Семинар 9

Линейный анализ устойчивости гомогенного стационарного состояния системы двух уравнений реакция–диффузия. Неустойчивость Тьюринга. Активатор и ингибитор. Условия возникновения диссипативных структур.

ЛИНЕЙНАЯ СИСТЕМА ДВУХ УРАВНЕНИЙ РЕАКЦИЯ–ДИФФУЗИЯ

Рассмотрим модель химической реакции, в которой два вещества претерпевают химические превращения и, кроме того, могут диффундировать в реакционном объеме. Такая модель представляет собой ***распределенную*** систему и в случае одномерного реактора (учитывается только одна пространственная переменная) может быть описана системой уравнений:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial x}{\partial t} = P(x, y, r) + D_x \dfrac{\partial^2 x}{\partial r^2}, \\ \dfrac{\partial y}{\partial t} = Q(x, y, r) + D_y \dfrac{\partial^2 y}{\partial r^2}. \end{cases} \tag{9.1}$$

Здесь r — пространственная переменная. Пусть краевыми условиями являются условия непроницаемости торцов одномерного реактора:

$$\left.\frac{\partial x}{\partial r}\right|_{r=0} = \left.\frac{\partial x}{\partial r}\right|_{r=l} = \left.\frac{\partial y}{\partial r}\right|_{r=0} = \left.\frac{\partial y}{\partial r}\right|_{r=l} = 0. \tag{9.2}$$

Как и в случае ***точечных*** моделей, первым необходимым этапом изучения модели распределенной системы является исследование устойчивости ее однородного стационарного состояния.

Пространственно однородным (гомогенным) стационарным состоянием называется такое состояние системы, при котором значения переменных не меняются со временем и одинаковы в каждой точке пространства.

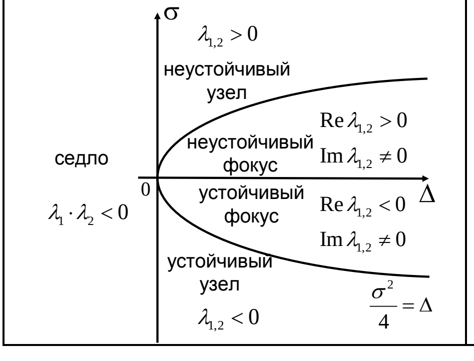
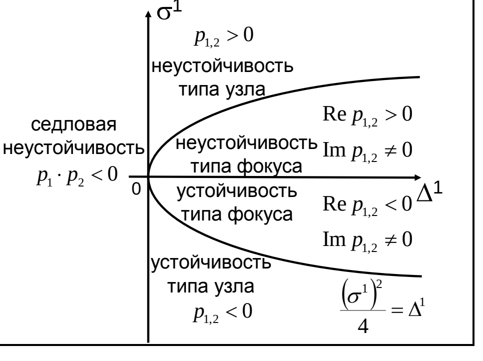
Исследование на устойчивость будем проводить аналогично тому, как проводилось исследование на устойчивость в случае системы обыкновенных дифференциальных уравнений (точечной системы).

Точечная система	***Распределенная система***
$$\begin{cases} \dfrac{\partial x}{\partial t} = P(x, y), \\ \dfrac{\partial y}{\partial t} = Q(x, y). \end{cases} \qquad (9.3)$$	$$\begin{cases} \dfrac{\partial x}{\partial t} = P(x, y) + D_x \dfrac{\partial^2 x}{\partial r^2}, \\ \dfrac{\partial y}{\partial t} = Q(x, y) + D_y \dfrac{\partial^2 y}{\partial r^2}. \end{cases} \qquad (9.3`)$$
Рассмотрим стационарное состояние системы, такое что: $x = \bar{x}$, $y = \bar{y}$, (9.4)	Рассмотрим пространственно однородное решение системы, такое что: $x = \bar{x}$, $y = \bar{y}$, (9.4`)
где $\bar{x}$ и $\bar{y}$ являются корнями алгебраической системы уравнений: $P(x,y) = 0$, $Q(x,y) = 0$.	
Стационарное состояние устойчиво, если малые отклонения не выводят систему слишком далеко из окрестности этого состояния.	***Пространственно однородное стационарное состояние устойчиво***, если малые отклонения (в том числе и распределенные в пространстве) не выводят систему слишком далеко из окрестности этого состояния.
Пусть $\xi(t)$ и $\eta(t)$ — малые отклонения от стационарных решений $\bar{x}$ и $\bar{y}$.	Пусть $\xi(t, r)$ и $\eta(t, r)$ — малые отклонения от пространственно однородных решений $\bar{x}$ и $\bar{y}$.

<table>
<tr>
<td>Тогда для ξ и η можно записать линеаризованную систему:
$$\begin{cases}\dfrac{\partial\xi}{\partial t}=a\xi+b\eta,\\ \dfrac{\partial\eta}{\partial t}=c\xi+d\eta.\end{cases}\qquad(9.5)$$</td>
<td>Тогда для ξ и η можно записать распределенную линеаризованную систему:
$$\begin{cases}\dfrac{\partial\xi}{\partial t}=a\xi+b\eta+D_\xi\dfrac{\partial^2\xi}{\partial r^2},\\ \dfrac{\partial\eta}{\partial t}=c\xi+d\eta+D_\eta\dfrac{\partial^2\eta}{\partial r^2}.\end{cases}\qquad(9.5`)$$
$D_\xi=D_x\ D_\eta=D_y$.</td>
</tr>
<tr>
<td colspan="2">$$a=\frac{\partial P(\overline{x},\overline{y})}{\partial x},\ b=\frac{\partial P(\overline{x},\overline{y})}{\partial y},\ c=\frac{\partial Q(\overline{x},\overline{y})}{\partial x},\ d=\frac{\partial Q(\overline{x},\overline{y})}{\partial y}.\qquad(9.6)$$</td>
</tr>
<tr>
<td>Решение будем искать в виде:
$\xi(t)=Ae^{\lambda t}$, (9.7)
$\eta(t)=Be^{\lambda t}$.
Множитель $e^{\lambda t}$ характеризует поведение отклонения от стационарного состояния во времени.</td>
<td>Решение будем искать в виде:
$\xi(t,r)=Ae^{pt}e^{ikr}$, (9.7`)
$\eta(t,r)=Be^{pt}e^{ikr}$.
Множитель e^{pt} характеризует поведение отклонения от стационарного состояния во времени.
Множитель e^{ikr} характеризует отклонение величин переменных от однородного стационарного состояния в точке с координатой r для собственных функций, соответствующих волновому числу k. Для трубки длиной l волновое число принимает дискретные значения $k=k_n=\dfrac{\pi n}{l}$.
Для бесконечного одномерного реактора волновые числа k меняются от 0 до ∞.</td>
</tr>
</table>

<table>
<tr>
<td>Подстановка выражений (9.7) в (9.5) после сокращения на $e^{\lambda t}$ дает:

$$\begin{cases}\lambda A = aA + bB\ , \\ \lambda B = cA + dB,\end{cases}$$
или
$$\begin{cases}(\lambda - a)A - bB = 0, \\ cA - (\lambda - d)B = 0.\end{cases} \qquad (9.9)$$</td>
<td>Подстановка выражений (9.7`) в (9.5`) после сокращения на $e^{pt}e^{ikr}$ дает:

$$\begin{cases}pA = aA + bB - k^2 D_\xi A\ , \\ pB = cA + dB - k^2 D_\eta B,\end{cases}$$
или
$$\begin{cases}(p - a + k^2 D_\xi)A - bB = 0, \\ cA - (p - d + k^2 D_\eta)B = 0.\end{cases} \qquad (9.9`)$$</td>
</tr>
<tr>
<td colspan="2">Величины A, B тождественно не равны нулю только в том случае, если определитель систем (9.9) и (9.9`) равен нулю:</td>
</tr>
<tr>
<td>$(\lambda - a)(\lambda - d) - bc = 0.$
Получим характеристическое уравнение:
$\lambda^2 - \sigma\lambda + \Delta = 0,$ где
$\sigma = a + d,$
$\Delta = ad - bc.$</td>
<td>$(p - a + k^2 D_\xi)(p - d + k^2 D_\eta) - bc = 0.$
Получим дисперсионное уравнение:
$p^2 - \sigma^1 p + \Delta^1 = 0,$ где
$\sigma^1 = a + d - k^2(D_\xi + D_\eta),$
$\Delta^1 = k^4 D_\xi D_\eta - k^2(aD_\eta + dD_\xi) + ad - bc.$</td>
</tr>
<tr>
<td>Бифуркационная диаграмма 1:</td>
<td>Бифуркационная диаграмма 2:</td>
</tr>
<tr>
<td>
</td>
<td>
</td>
</tr>
</table>

НЕУСТОЙЧИВОСТЬ ТЬЮРИНГА

Определим условия возникновения диффузионной неустойчивости (обусловленной только процессами диффузии). Это означает, что однородное стационарное состояние $x = \bar{x}$, $y = \bar{y}$ будет устойчивым по отношению к малым однородным возмущениям (соответствующая точечная система устойчива) и не устойчива по отношению к малым пространственно неоднородным возмущениям.

Анализ бифуркационных диаграмм 1 и 2 показывает, что сформулированное выше условие реализуется в случае выполнения следующих неравенств:

$\sigma < 0$, $\Delta > 0$ (условие устойчивости в точечной системе), $\sigma^1 > 0$ (1-е условие неустойчивости в распределенной системе), либо $\Delta^1 < 0$ (2-е условие неустойчивости в распределенной системе).

При положительных коэффициентах диффузии ($D_x > 0$, $D_y > 0$) и $\sigma < 0$ выражение $\sigma^1 = a + d - k^2(D_x + D_y)$ всегда отрицательно (т.к. $\sigma = a + d < 0$). Следовательно, для возникновения неустойчивости в распределенной системе необходимо выполнение неравенства $\Delta^1 < 0$ (седловая неустойчивость).

Таким образом, для возникновения диффузионной неустойчивости (неустойчивости Тьюринга) необходимо одновременное выполнение следующих условий:

1) $a + d < 0$,

2) $ad - bc > 0$,

3) $k^4 D_x D_y - k^2(aD_y + dD_x) + ad - bc < 0$.

ПОНЯТИЕ АКТИВАТОРА И ИНГИБИТОРА

Рассмотрим подробнее 3-е условие:

$$\{k^4 D_x D_y\} + \{-k^2(aD_y + dD_x)\} + \{ad - bc\} < 0.$$

Первое слагаемое положительно, $\{k^4 D_x D_y\} > 0$, поскольку все коэффициенты положительны. Третье слагаемое также положительно, $\{ad - bc\} > 0$, это следует из условия 2). Тогда сумма трех рассматриваемых слагаемых может быть отрицательной только за счет второго слагаемого, которое должно быть отрицательным: $-k^2(aD_y + dD_x) < 0$. Отсюда следует, что выражение в скобках должно быть положительно: $(aD_y + dD_x) > 0$.

Найдем условия, когда неравенства $(aD_y + dD_x) > 0$ и $a + d < 0$ (условие 1) выполняются одновременно. Это возможно, только если один из коэффициентов *a* и *d* будет положительным, а второй — отрицательным.

Пусть для определенности $a > 0$, а $d < 0$. Назовем вещество *x* — ***активатором*** (поскольку при $a > 0$ увеличение *x* будет приводить к увеличению воспроизводства самого себя, $a \cdot x$ является автокаталитический членом), а вещество *y* — ***ингибитором***.

Заметим, что коэффициент *a* должен быть по модулю меньше, чем коэффициент *d*, $|a| < |d|$, иначе условие 1) $a + d < 0$ не будет выполняться.

Перепишем неравенство $(aD_y + dD_x) > 0$ в виде $D_x(a\dfrac{D_y}{D_x} + d) > 0$. Если $a > 0$, $d < 0$ и $a + d < 0$, то $(a\dfrac{D_y}{D_x} + d) > 0$, только при $\dfrac{D_y}{D_x} > 1$, или $D_y > D_x$.

Таким образом, необходимым (но не достаточным) условием возникновения диффузионной неустойчивости является выполнение следующих требований:

1) коэффициенты a и d должны быть разных знаков;

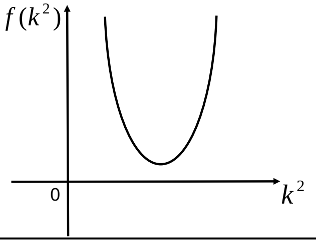
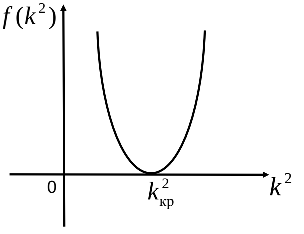
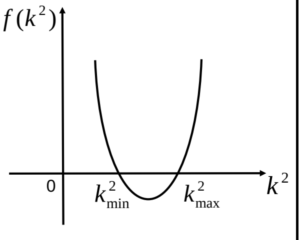
2) коэффициент диффузии активатора меньше коэффициента диффузии ингибитора.

При равных коэффициентах диффузии диффузионная неустойчивость возникнуть не может.

СООТНОШЕНИЕ КОЭФФИЦИЕНТОВ ДИФФУЗИИ, ПРИ КОТОРОМ ВОЗНИКАЮТ ДИССИПАТИВНЫЕ СТРУКТУРЫ

Выражение $f(k^2) = k^4 D_x D_y - k^2(aD_y + dD_x) + \Delta$ описывается параболой, ветви которой направлены вверх. Как было показано в предыдущих разделах, для возникновения диффузионной неустойчивости необходимо, чтобы существовали такие значения k, при которых $f(k^2) < 0$ (см. 3-е условие).

Рассмотрим положение параболы в зависимости от знака дискриминанта $Dis = \left(aD_y + dD_x\right)^2 - 4D_x D_y \Delta$, $\Delta = ad - bc$.

$Dis < 0$	$Dis = 0$	$Dis > 0$
		
Вся парабола лежит в положительной области. Распределенная система устойчива. Диффузионная неустойчивость не возникает.	Существует критическое (бифуркационное) значение $k^2_{кр}$, при котором возникает переход от устойчивого состояния к неустойчивому.	Часть параболы лежит в отрицательной области. Диффузионная неустойчивость возникает в интервале $k^2_{min} < k^2 < k^2_{max}$.

Найдем критическое (бифуркационное) соотношение коэффициентов диффузии, при котором возникает переход из устойчивого состояния в неустойчивое, из условия $Dis = 0$: $\left(aD_y + dD_x\right)^2 - 4D_x D_y \Delta = 0$.

Пусть $D_{\text{кр}} = \dfrac{D_y}{D_x}$.

Перепишем уравнение в виде:

$$\left(aD_{\text{кр}} + d\right)^2 - 4D_{\text{кр}}\Delta = 0,$$

или

$$a^2 D_{\text{кр}}^2 + 2(ad - 2\Delta)D_{\text{кр}} + d^2 = 0.$$

Корни уравнения определяются как:

$$D_{\text{кр},1} = \frac{2\Delta - ad + 2\sqrt{\Delta}\sqrt{\Delta - ad}}{a^2},$$

$$D_{\text{кр},2} = \frac{2\Delta - ad - 2\sqrt{\Delta}\sqrt{\Delta - ad}}{a^2}.$$

Можно показать, что $k_{\text{кр}}^2$ может принимать положительные значения только при $D_{\text{кр},1}$.

Таким образом, *для возникновения диффузионной неустойчивости, необходимо выполнение следующих условий*:

1) $a + d < 0$, $a > 0$, $d < 0$ (либо $a < 0$, $d > 0$),
2) $ad - bc > 0$,
3) отношение коэффициента диффузии *ингибитора* к коэффициенту диффузии *активатора* должно быть больше, чем

$$D_{\text{кр}} = \frac{2\Delta - ad + 2\sqrt{\Delta}\sqrt{\Delta - ad}}{a^2}.$$

При этом волновое число $k_{\text{кр}}^2 = \dfrac{aD_{\text{кр}} + d}{2D_x D_{\text{кр}}}$.

Число волн на отрезке (число диссипативных структур) в момент возникновения неустойчивости будет равно целой части от выражения $\dfrac{k_{\text{кр}}}{2\pi}$.

Задание 9.1.

Для модели брюсселятор (система «реакция–диффузия»)

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t} = A + u^2 v - (B+1)u + D_1 \dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \\ \dfrac{\partial v}{\partial t} = Bu - u^2 v + D_2 \dfrac{\partial^2 v}{\partial x^2}, \end{cases}$$

где u — *активатор*, v — *ингибитор*, t — время, x — пространственная координата, при заданных преподавателем параметрах A и B рассчитайте:

а) критическое значение отношения коэффициентов диффузии:

$$D_{кр} = \frac{D_2}{D_1} = \frac{A^2}{(\sqrt{B} - 1)^2};$$

б) значение коэффициента диффузии *ингибитора* $D_2 = D_1 D_{кр}$, если значение коэффициента диффузии *активатора* $D_1 = 10^{-3}$;

в) волновое число: $k_{\text{кр}}^2 = \dfrac{\sqrt{B} - 1}{D_1}$;

г) число диссипативных структур (число волн) на отрезке:

$$n = \frac{k_{\text{кр}}}{2\pi} = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{\sqrt{B} - 1}{D_1}}.$$

ЗАДАНИЕ 9.2.

В программе для решения дифференциальных уравнений в частных производных получите диссипативные структуры при значениях параметров, используемых в задании 9.1.

Убедитесь, что при соотношении коэффициентов диффузии меньше расчетного $D_{кр}$ структуры не возникают.

Сопоставьте расчетное число диссипативных структур n с числом волн на отрезке, полученным в численном счете.

КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ

1. Чем является решение системы уравнений реакция–диффузия в общем виде?
2. Как выводится дисперсионное уравнение?
3. Может ли в распределенной системе возникнуть неустойчивость по типу узла, если соответствующая точечная система устойчива при любых параметрах?
4. Какие типы неустойчивости могут реализоваться в распределенной системе, если точечная система устойчива при любых параметрах?
5. Что такое «неустойчивость Тьюринга»?
6. Какая переменная называется активатором, а какая — ингибитором?
7. Как должны соотноситься коэффициенты диффузии активатора и ингибитора, чтобы в распределенной модели возникла неустойчивость Тьюринга при условии устойчивости соответствующей точечной системы?

ЗАДАЧИ К СЕМИНАРУ 9

9.1. Проведите линейный анализ следующих моделей реакция–диффузия:

а) $$\begin{cases} \dfrac{dx}{dt} = 1 - xy + D_x \dfrac{\partial^2 x}{\partial r^2}, \\ \dfrac{dy}{dt} = ay\left(x - \dfrac{2}{1+y}\right) + D_y \dfrac{\partial^2 y}{\partial r^2}; \end{cases}$$

б) $$\begin{cases} \dfrac{dx}{dt} = 2 + x^2 y - (a+1)x + D_x \dfrac{\partial^2 x}{\partial r^2}, \\ \dfrac{dy}{dt} = ax - x^2 y + D_y \dfrac{\partial^2 y}{\partial r^2}, \end{cases}$$

с краевыми условиями $\left.\dfrac{\partial x}{\partial r}\right|_{r=0} = \left.\dfrac{\partial x}{\partial r}\right|_{r=l} = \left.\dfrac{\partial y}{\partial r}\right|_{r=0} = \left.\dfrac{\partial y}{\partial r}\right|_{r=l} = 0$
на отрезке $l = 1$.

Для каждого варианта

а) определите, какая переменная является активатором, а какая ингибитором, какие при этом условия накладываются на параметры точечной системы;

б) выпишите условия, при которых одновременно точечная система является устойчивой, а соответствующая распределенная система — неустойчивой;

в) рассчитайте критическое соотношение коэффициентов диффузии, при котором в системе может возникнуть диффузионная неустойчивость;

г) рассчитайте соответствующее количество диссипативных структур, которые могут возникнуть на заданном отрезке $l = 1$.