha = -0.1$

где $\alpha = -0.1$, как и прежде, A = 1, B = B(x,y,t) = 1 + 2u(x,y,t). Параметры «брюсселятора» подобраны таким образом, что для нераспределенной системы стационарное решение p = A, $q = \frac{B}{A}$ устойчиво при малых u, а при $u \geq 0.5$ теряет устойчивость в результате бифуркации Андронова–Хопфа, при этом в системе появляется устойчивый предельный цикл. В распределенной системе, при небольшом коэффициенте диффузии переменных «брюсселятора» D = 0.001, взаимодействие со структурами возбудимой подсистемы, описанными выше, приводит к образованию уединенных колеблющихся структур — осциллонов, что подтверждается численными экспериментами.

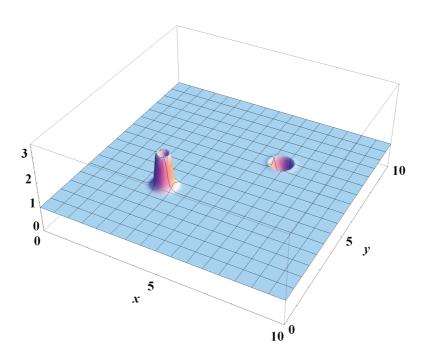


Рис. 3. Распределение переменной p системы 2 в момент времени t=906. D=0.001, $\alpha=-0.1,$ A=1, B=1+2u

На рис. 3 показано распределение переменной p в момент времени t=906, а на рис. 4 представлены распределения обеих переменных подсистемы «брюсселятор» в разрезе диагонали

x=y за один период колебаний осциллонов, начиная с этого же момента. Начальные распределения переменных возбудимой подсистемы выбраны такими же, как описано выше. Начальное распределение переменных «брюсселятора» — $p=1, q=1+2/(1+(\frac{x-L/3}{\delta})^2+(\frac{y-L/3}{\delta})^2)$ — к однородному состоянию, которое оставалось бы стационарным при u=0, добавлен один пик. Частота колебаний нераспределенного «брюсселятора» зависит от параметра B, но наличие небольшой диффузии приводит к тому, что каждая из полученных структур осциллирует как одно целое.

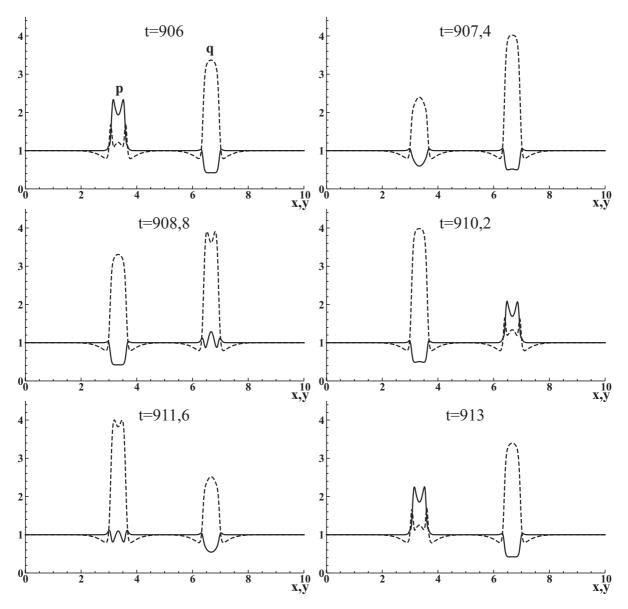


Рис. 4. Распределение переменных p и q системы 2 по диагонали x=y в различные моменты времени. $D=0.001, \alpha=-0.1, A=1, B=1+2u$

Обсуждение

В данной работе мы предложили формальное модельное описание возникновения в химической системе осциллонов — уединенных колеблющихся структур. В реальном эксперименте такие структуры были обнаружены в реакции Белоусова-Жаботинского, протекающей

в обращенной масляной микроэмульсии аэрозоля ОТ [Vanag, 2004]. Единой численной модели, качественно описывающей эту систему, на данный момент не существует ввиду как чрезвычайной сложности самой реакции Белоусова-Жаботинского, так и усложненного характера процессов переноса в этой системе, что в совокупности приводит к широкому разнообразию пространственно-временных структур, демонстрируемых ей. Нахождение механизмов формирования отдельных структур может способствовать изучению этой системы, равно как и других аналогичных реакционно-диффузионных систем, ввиду общности основных закономерностей их поведения.

Полученные нами модельные осциллоны, колеблющиеся в разных фазах, не притягиваются друг к другу, в отличие от широко известных осциллонов в зернистой среде [Umbanhowar, 1996], даже при близком расположении пиков начального возбуждения системы. Более того, в этом случае уединенные структуры первой подсистемы, а с ними и осциллоны, получаемые во второй подсистеме, отталкиваются друг от друга, пока не разойдутся на расстояние, значение которого лежит в диапазоне длин волн, относительно которых система потеряет устойчивость при небольшом превышении параметром α бифуркационного значения $2\sqrt{0.001} - 0.001 \approx 0.0622$.

Значение $\alpha=-0.1$, используемое в расчетах, приведенных выше, значительно отличается от бифуркационного значения. Это связано с тем, что структуры, которые образуются в подсистеме 1 при значениях α , более близких к бифуркационному, не являются уединенными — после сравнительно быстрого формирования структур, которые при визуализации, аналогичной приведенной выше, кажутся уединенными, через некоторое время происходит их «достройка» до стационарных структур, занимающих всю область моделирования. Формирование диссипативных структур вследствие локального возбуждения — хорошо известное явление [Миггау, 2011], но данный случай интересен тем, что оно происходит при добифуркационных значениях параметров. При этом с уменьшением параметра α характерное время «достройки» увеличивается, а внешний вид структур качественно изменяется. Изучение этого явления послужит темой отдельного исследования. При понижении α до -0.1 происходит качественный переход в поведении системы, и уединенные структуры, формирующиеся после начального возбуждения, остаются стационарными (по крайней мере, до t=60000). При дальнейшем понижении параметра формирование стационарных структур в результате жесткого возбуждения прекращается при $\alpha\approx-0.24$.

Список литературы

- *Борина М. Ю., Полежаев А. А.* Исследование механизмов формирования сегментированных волн в активных средах // Компьютерные исследования и моделирование. 2013. Т. 5(4). С. 533—542.
- Ванаг В. К. Волны и динамические структуры в реакционно-диффузионных системах. Реакция Белоусова–Жаботинского в обращенной микроэмульсии // Успехи физических наук. 2004. Т. 174(9). С. 991–1010.
- Васильев В. А., Романовский Ю. М. О роли диффузии в системах с автокатализом // Теоретическая и экспериментальная биофизика. -1976. Т. 1. С. 73.
- Колмогоров А. Н., Петровский Н. Г., Пискунов Н. С. Исследование уравнения диффузии, соединенной с возрастанием вещества, и его применение к одной биологической проблеме // Бюл. МГУ. Сер. А. Математика и механика. 1937. Т. 1(6). С. 1-16.
- Φ едоренко Р. П. Введение в вычислительную физику. М.: Физтех, 1994. 528 с.
- Amin M. A., Shirokoff D. Flat-top oscillons in an expanding universe // Physical Review D. -2010. Vol. 81(8). P. 085045.

- Bizon C., Shattuck M. D., Swift J. B., McCormick W. D., Swinney H. L. Patterns in 3D Vertically Oscillated Granular Layers: Simulation and Experiment // Phys. Rev. Lett. 1998. Vol. 80(1). P. 57–60.
- *Burger M., Field R. J.* Oscillations and Traveling Waves in Chemical Systems. Wiley-Interscience. 1985. 681 p.
- Burke J., Yochelis A., Knobloch E. Classification of Spatially Localized Oscillations in Periodically Forced Dissipative Systems // SIAM J. Appl. Dyn. Syst. 2008. Vol. 7(3). P. 651–711.
- Charukhchyan M. V., Sedov E. S., Arakelian S. M., Alodjants A. P. Spatially localized structures and oscillons in atomic Bose-Einstein condensates confined in optical lattices // Physical Review A. 2014. Vol. 89(6). P. 063624.
- Fisher R. A. The Wave of Advance of Advantageous Genes // Annals of Eugenics 1937. Vol. 7. P. 355–369.
- Fitzhugh R. Impulses and Physiological States in Theoretical Models of Nerve Membrane // Biophysical Journal. 1961. Vol. 1. P. 445.
- Glansdorff P., Prigogine I., Hill R. N. Thermodynamic Theory of Structure, Stability and Fluctuations // American Journal of Physics. 1973. Vol. 41. P. 147–148.
- Gleiser M. Pseudostable bubbles // Phys. Rev. D. -1994. Vol. 49(6). P. 2978-2982.
- Lioubashevski O., Hamiel Y., Agnon A., Reches Z., Fineberg F. Oscillons and Propagating Solitary Waves in a Vertically Vibrated Colloidal Suspension // Phys. Rev. Lett. 1999. Vol. 83(16). P. 3190–3193.
- *Murray J. D.* Mathematical Biology II: Spatial Models and Biomedical Applications (Interdisciplinary Applied Mathematics). Springer; 3rd edition. 2011. Vol. 2. 814 p.
- *Pomeau Y.* Front Motion, Metastability and Subcritical Bifurcations in Hydrodynamics // Physica D: Nonlinear Phenomena. 1986. Vol. 23(1–3). P. 3–11.
- Shats M., Xia H., Punzmann H. Parametrically excited water surface ripples as ensembles of oscillons // Phys. Rev. Lett. 2012. Vol. 108(3). P. 034502.
- *Turing A. M.* The Chemical Basis of Morphogenesis // Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series B, Biological Sciences. 1952. Vol. 237. P. 37–72.
- Tzou J. C., Ma Y.-P., Bayliss A., Matkowsky B. J., Volpert V. A. Homoclinic snaking near a codimension-two Turing-Hopf bifurcation point in the Brusselator model // Phys. Rev. E. 2013. Vol. 87(2). P. 022908.
- *Umbanhowar P.B., Melo F., Swinney H.L.* Localized excitations in a vertically vibrated granular layer // Nature. 1996. Vol. 382. P. 793–796.
- *Vanag V. K., Epstein I. R.* Stationary and Oscillatory Localized Patterns, and Subcritical Bifurcations // Phys. Rev. Lett. 2004. Vol. 92(12). P. 128301.
- *Vanag V. K., Epstein I. R.* Resonance-induced oscillons in a reaction-diffusion system // Phys. Rev. E. 2006. Vol. 73(1). P. 016201.
- Vanag V. K., Epstein I. R. Patterns of nanodroplets: the Belousov–Zhabotinsky–Aerosol Ot–Microemulsion system, in: K. Al-Shamery, J. Parisi (eds.), Self-Organized Morphology in Nanostructured Materials // Springer Series in Materials Science. Berlin, 2008. P. 89.
- De Wit A., Lima D., Dewel G., Borckmans P. Spatiotemporal dynamics near a codimension-two point // Phys. Rev. E. 1996. Vol. 54(1). P. 261–271.