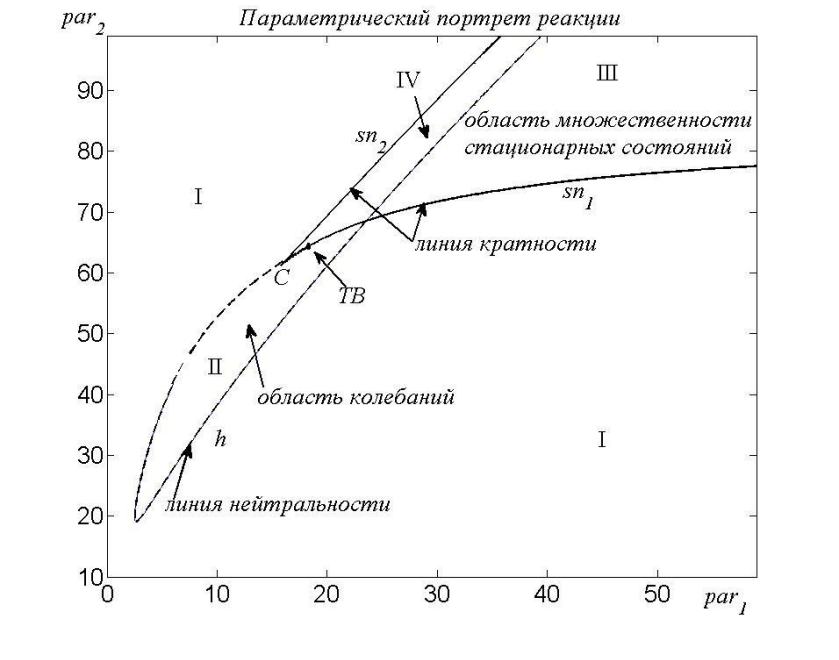
им. Д. И. Менделеева

МИНИСТЕРСТВО
ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

**Е. С. Куркина**

# КУРСОВЫЕ ЗАДАЧИ ПО СИНЕРГЕТИКЕ

## (МЕТОДЫ ПОИСКА ПРОСТРАНСТВЕННО-ВРЕМЕННЫХ СТРУКТУР)




Москва

2015

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Российский химико-технологический университет
имени Д. И. Менделеева

**Е. С. Куркина**

# КУРСОВЫЕ ЗАДАЧИ ПО СИНЕРГЕТИКЕ

## МЕТОДЫ ПОИСКА ПРОСТРАНСТВЕННО-ВРЕМЕННЫХ СТРУКТУР

Утверждено Редакционным советом
университета в качестве учебного пособия

Москва

2015

УДК 66.02:536.75:51-7(075.8)
ББК 35.11
К93

Рецензенты:
Доктор физико-математических наук, профессор
Московского государственного университета им. М. В. Ломоносова
*В. М. Головизнин*
Доктор технических наук, профессор
Российского химико-технологического университета им. Д. И. Менделеева
*М. Б. Глебов*
Доктор технических наук, профессор
Российского химико-технологического университета им. Д. И. Менделеева
*Т. В. Савицкая*

**Куркина Е. С.**
К93 Курсовые задачи по синергетике. Методы поиска пространственно-временных структур: учебное пособие/ Е. С. Куркина. – М.: РХТУ им. Д. И. Менделеева, 2015. – 99 с.
ISBN 978-5-7237-1223-2

Рассмотрены методы параметрического анализа математических моделей и поиска пространственно-временных структур, которые возникают в нелинейных реакционных системах. Даны методы продолжения по параметру и проведения однопараметрического и двухпараметрического анализа моделей с целью нахождения областей существования автоколебаний, множественности стационарных состояний, уединенных бегущих волн и стационарных диссипативных структур. В начале каждого раздела, посвященного изучению того или иного явления самоорганизации, кратко излагается теория, а затем на конкретных примерах демонстрируется методика его нахождения. В приложениях для каждого раздела сформулирован перечень задач для закрепления практических навыков изучения курса и приводятся примеры программ, реализованных в пакете Matlab, для проведения параметрического анализа моделей и расчета решений, описывающих различные явления самоорганизации.

Учебное пособие предназначено для студентов, магистрантов, аспирантов, научных сотрудников, изучающих методы математического моделирования и исследования нелинейных реакционных систем. Оно соответствует курсу лекций по методам синергетики, которые читаются в РХТУ, МФТИ и некоторых других вузах

УДК 66.02:536.75:51-7(075.8)
ББК 35.11

ISBN 978-5-7237-1223-2
© Российский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева, 2015
© Куркина Е. С., 2015

# ВВЕДЕНИЕ

Явления самоорганизации такие как автоколебания, стационарные диссипативные структуры и волны наблюдаются в нелинейных открытых системах разной природы, в условиях далеких от термодинамического равновесия. Многие химические реакции представляют собой именно такие системы и демонстрируют сложное динамическое поведение.

Открытие яркой колебательной химической реакции Белоусовым в середине XX века стимулировало поиск явлений самоорганизации в химических системах. В 70-х гг. XX в. началось бурное исследование автоколебаний и явления множественности стационарных состояний в гетерогенном катализе, как экспериментальными, так и теоретическими методами с помощью математического моделирования и вычислительного эксперимента. Автоколебания скорости реакции наблюдаются как при атмосферном давлении, так и в условиях глубокого вакуума на катализаторах различной природы, включая металлические, нанесенные, пористые катализаторы. На сегодняшний день исследовано несколько десятков гетерогенных каталитических реакций, демонстрирующих колебательную динамику.

В конце 80-х гг. был создан фотоэлектронный эмиссионный микроскоп с высоким разрешением, который позволил визуализировать пространственные распределения реагентов. Он открыл новую страницу в исследованиях явлений пространственно-временной самоорганизации. Было обнаружено, что на поверхности катализатора в ходе химических реакций при определенных условиях наблюдаются бегущие, стоячие и спиральные волны, стационарные диссипативные структуры, химическая турбулентность и другие структуры. Сложное нелинейное динамическое поведение демонстрируют многие важнейшие реакции экологического катализа: $(NO+CO)/Pt(100)$, $(NO+H_2)/Pt(100)$, $(CO+O_2)/Pt(110)$, $(CO+O_2)/Pd(110)$, $(CO+O_2)/Pt(210)$, $(NH_3+NO)/Pt(100)$ и др.

Результаты этих исследований во многом изменили сложившиеся представления о механизмах поверхностных реакций и раскрыли новые горизонты в их прикладном использовании. В 2007 г. немецкому профессору Герхарду Эртлу, заведующему лабораторией в Институте Фрица Хабера (Берлин), где изучались эти реакции, была присуждена Нобелевская премия по химии за выдающиеся экспериментальные исследования химических процессов на твердых поверхностях.

Накопленный богатый экспериментальный материал, изобилующий новыми явлениями, требовал теоретического объяснения. Поэтому проблема создания адекватных математических моделей химических реакций, включающих модели атомарного уровня, вышла на передний план. Стало ясно, что для объяснения столь сложного поведения простыми кинетическими схемами не обойтись. Надо строить математические модели, описывающие

более сложные взаимодействия веществ с катализатором, учитывать латеральные взаимодействия в слое адсорбата, внедрение кислорода в подповерхностные слои катализатора, разные формы прикрепления молекул к поверхности, поверхностную диффузию реагентов, перестройку поверхности катализатора и другие факторы. *Математическое моделирование становится неотъемлемым инструментом исследования и объяснения нелинейной динамики химических реакций*.

В 2012 г. вышла монография [1] посвященная тому, как строить и исследовать различные типы математических моделей, в основе которых лежат системы обыкновенных дифференциальных уравнений, системы с частными производными типа реакция-диффузия и микроскопические решеточные модели. В книге описываются различные методы продолжения по параметру и приводится целый ряд известных математических моделей, описывающих явления самоорганизации в химических системах.

Настоящее учебное издание предназначено для лучшего усвоения и закрепления курса по методам исследования нелинейных явлений в химических системах. Упор сделан на практическое применение методов параметрического анализа математических моделей, построения параметрических портретов и нахождения областей существования автоколебаний, множественности стационарных состояний, уединенных бегущих волн, стационарных диссипативных структур.

Книга состоит из пяти частей и двух приложений. Каждая часть посвящена методам поиска того или иного явления самоорганизации. Вначале кратко излагается теория, а потом на конкретных примерах демонстрируется методика проведения параметрического анализа и построения решения, описывающего искомое явление самоорганизации. Первые два раздела посвящены описанию методов поиска автоколебаний и множественности стационарных состояний в макроскопических моделях, в основе которых лежат системы обыкновенных дифференциальных уравнений. Здесь же изложена методика проведения параметрического анализа моделей и даны численные и аналитические алгоритмы продолжения по параметру. В трех других частях описаны методы поиска и построения пространственно-временных структур в системах типа реакция диффузия. В приложениях дается перечень моделей с заданиями, которые могут быть использованы в качестве лабораторных работ по вычислительному практикуму, курсовых или самостоятельных задач для закрепления курса. Также по каждому разделу прилагаются примеры программ в пакете Matlab для расчета решений, описывающих то или иное явление самоорганизации.

.

# I. АВТОКОЛЕБАНИЯ И СТАЦИОНАРНЫЕ СОСТОЯНИЯ

## 1. Построение параметрического портрета системы. Автоколебания и множественность стационарных решений

### 1.1. Технология проведения параметрического анализа

Для изучения нелинейной динамики химических реакций часто используют *макроскопические или точечные модели*, в основе которых лежат системы автономных обыкновенных дифференциальных уравнений (сокращенно ОДУ), зависящие от параметров:

$$\frac{d\vec{y}}{dt} = \vec{f}(\vec{y}, \vec{\alpha}), \quad t > 0, \tag{1.1}$$

где $t$ – время; $\vec{y}(t) = (y_1, y_2, ..., y_n)$ – вектор неизвестных фазовых переменных; $\vec{f}(\vec{y}) = (f_1, f_2, ..., f_n)$ – вектор известных функций, описывающих взаимодействия; $\vec{\alpha}$ – вектор параметров модели.

Точечную математическую модель химической реакции вида (1.1) обычно получают исходя из кинетической схемы. В кинетической схеме реакции задается список веществ $Y_1, Y_2, ... Y_n$, участвующих в реакции, и список элементарных стадий, которые записываются в виде:

$$\alpha_{1j} Y_1 + \alpha_{2j} Y_2 + ... + \alpha_{nj} Y_n \xrightarrow{k_j} \beta_{1j} Y_1 + \beta_{2j} Y_2 + ... + \beta_{nj} Y_n, \quad j = 1, ..., m \tag{1.2}$$

где $\alpha_{ij}$ и $\beta_{ij}$ – стехиометрические коэффициенты; $j$ – номер стадии. Скорости элементарных реакций (1.2) $V_j$ в соответствие с законом действующих масс вычисляются по формулам:

$$V_j = k_j(T) y_1^{\alpha_{1j}} y_2^{\alpha_{2j}} ... y_n^{\alpha_{nj}}, \tag{1.3}$$

где $y_1, y_2, ..., y_n$ – концентрации веществ $Y_1, Y_2, ... Y_n$, $k_j$ – константы скоростей реакций, которые зависят от температуры $T$ по закону Аррениуса:

$$k_j = k_j^0 \exp(-E_j / (RT)), \tag{1.4}$$

где $k_j^0$ – предэкспонента; $E_j$ – энергия активации; $R$ – газовая постоянная.

При более сложных взаимодействиях для описания наблюдаемых процессов в выражение для скорости (1.3) вводят дополнительные множители $k(y_1, ..., y_s)$, которые описывают зависимость константы скорости реакции от концентраций.

Из закона сохранения масс следует, что изменения концентраций удовлетворяют системе ОДУ $n$-го порядка вида:

$$\frac{dy_i}{dt} = \sum_{j=1}^{m} (\beta_{ij} - \alpha_{ij}) V_j, \quad i = 1,...,n. \tag{1.5}$$

Система (1.5) определена в некоторой ограниченной области фазового пространства $S : \{0 \le y_i \le b_i,\ i = 1,...,n\}$, называемой симплексом реакции. Границы $b_i$ находятся из баланса масс.

Если в процессе реакции изменяется температура, то к системе (1.5) дописывают еще одно уравнение для изменения температуры, учитывающее тепловые эффекты стадий и теплообмен с окружающей средой.

Нелинейность модели обусловлена участием в элементарном акте более чем одной частицы и сложным кооперативным взаимодействием атомов и молекул между собой и (или) с поверхностью катализатора. В термокинетических моделях, которые учитывают изменение температуры в ходе реакции, дополнительную нелинейность экспоненциального вида вносит закон Аррениуса (1.4).

Макроскопическая модель может описывать такие явления самоорганизации, как множественность стационарных состояний, регулярные и нерегулярные колебания разного типа. Для нахождения области единственности и устойчивости стационарного состояния, для нахождения областей множественности стационарных состояний и областей существования автоколебаний в пространстве параметров *надо проводить параметрический или бифуркационный анализ системы и строить параметрический портрет системы*.

Критические значения параметров, при которых происходит качественное изменение решений системы, то есть изменяется фазовый портрет системы, называют *бифуркационными,* а сама качественная перестройка фазового портрета называется *бифуркацией.*

Бифуркации бывают *локальные* и *нелокальные*. *Локальные бифуркации* связаны с изменением фазового портрета в окрестности одной из стационарных точек, когда при переходе через критическое значение параметра изменяется устойчивость стационарной точки, или она исчезает, или в ее окрестности появляются другие стационарные точки или циклы малого размера. Тип локальной бифуркации можно определить, исследуя изменение свойств матрицы линеаризации при переходе через критическое значение $\alpha = \alpha^*$. *Нелокальные бифуркации* связаны с появлением или исчезновением особых траекторий в фазовом пространстве, таких как предельные циклы и сепаратрисы седел в системах второго порядка, или гомоклинические или гетероклинические траектории в системах размерности $n \ge 3$.

При параметрическом исследовании необходимо определять бифуркационные значения параметров и описывать явления, происходящие при переходе через критические значения. Бифуркационный анализ позволяет разбить пространство параметров на области с разным динамическим поведением, то есть построить *параметрический портрет системы*.

Обычно параметрические портреты из соображений удобства строят на плоскости двух параметров при фиксированных значениях остальных параметров. Точными границами, отделяющими здесь области с разными фазовыми портретами, являются *линии бифуркаций*. Зная тип бифуркации, можно предсказать, как изменится динамическое поведение системы при переходе через эту границу.

**Технология проведения параметрического анализа** состоит из нескольких этапов.

**1-й этап**. Сначала находятся и исследуются стационарные решения в зависимости от одного параметра. Для этого решается система нелинейных алгебраических уравнений:

$$\begin{cases} f_1(y_1, y_2, ..., y_n, \alpha) = 0, \\ \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots, \\ f_n(y_1, y_2, ..., y_n, \alpha) = 0. \end{cases} \tag{1.6}$$

Система (1.6) определяет зависимость стационарных состояний $\bar{y}^s$ от параметров в неявном виде. Возможность нахождения явного выражения:

$$y^s{}_i = \varphi_i(\alpha), \quad i = 1, ..., n \tag{1.7}$$

дается теоремой о неявной функции. Целью параметрического анализа как раз является получение явных функциональных зависимостей (1.7), исследование устойчивости и нахождение бифуркаций стационарных решений $y^s(\alpha)$.

Пусть зависимость (1.7) найдена. Тип стационарного решения $y^s(\alpha)$ (узел, фокус, седло и др.) и его устойчивость при текущем значении параметра $\alpha$ определяется собственными значениями $\lambda$ матрицы линеаризации (матрицы Якоби) **A** на стационаре:

$$\mathbf{A}(n \times n) = \left. \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial y_1} & \frac{\partial f_1}{\partial y_2} & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial y_n} \\ \dots\dots & \dots\dots & & \dots\dots \\ \frac{\partial f_n}{\partial y_1} & \frac{\partial f_n}{\partial y_2} & \dots\dots & \frac{\partial f_n}{\partial y_n} \end{pmatrix} \right|_{y_i = y^s{}_i} \tag{1.8}$$

Собственные значения находятся из характеристического уравнения:

$$\Delta(\mathbf{A} - \lambda E) = 0,$$

где **E** – это единичная матрица, а $\Delta$ – определитель матрицы $(\mathbf{A} - \lambda \mathbf{E})$.

*Стационарное состояние – устойчиво*, если все собственные значения имеют отрицательные действительные части:

$$\lambda_i < 0, \quad \mathrm{Re}(\lambda_i) < 0, \quad i = 1, ..., n. \tag{1.9}$$

*Стационарное состояние – неустойчиво*, если хотя бы одно собственное значение имеет положительную действительную часть.

Пусть стационарное решение устойчиво, и выполняются неравенства (1.10). *Бифуркация* происходит, когда при критическом значении параметра $\alpha = \alpha^*$ одно действительное собственное значение обращается в ноль

$$\lambda_1 = 0, \ \ \mathrm{Re}\lambda_j < 0, \ \ j = 2,...,n, \tag{1.10}$$

либо действительная часть пары собственных значений обращается в ноль:

$$\mathrm{Re}\lambda_{1,2} = 0, \ \ \mathrm{Re}\lambda_j < 0, \ \ j = 3,...,n, \tag{1.11}$$

либо сразу несколько $\lambda_i(\alpha^*) = 0$ или $\mathrm{Re}(\lambda_i(\alpha^*)) = 0$ в более вырожденных редко встречающихся случаях.

Для исследования типа бифуркации рассматривается расширенная матрица $\mathbf{B}$:

$$\mathbf{B}(n \times n+1) = \left.\begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial y_1} & \frac{\partial f_1}{\partial y_2} & .... & \frac{\partial f_1}{\partial y_n} & \frac{\partial f_1}{\partial \alpha} \\ ..... & ..... & & ..... & \\ \frac{\partial f_n}{\partial y_1} & \frac{\partial f_n}{\partial y_2} & ..... & \frac{\partial f_n}{\partial y_n} & \frac{\partial f_n}{\partial \alpha} \end{pmatrix}\right|_{y_i = y^s{}_i} \tag{1.12}$$

Автоколебания описываются периодическими решениями системы (1.1):

$$\tilde{y}_i(t+\tau) = \tilde{y}_i(t), \quad \forall t, \quad i = 1,...,n,$$

где $\tau$ – период.

Образом автоколебаний в фазовом пространстве системы является замкнутая изолированная траектория – предельный цикл. В системах размерности $n \geq 3$ циклы могут иметь очень сложную форму и описываться траекторией, состоящей из многих витков.

**2-й этап**. Для каждого значения параметра и найденного стационарного решения $y^s = \varphi(\alpha)$ проводится анализ матриц $\mathbf{A}$ и $\mathbf{B}$ и определяется устойчивость стационарного состояния и его тип (седло, фокус и т.д.). Находятся бифуркационные значения параметра $\alpha^*$ и выявляется тип локальной бифуркации.

Условиям (1.10) и (1.11) могут отвечать несколько различных бифуркаций. Наиболее часто встречающаяся в приложениях бифуркация, соответствующая условию (1.10) – это *седло-узловая бифуркация*. В этом случае определитель матрицы Якоби (1.8) обращается в ноль:

$$\Delta\mathbf{A} = 0, \tag{1.13}$$

и ее ранг становится равным $n-1$. При этом ранг расширенной матрицы $\mathbf{B}$ равен $n$. Эту бифуркацию легко распознать без анализа матриц $\mathbf{A}$ и $\mathbf{B}$. *В* точках

седло-узловой бифуркации кривые параметрических зависимостей (графики функций) $y^s{}_i(\alpha)$, $i=1,...,n$, делают поворот при $\alpha=\alpha^*$.

Главной бифуркацией, удовлетворяющей условию (1.11), будет *сверхкритическая бифуркация Андронова–Хопфа*. При прохождении этой бифуркации стационарная точка типа устойчивого фокуса становится неустойчивым фокусом, а вокруг нее рождается предельный цикл малого размера. Условие (1.11) – необходимое, но недостаточное для бифуркации рождения цикла. Достаточным условием здесь служит отрицательность первого ляпуновского показателя $l_1<0$, который найти даже в системах небольшой размерности нелегко. Однако для нахождения области существования автоколебаний это зачастую делать не надо. (Ниже будут описаны некоторые способы нахождения области автоколебаний.)

Итак, (1.11) – это необходимое условие возникновения автоколебаний. Обычно вместо него используют другое условие:

$$\Delta\mathbf{\Gamma}=0, \tag{1.14}$$

где $\mathbf{\Gamma}$ – это матрица Гурвица.

Для системы второго порядка $\mathbf{\Gamma}$ – это след матрицы $\mathbf{A}$ ($S_A=a_{11}+a_{22}$). Условие (1.14) легче применять в расчетах, чем равенство (1.11), поскольку не надо вычислять собственные значения матрицы $\mathbf{A}$. Однако оно более широкое, чем условие (1.11). Ему удовлетворяют все стационарные точки, для которых сумма двух собственных значений равна нулю: $\lambda_1+\lambda_2=0$. То есть, сюда попадают и искомые точки бифуркации, для которых $\mathrm{Re}\,\lambda_{1,2}=0$, и седловые точки, для которых $\lambda_1=-\lambda_2$. Отличить случай $\lambda_1=-\lambda_2$ от случая $\lambda_{1,2}=\pm i\beta$ можно по знаку определителя матрицы $\mathbf{A}$.

**3-й этап**. Далее проводится двухпараметрический анализ системы, в результате которого на плоскости двух параметров строят линии бифуркаций. При двухпараметрическом анализе стационарных состояний к системе уравнений (1.6) добавляется еще одно уравнение, описывающее данный тип бифуркации, и еще одна новая переменная $\alpha_2$ ($\alpha_1=\alpha$), являющаяся вторым активным параметром. Начальными точками для проведения двухпараметрического анализа служат точки бифуркации, выявленные в ходе однопараметрического исследования. Главными границами в химических системах являются две линии: линия кратности и линия нейтральности.

***Линия кратности.*** Для построения линии кратности к системе (1.6) дописывается уравнение $\Delta\mathbf{A}=0$:

$$\begin{cases} f_i(y_1,...,y_n,\alpha_1,\alpha_2)=0, \quad i=1,2,...,n \\ \Delta\mathbf{A}(y_1,...,y_n,\alpha_1,\alpha_2)=0. \end{cases} \tag{1.15}$$

Система (1.15) содержит $n+1$ уравнение и $n+2$ переменные и задает неявно кривую в пространстве $R^{n+2}$. Поскольку на этой кривой определитель матрицы Якоби равен нулю, то стационарные состояния на ней будут кратными корнями

нелинейной системы (1.6). Отсюда эта кривая получила название *линии кратности*. Проекция линии кратности на плоскости параметров $(\alpha_1, \alpha_2)$ разделяет области с разным числом стационарных состояний. В большинстве случаев линия кратности представляет собой линию седло-узловой бифуркации (будем обозначать $sn$). В системах с симметрией линия кратности может описывать линию бифуркации вилки. И в том и другом случае *линия кратности задает точную границу, отделяющую область множественности стационарных состояний от области существования единственного стационара*.

***Линия нейтральности.*** Другой важнейшей линией, которую строят при двухпараметрическом анализе, служит *линия нейтральности*. Она описывается системой, которая получается при добавлении к системе для стационаров (1.6) уравнения (1.14):

$$\begin{cases} f_i(y_1,...,y_n,\alpha_1,\alpha_2) = 0, \quad i = 1,2,...,n \\ \Delta\mathbf{\Gamma}(y_1,...,y_n,\alpha_1,\alpha_2) = 0. \end{cases} \tag{1.16}$$

Часто линия нейтральности представляет собой линию бифуркации Андронова–Хопфа (обозначается $h$), которая определяет границу области автоколебаний системы. Примеры химических систем, в которых можно найти область колебаний, построив линии кратности и нейтральности, не вычисляя ляпуновский показатель, будут рассмотрены ниже.

Результатом двухпараметрического анализа является построение *бифуркационной диаграммы на плоскости параметров* $(\alpha_1, \alpha_2)$ с указанием линий бифуркаций. Линии бифуркаций служат точными границами, разбивающими плоскость параметров на области с разным динамическим поведением. Для полноты картины и наглядности обычно в каждой из областей указывают схематический фазовый портрет. Такая бифуркационная диаграмма и есть *параметрический портрет системы*.

***Алгоритмы продолжения по параметру.*** Системы (1.6), (1.15), (1.16) определяют зависимость решений от параметров в неявном виде. В общем случае для получения явных зависимостей от параметра используют численные алгоритмы продолжения по параметру. Однако в некоторых случаях удается аналитически выписать формулы и по ним вычислить зависимость решений от параметров. Для этого используют специальную методику. Эта методика основывается на структуре уравнений химической кинетики. Дело в том, что хотя сами уравнения нелинейные, но большинство параметров входит в них линейно.

Рассмотрим сначала систему для нахождения стационаров (1.6) и постараемся исключить из системы (1.6) все фазовые переменные кроме одной. Если это сделать удается, то получается одно уравнение, связывающее эту переменную (возьмем для определенности $y_1$) и параметр $\alpha$:

$$f(y_1, y_2(y_1),...,y_n(y_1),\alpha) = 0, \tag{1.17}$$

а также получается цепочка формул, выражающих одни переменные через другие и параметр. Зачастую из уравнения (1.17) можно найти обратную зависимость − зависимость параметра $\alpha$ от переменной $y_1$:

$$\alpha = \phi(y_1). \tag{1.18}$$

Считая $y_1$ независимой переменной, для каждого допустимого значения $y_1$ по формуле (1.18) находим соответствующее значение (или несколько значений) параметра $\alpha$ на стационаре, и последовательно из цепочки формул вычисляем значения других переменных. Далее используя какой-либо графический редактор, нарисуем графики прямых зависимостей фазовых переменных $y_i$ от параметра. Для определения устойчивости и типа найденного стационарного решения $y_i(\alpha)$, а также для выявления точек бифуркаций вычислим элементы матрицы **A**, ее определителя, следа и собственных значений по аналитическим формулам или с помощью какого-либо алгоритма.

Для удобства проведения всех этих операций составим таблицу в редакторе EXCEL или в любой другой интегрированной среде (например, MATLAB).

**Зависимость стационарного состояния от параметра**

| $y_1 \in [0,1]$ | $\alpha$ | $y_2$ | $y_i$ | … | $\Delta$ | $\lambda_i$ | … |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $h$ | $\alpha(h)$ | $y_2(h)$ | $y_i(h)$ | … | $\Delta(h)$ | $\lambda_i(h)$ | … |
| $2h$ | $\alpha(2h)$ | $y_2(2h)$ | $y_i(2h)$ | … | $\Delta(2h)$ | $\lambda_i(2h)$ | … |
| … | … | … | … | … | … | … | … |

В первый столбец заносим значения переменной $y_1$, которая пробегает с некоторым малым шагом $h$ весь интервал допустимых значений (например, $y_1 \in [0,1]$, $h = 0.001$). Во второй столбец таблицы записываем значения параметра $\alpha$, вычисленные для каждого значения $y_1$ по формуле (1.18), и отбираем только допустимые значения параметра (например, положительные). Для каждого допустимого значения $\alpha$ вычисляем другие переменные $y_i$, определитель и собственные значения матрицы **A** и записываем в другие столбцы таблицы (см. таблицу).

Затем проводим анализ собственных значений матрицы **A**, находим интервалы значений параметра, в которых стационарное решение устойчиво и неустойчиво. Определяем и уточняем точки бифуркаций – те значения параметра, в которых действительное собственное значение или реальная часть пары комплексных собственных значений обращается в ноль. Уточнение можно произвести, используя линейную интерполяцию.

***Уточнение точки бифуркации.*** Пусть при изменении независимой переменной $y$ на очередном шаге произошла бифуркация и функция $f(y)$, определяющая бифуркацию, поменяла знак, так что:

$$f_i \times f_{i+1} < 0, \quad f_i = f(y_i), \quad f_{i+1} = f(y_{i+1}), \quad y_{i+1} = y_i + h.$$

(В качестве функции $f(y)$ может выступать определитель, след, собственное значение матрицы **A** и др.). При этом изменилось и значение параметра $\alpha$. Было $\alpha_i = \alpha(y_i)$, стало $\alpha_{i+1} = \alpha(y_{i+1})$. В качестве приближенной точки бифуркации можно взять одно из двух значений параметра: $\alpha_i$ или $\alpha_{i+1}$, то для которого соответствующая функция $f(y)$ меньше по модулю. Но такая оценка точки бифуркации может быть довольно грубой. Для более точного нахождения критического значения параметра $\alpha^*$, при котором функция $f(y^*(\alpha^*))$ обращается в ноль, на отрезке $[y_i, y_{i+1}]$ заменим функцию $f(y)$ линейной функцией. (На малом отрезке гладкие функции близки к прямой.) Получим:

$$f(y) = f(y_i) + \frac{f_{i+1} - f_i}{y_{i+1} - y_i}(y - y_i). \tag{1.19}$$

Приравнивая выражение (1.19) к нулю, найдем значение $y^*$:

$$y^* = y_i - f_i \frac{(y_{i+1} - y_i)}{(f_{i+1} - f_i)}, \tag{1.20}$$

и по формуле (1.18) вычислим соответствующее значение $\alpha^*$.

*Результатом однопараметрического анализа является бифуркационная диаграмма, показывающая зависимость стационарного состояния от параметра, с отмеченными точками бифуркаций и указанными интервалами устойчивости и неустойчивости стационарного решения.*

***Двухпараметрический анализ***. Если в ходе однопараметрического анализа стационарных состояний были найдены точки бифуркаций, то можно провести двухпараметрический анализ, результат которого состоит в построении линий бифуркаций на плоскости двух параметров. Для проведения двухпараметрического анализа выбираем второй активный параметр, и в зависимости от типа выявленных бифуркаций решаем системы (1.14) и/или (1.15), описывающие линии кратности и нейтральности. Решение систем проводится по методике, описанной выше. Сначала исключаем из системы $n-1$ переменную и один из параметров, и составляется уравнение вида (1.17), связывающее одну переменную с одним параметром. Далее рассчитываем и составляем аналогичную таблицу. Из таблицы выбираем два столбца для значений параметров, и на плоскости $(\alpha_1, \alpha_2)$ строим графики $\alpha_2(\alpha_1)$ для линий нейтральности и/или линии кратности.

Построение линий кратности и нейтральности на плоскости двух параметров позволяет найти ***область существования единственного устойчивого стационара.*** Именно в этой области параметров работают все промышленные реактора. В этой области ищутся оптимальные значения параметров, при которых выход продукта реакции максимален при наименьших затратах.

***Область множественности*** стационарных состояний ограничена линиями кратности, которые, как правило, соответствуют седло-узловой бифуркации. Анализ знака определителя позволяет определить, по какую сторону линии кратности находится область множественности.

***Область автоколебаний.*** Для нахождения области существования автоколебаний надо посмотреть на взаимное расположение линий кратности и нейтральности. Та часть линии нейтральности, которая выходит за линию кратности, ограничивает область, в которой существует *единственное неустойчивое стационарное состояние и окружающий его предельный цикл*, то есть область существования автоколебаний. В этом случае линия нейтральности соответствует бифуркации Андронова-Хопфа.

Автоколебания могут существовать и в области множественности стационарных состояний, но для выявления такой возможности требуется дополнительный более сложный анализ.

***Параметрический портрет.*** *Бифуркационная диаграмма на плоскости двух параметров* $(\alpha_1, \alpha_2)$ *с проведенными линиями бифуркаций, разбивающими плоскость на области с разным динамическим поведением, и указанными в каждой области фазовыми портретами является параметрическим портретом системы.*

Во многих химических системах только две линии: кратности и нейтральности, определяют параметрический портрет реакции.

Ниже рассматриваются гетерогенно-каталитические реакции, происходящие на поверхности катализатора, и по указанной методике строятся их параметрические портреты. Системы имеют размерность от одного до трех.

Во всех моделях введены следующие обозначения:

X, Y, Z − вещества в газовой фазе, [X], [Y], [Z] − адсорбированные на поверхности вещества, $x$, $y$, $z$ − нормированные поверхностные концентрации веществ, изменяющиеся от 0 до 1; * − свободный адсорбционный центр на поверхности, $T$ − температура.

## 1.2. Автокаталитический триггер

Рассмотрим реакцию, в которой вещество Y адсорбируется на поверхность катализатора и десорбируется с поверхности в соответствии с двумя механизмами в зависимости от наличия свободных мест. Кинетическая схема реакции имеет вид:

$$1)\ Y + * \underset{k_{-1}}{\overset{k_1}{\Leftrightarrow}} [Y], \quad 2)\ [Y] + 2* \overset{k_2}{\rightarrow} 3* + Y, \tag{1.21}$$

Температура $T$ и давление газа $P_Y$ в газовой фазе поддерживаются постоянными. Тогда кинетическая модель, соответствующая схеме (1.21) и подчиняющаяся закону действующих масс, описывается одним автономным уравнением ОДУ:

$$\frac{dy}{dt} = k_1(1-y) - k_{-1}y - k_2(1-y)^2 y, \qquad (1.22)$$

Параметрами модели являются константы скоростей элементарных стадий: $k_1$, $k_{-1}$, $k_2$. Построим параметрический портрет системы на плоскости двух параметров, например $(k_1, k_{-1})$.

Стационарные состояния находятся из нелинейного кубического уравнения:

$$k_1(1-y) - k_{-1}y - k_2(1-y)^2 y = 0, \qquad (1.23)$$

которое в зависимости от значений параметров может иметь от одного до трех корней.

Сначала проведем однопараметрический анализ и найдем зависимость стационарного решения от одного из параметров, например, $k_1$. Из уравнения (1.23) легко находится обратная зависимость параметра $k_1$ от значения $y$:

$$k_1(y) = k_{-1}y(1-y) + k_2(1-y)y. \qquad (1.24)$$

Для определения устойчивости стационарного состояния вычислим значение производной правой части:

$$f_y' = -k_1(y) - k_{-1} - k_2(1-y)^2 + 2k_2 y(1-y). \qquad (1.25)$$

Изменяя с некоторым шагом переменную $y$ на отрезке [0,1], по формуле (1.24) вычислим соответствующие значения параметра $k_1(y)$, а по формуле (1.25) – производную $f_y'(y, k_1(y))$.

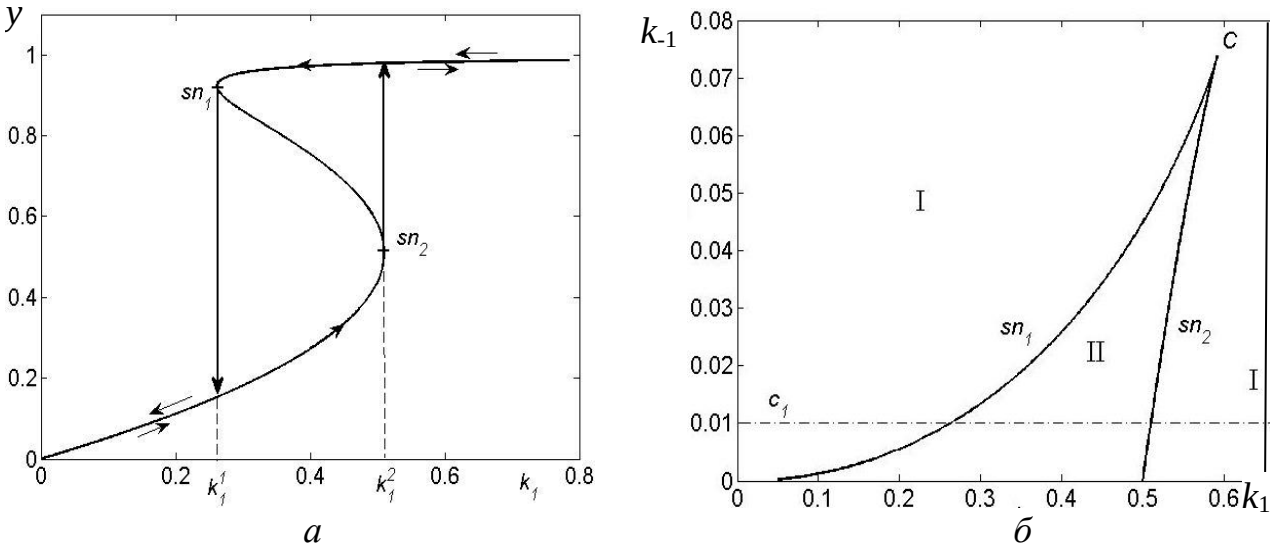



Рис. 1.1. Бифуркационные диаграммы:
*а* – зависимость стационара от параметра $k_1$, $k_{-1}$=0,01, $k_2$=2;
*б* – параметрический портрет системы (1.22) при $k_2$=2

Составим таблицу, в которой первый столбец – это значения переменной $y$, второй столбец – это значения $k_1(y)$ и третий столбец – это значения $f_y'(y, k_1)$.

При $f'_y(y,k_1)<0$ – стационар устойчив, при $f'_y>0$ – неустойчив. Значения $k_1(y)$, в которых $f'_y(y,k_1)=0$, представляют собой точки седло-узловой бифуркации. Уточним их по формуле (1.20), в которой в качестве функции $f(y)$, описывающей бифуркацию, надо взять производную $f'_y(y)$.

Нарисуем график зависимости стационарного решения $y$ от параметра $k_1$ (рис. 1.1 *а*). Мы видим, что кривая зависимости имеет две точки поворота $sn_1$ и $sn_2$, отвечающие седло-узловой бифуркации. Между точками поворота находится область существования 3-х стационарных состояний. Состояния с наибольшей и наименьшей концентрациями – устойчивы, средний стационар – неустойчив.

Теперь проведем двухпараметрический анализ от параметров $k_1$, $k_{-1}$ и нарисуем линию кратности. Соответствующая система имеет вид:

$$\begin{aligned} &f(y)=k_1(1-y)-k_{-1}y-k_2(1-y)^2y=0,\\ &f_y'(y)=-k_1-k_{-1}-k_2(1-y)^2+2k_2y(1-y)=0. \end{aligned} \tag{1.26}$$

Исключим из системы (1.26) параметр $k_1$. Для этого второе уравнение умножим на $(1-y)$ и сложим с первым уравнением. Из полученного уравнения выразим параметр $k_{-1}$ через переменную $y$ и параметр $k_2$. Получим:

$$k_{-1}(y)=k_2(1-y)^2(2y-1). \tag{1.27}$$

Теперь изменяя с некоторым шагом значение $y$ на отрезке [0,1], для каждого значения переменной по формуле (1.27) вычислим значение параметра $k_{-1}$, а затем – значение параметра $k_1(y,k_{-1}(y))$ по формуле (1.24). На плоскости $(k_1,k_{-1})$ построим линию кратности (рис. 1.1, *б*). На ней проведены линии седло-узловой бифуркации $sn_1$ и $sn_2$, на которых производная $f_y'(y,k_1,k_{-1})=0$. Эти линии образуют «клюв» с острием в точке *C*, и разбивают всю плоскость параметров на две области. Для значений параметров, лежащих внутри «клюва» (область II), в системе имеются три положения равновесия – два устойчивых и одно неустойчивое, а для лежащих вне «клюва» (область I) – единственное устойчивое состояние равновесия. Состояния равновесия попарно сливаются на бифуркационных линиях $sn_1$ и $sn_2$. Однопараметрическое исследование на рис. 1.1, *а* соответствует разрезу бифуркационной диаграммы по прямой $c_1$ на рис. 1.1, *б*.

Точка ***C*** отвечает слиянию всех трех положений равновесия в одно $y^*$. То есть $y^*$– трехкратный корень уравнения (1.23). Точка ***C*** описывает *бифуркацию ко-размерности два – трехкратное равновесие*. В точке ***C*** одновременно обращаются в нуль первая и вторая производные функции $f(y)$

$$f(y^*)=f'_y(y^*)=f''_{yy}(y^*)=0,$$

но отлична от нуля третья производная: $f'''_{yyy}(y^*) \neq 0$.

### 1.3. Реакция окисления CO, механизм Лэнгмюра–Хиншельвуда

Реакция каталитического окисления CO является одной из самых ярких реакций гетерогенного катализа, демонстрирующих сложную нелинейную динамику. Еще в 70-х годах прошлого века на катализаторах платиновой группы были обнаружены множественность стационарных состояний и автоколебания скорости реакции.

В основе этой реакции лежит кинетическая схема Лэнгмюра–Хиншельвуда, состоящая из трех стадий:

$$1)\ CO + * \underset{k_{-1}}{\overset{k_{+1}}{\Leftrightarrow}} [CO], \quad 2)\ O_2 + 2* \underset{k_{-2}}{\overset{k_{+2}}{\Leftrightarrow}} 2[O], \quad 3)\ [CO] + [O] \xrightarrow{k_3} CO_2 + 2*. \qquad (1.28)$$

Здесь $*$ – свободный адсорбционный центр на поверхности; $[CO]$ и $[O]$ – адсорбированные молекула CO и атом кислорода, соответственно. Температура $T$ поддерживается постоянной, парциальные давления газов $P_{CO}$ и $P_{O_2}$ в газовой фазе постоянные.

Схеме (1.28) отвечает математическая модель, описывающая изменение концентраций $x$ и $y$ адсорбированных веществ [CO] и [O] сответственно:

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= k_1(1-x-y) - k_{-1}x - k_3xy, \\ \frac{dy}{dt} &= k_2(1-x-y)^2 - k_{-2}y^2 - k_3xy, \end{aligned} \qquad (1.29)$$

Справедливы ограничения: $0 \le x \le 1, \ \ 0 \le y \le 1, \ \ \ 0 \le x + y \le 1.$

Легко показать, используя критерий Бендиксона, что в системе (1.29) не существует предельных циклов. Действительно, дифференцируя правую часть первого уравнения по $x$, а второго – по $y$, выпишем выражение для следа:

$$S(x,y) = -k_1 - k_{-1} - k_3y - 2k_2(1-x-y) - 2k_{-2}y - k_3x < 0. \qquad (1.30)$$

Мы видим, что след не меняет знак при всех допустимых значениях переменных, а значит на фазовой плоскости $(x, y)$ отсутствуют предельные циклы. Однако система (1.29) может иметь несколько стационарных состояний. На плоскости двух внешних параметров $(k_1, k_2)$, построив линию кратности, найдем область множественности. Сначала проведем однопараметрический анализ.

Стационарные состояния удовлетворяют системе уравнений:

$$\begin{aligned} &k_1(1-x-y) - k_{-1}x - k_3xy = 0, \\ &k_2(1-x-y)^2 - k_{-2}y^2 - k_3xy = 0. \end{aligned} \qquad (1.31)$$

Из первого уравнения выразим переменную $x$ через $y$ и подставим во второе уравнение, получим:

$$x = \frac{k_1(1-y)}{k_1 + k_{-1} + k_3 y} \tag{1.32}$$

$$k_2(1-y)^2(k_{-1}+k_3y)^2 - k_{-2}y^2(k_1+k_{-1}+k_3y)^2 - (k_1+k_{-1}+k_3y)k_1k_3y(1-y) = 0. \tag{1.33}$$

Из уравнения (1.33) выразим параметр $k_2$ через остальные параметры и переменную $y$:

$$k_2(y) = \frac{k_{-2}y^2(k_1+k_{-1}+k_3y)^2 + (k_1+k_{-1}+k_3y)k_1k_3y(1-y)}{(1-y)^2(k_{-1}+k_3y)^2}. \tag{1.34}$$

Пробегая с некоторым шагом весь диапазон значений переменной $y$ от 0 до 1, по формулам (1.32) и (1.34) найдем соответствующие значения переменной $x$ и параметра $k_2$. Для исследования устойчивости стационарных решений, выпишем элементы матрицы Якоби и вычислим ее след и определитель на стационаре:

$$a_{11} = -k_1 - k_{-1} - k_3 y; \qquad a_{12} = -k_1 - k_3 x \quad ,$$

$$a_{21} = -2k_2(1-x-y) - k_3 y; \qquad a_{22} = -2k_2(1-x-y) - 2k_{-2}y - k_3 x,$$

$$\begin{aligned}\Delta\mathbf{A} = a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21} = (k_1+k_{-1}+k_3y)(2k_2(1-x-y)+2k_{-2}y+k_3x) - \\ -(k_1+k_3x)(2k_2(1-x-y)-k_3y)\end{aligned} \tag{1.35}$$

$$S_A = a_{11} + a_{22} = -2k_2(1-x-y) - 2k_{-2}y - k_3x - k_1 - k_{-1} - k_3y < 0 \tag{1.36}$$

Поскольку след при всех допустимых значениях переменных – отрицательный, то устойчивость стационарных состояний определяется знаком определителя. Если $\Delta_A > 0$, то стационарное состояние устойчиво и имеет тип узла. Если $\Delta_A < 0$, то стационарное состояние является седлом. Определитель обращается в ноль: $\Delta_A = 0$ в точках седло-узловой бифуркации *sn*. По формуле (1.20) уточним две имеющиеся точки $sn_1$ и $sn_2$.

Нарисуем графики зависимости концентраций в стационарном состоянии от параметра $k_2$: $x(k_2)$ и $y(k_2)$, отметим точки бифуркации (рис. 1.2, *а*). Мы видим, что на графике имеется область существования 3-х стационарных состояний. Она находится между точками седло-узловой бифуркации $sn_1$ и $sn_2$. В этой области модель представляет собой триггер: два крайних состояния равновесия устойчивы и имеют тип узла, а среднее – неустойчиво и имеет тип седла.

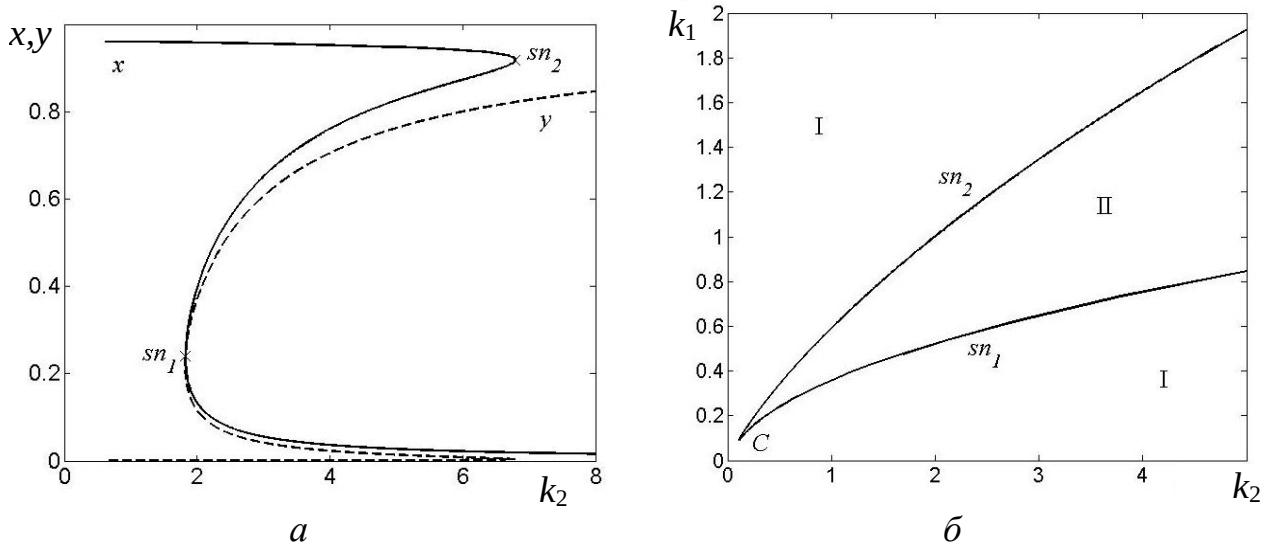



Рис. 1.2. Бифуркационные диаграммы при $k_{-1}$=0,04, $k_{-2}$=0,02, $k_3$=10:
*а* – зависимость стационара от параметра $k_2$, $k_1$=1; *б* – параметрический портрет системы (1.29)

Теперь, дописав к системе для стационаров (1.31) уравнение $\Delta_A = 0$ и решив полученную систему, построим линию кратности. Для этого в третье уравнение системы $\Delta_A(x, y, k_1, k_2) = 0$ подставим зависимость $x(y)$ (1.32). Из полученного соотношения выразим параметр $k_2$ через $y$ и параметр $k_1$, получим:

$$k_2(y, k_1) = (k_1 + z)\frac{2k_{-2}y(k_1 + z)^2 + (k_1 + k_{-1})k_1k_3 + k_1k_3{}^2y^2}{2z(1-y)\big(k_1k_3(1-y) - z(k_1 + z)\big)}. \qquad (1.37)$$

Здесь $z = 1 - x - y$. Приравняем правые части равенств (1.34) и (1.37) друг к другу. Из полученного уравнения найдем явное выражение параметра $k_1$ от $y$. Для каждого значения $y \in [0,1]$ сначала вычисляем значение параметра $k_1(y)$, затем по формуле (1.37) вычисляем значение параметра $k_2(y, k_1)$, и, откладывая на плоскости $(k_2, k_1)$ полученные точки, построим линию кратности.

На рис. 1.2, *б* представлен параметрический портрет системы (1.29) на плоскости параметров $(k_2, k_1)$. Он аналогичен параметрическому портрету модели (1.22), показанному на рис. 1.1, *б*, обозначения те же. Область множественности стационарных состояний (II) находится внутри криволинейного угла.

## 1.4. Автокаталитический осциллятор с буферной стадией

Добавим к схеме (1.21) буферную стадию. Кинетическая схема рассматриваемой гетерогенно-каталитической системы примет вид:

$$1)\ X + * \underset{k_{-1}}{\overset{k_{+1}}{\Leftrightarrow}} [X], \quad 2)\ [X] + 2* \overset{k_2}{\rightarrow} 3* + X, \quad 3)\ Y + * \underset{k_{-3}}{\overset{k_{+3}}{\Leftrightarrow}} [Y], \qquad (1.38)$$

Схеме (1.38) отвечает математическая модель, описывающая изменение концентраций $x$ и $y$ адсорбированных веществ $[X]$ и $[Y]$:

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= k_1 z - k_{-1}x - k_2 z^2 x, \\ \frac{dy}{dt} &= k_3 z - k_{-3}y. \end{aligned} \qquad (1.39)$$

Здесь $z = 1 - x - y$ – концентрация свободных мест.

Справедливы ограничения: $0 \le x \le 1, \quad 0 \le y \le 1, \quad 0 \le x + y \le 1.$

Система (1.39) в зависимости от значений параметров может иметь от одного до трех стационаров и демонстрировать автоколебания. Построим параметрический портрет модели. Проведем линии кратности и нейтральности на плоскости любых двух параметров, например, $(k_1, k_{-1})$.

Стационарные состояния находятся из системы уравнений:

$$\begin{aligned} & k_1(1-x-y) - k_{-1}x - k_2 x(1-x-y)^2 = 0, \\ & k_3(1-x-y) - k_{-3}y = 0. \end{aligned} \qquad (1.40)$$

Из второго уравнения выразим $y$ через $x$ и подставим в первое уравнение, из которого получим зависимость параметра $k_1$ от других параметров и переменной $x$:

$$y(x) = (1-x)\frac{k_3}{k_3 + k_{-3}}, \qquad k_1 = \frac{k_{-1}x + k_2 x(1-x-y)^2}{(1-x-y)}. \qquad (1.41)$$

Выпишем элементы матрицы Якоби **A**, ее след $S_A$ и определитель $\Delta A$:

$$a_{11} = -k_1 - k_{-1} - k_2(1-x-y)^2 + 2k_2 x(1-x-y); \quad a_{12} = -k_1 + 2k_2 x(1-x-y);$$
$$a_{21} = -k_3; \qquad a_{22} = -k_3 - k_{-3};$$

$$\begin{aligned} \Delta A = a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21} &= k_{-3}(k_1 + k_{-1} + k_2(1-x-y)^2 - 2k_2 x(1-x-y)) + \\ &+ k_3(k_{-1} + k_2(1-x-y)^2), \end{aligned} \qquad (1.42)$$

$$S_A = -k_1 - k_{-1} - k_2(1-x-y)^2 + 2k_2 x(1-x-y) - k_{-3} - k_3.$$

Подставим функцию $y(x)$ (1.41) в уравнения, определяющие линию нейтральности ($S_A = 0$) и линию кратности ($\Delta_A = 0$), и тоже выразим параметр $k_1$ через другие параметры и переменную $x$ и приравняем поочередно к функции $k_1$ (1.41). Из полученных равенств найдем зависимости $k_{-1}(x)$ на линиях кратности и нейтральности:

$$S_A = 0 \Rightarrow \tilde{k}_{-1} = \frac{(1-x-y(x))[k_2(1-x-y(x))(2x+y(x)-1) - k_3 - k_{-3}]}{(1-y(x))}, \qquad (1.43)$$

$$\Delta_A = 0 \quad \Rightarrow \quad \tilde{\tilde{k}}_{-1} = \frac{k_2(1-x-y(x))^2[x\delta - (1-x-y(x))]}{[\delta x + (1-x-y(x)]}, \qquad (1.44)$$

где $\delta = k_{-3}/(k_{-3}+k_3)$.

Теперь, изменяя переменную $x$ в диапазоне от 0 до 1 с некоторым шагом, найдем соответствующие значения $y(x)$ из (1.41), и вычислим по формулам (1.43) и (1.44) значения параметра $k_{-1}(x)$ на линиях кратности и нейтральности. Затем, используя формулу (1.41) найдем значения параметра $k_1$. Отмечая на плоскости $(k_1, k_{-1})$ найденные точки, построим линии кратности и нейтральности и проанализируем их взаимное расположение.

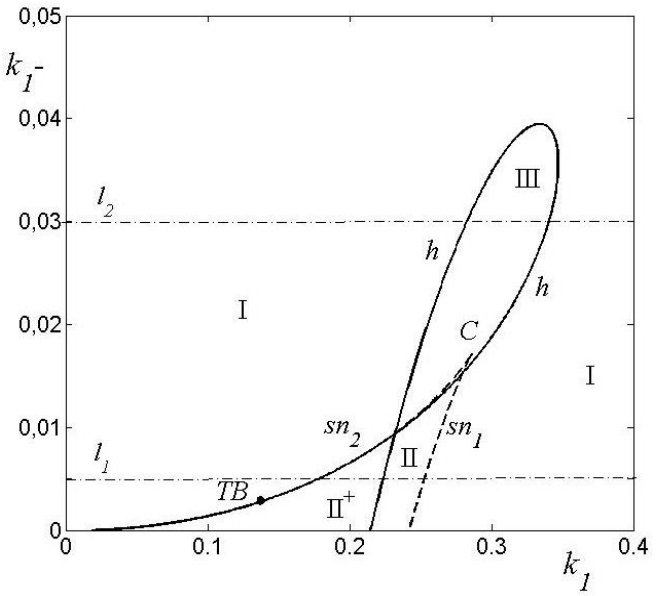



Рис. 1.3. Параметрический портрет системы (2.34) ($\kappa_2$=2; $\kappa_{-3}$=0,003; $\kappa_3$=0,0032):
$sn_1$, $sn_2$ – линии седло-узловой бифуркации, $C$ – точка бифуркации ко-размерности 2 «трехкратное равновесие»; $TB$ – точка бифуркации ко-размерности 2 Такенса–Богданова

Параметрический портрет системы (1.39) представлен на рис. 1.3. Автоколебания система имеет в области III (внутри «петли»), где существует единственное неустойчивое стационарное состояние. Область колебаний ограничена линией сверхкритической бифуркации Андронова–Хопфа $h$. Область множественности стационарных состояний расположена ниже области автоколебаний. В области II существует три стационарных состояния, два из которых устойчивы, в области $II^+$ также существует три состояния, одно из них устойчиво. Границами области множественности являются линии седло-узловой бифуркации $sn_1$, $sn_2$, которые сливаются в точке $C$ – точке бифуркации ко-размерности 2 «трехкратное равновесие». Линия $sn_2$ на диаграмме 1.3 практически сливается с линией нейтральности $h$. Пересечение этих линий происходит в точке $TB$ – точке бифуркации ко-размерности 2 Такенса–Богданова, где матрица Якоби **A** имеет два нулевых собственных значения. На рис. 1.4 приведены результаты однопараметрического исследования при изменении параметра $k_1$ для двух значений параметра $k_{-1}$, соответствующих разрезам по прямым $l_1$ и $l_2$ на диаграмме. Одна из этих прямых $l_1$ пересекает область множественности, другая линия $l_2$ – область автоколебаний. В первом случае мы видим существование области множественности стационарных состояний (рис. 1.4, *а*). Она находится между двумя точками седло-узловой бифуркации $sn_1$, $sn_2$.

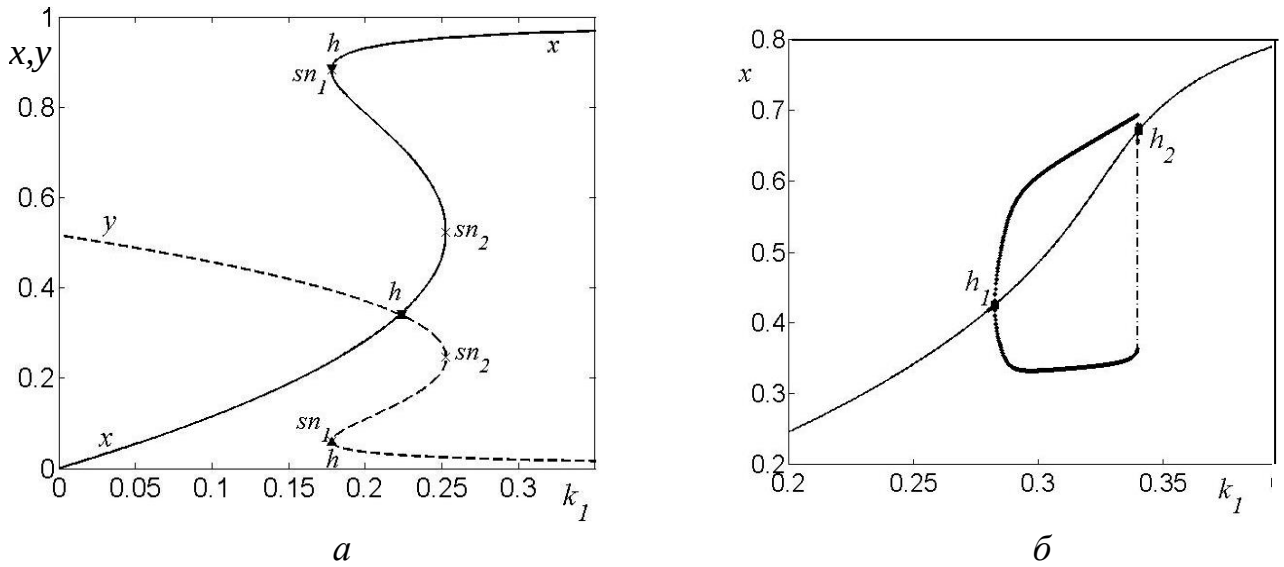



Рис. 1.4. Зависимость стационарных состояний от параметра $k_1$ ($k_2$=2, $k_{-3}$=0,003, $k_3$=0,0032): *а* – графики при $k_{-1}$=0,005; *б* – графики при $k_{-1}$=0,03

Вычисляя по формулам (1.42) след и определитель матрицы Якоби на стационаре, определим устойчивость каждого стационарного состояния. В точках бифуркации, обозначенных через *h* (рис. 1.4, *а*), след обращается в ноль и собственные значения – чисто мнимые. Однако в данном случае эти бифуркации не являются сверхкритическими бифуркациями Андронова–Хопфа, и не приводят к возникновению устойчивых автоколебаний.

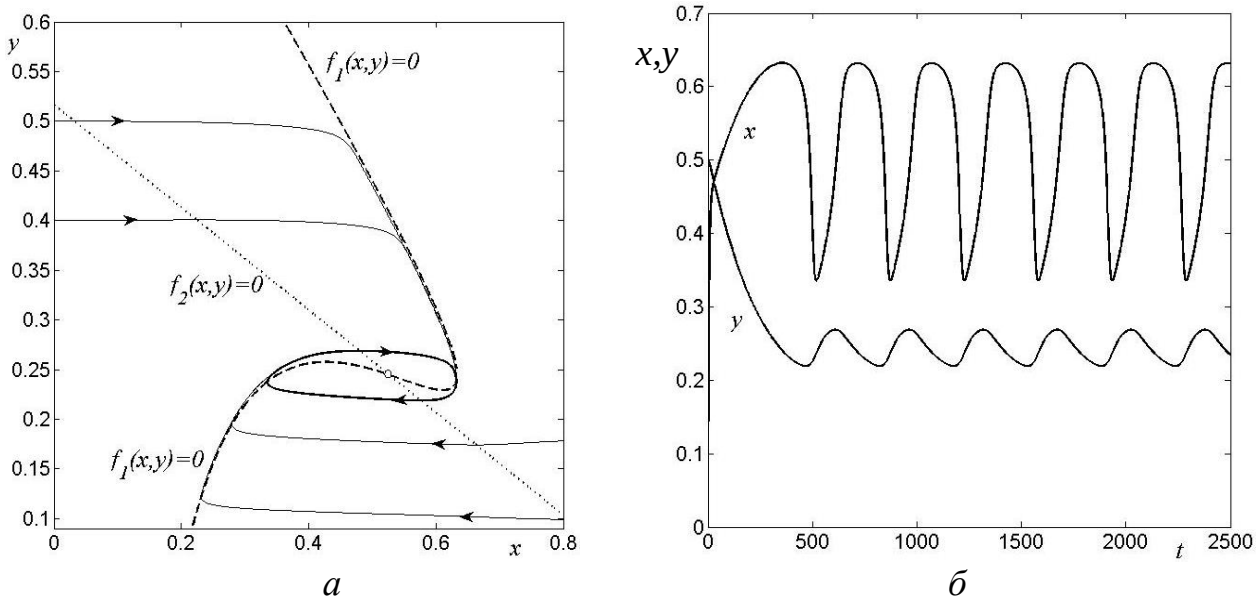



Рис. 1.5. Динамика системы (1.39) при $k_2$=2; $k_{-3}$=0,003; $k_3$=0,0032; $k_{-1}$=0,03; $k_1$=0,3: *а* – фазовый портрет системы в области автоколебаний; *б* – релаксационные колебания

На рис. 1.4, *б* показана зависимость стационара $x$ от параметра $k_1$ для второго набора параметров, когда прямая $l_2$ пересекает область колебаний.

Отмечены минимумы и максимумы переменной $x$ в автоколебаниях. Точки $h_1$ и $h_2$ соответствуют точкам мягкой сверхкритической бифуркации Андронова–Хопфа, однако, из-за наличия в системе малого параметра и особого расположения изоклин, амплитуда родившихся колебаний растет очень резко с изменением параметра, особенно вблизи правой точки бифуркации $h_2$. Такую бифуркацию называют иногда *взрывной*.

На рис. 1.5, *а* показан фазовый портрет рассматриваемой системы в области автоколебаний. Пунктирными линиями проведены изоклины, тонкими линиями отмечены некоторые траектории, предельный цикл показан жирной линией. Мы видим, что одна из изоклин имеет *S*-образный характер, а вторая изоклина пересекает первую в неустойчивой части. Форма цикла характерна для систем с малым параметром. Вид релаксационных колебаний представлен на рис. 1.5, *б*.

## 1.5. Термокинетические автоколебания

Рассмотрим простейшую модель экзотермической реакции первого порядка, происходящей в реакторе идеального смещения, которая при определенных условиях может демонстрировать как множественность стационарных состояний, так и автоколебания. Система уравнений модели для изменения концентрации $x$ и температуры $T$ внутри реактора имеет вид:

$$\frac{dx}{dt} = \gamma(x^0 - x) - k\exp(-E/(RT)) \cdot x,$$

$$\frac{dT}{dt} = \gamma(T^0 - T) + \beta \cdot k\exp(-E/(RT)) \cdot x + \alpha_1(T^s - T),$$

$$\gamma = q/V, \quad \beta = \frac{-\Delta H}{c_\rho \cdot \rho}, \quad \alpha_1 = \frac{h \cdot S}{c_\rho \cdot \rho \cdot V},$$

где $x^0$ и $T^0$ – концентрация и температура на входе в реактор; $q$ – скорость потока; $T^s$ – температура стенок; $V$, $S$ – объем и площадь стенок реактора; $\rho$, $c_\rho$ – плотность и теплоемкость реакционной смеси; $h$ – коэффициент теплоотдачи; $-\Delta H$ – тепловой эффект реакции.

Объединим во втором уравнении два линейных члена, описывающих теплоотток из реактора. Рассматриваемая система примет вид:

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= \gamma(x^0 - x) - k\exp(-E/(RT)) \cdot x, \quad \gamma = q/V, \\ \frac{dT}{dt} &= \alpha(T^0 - T) + \beta \cdot k\exp(-E/(RT)) \cdot x, \end{aligned} \tag{1.45}$$

где $\alpha$ – эффективный коэффициент теплоотдачи; $\beta$ – эффективный коэффициент тепловыделения; $T^0$ – эффективная внешняя температура.

Понятно, что в изотермическом случае (при интенсивном теплообмене с внешней средой), когда температура в реакторе постоянная и равна внешней

температуре, данная реакция демонстрирует единственное устойчивое стационарное состояние. Проведем параметрический анализ системы (1.45) и найдем области множественности стационарных состояний и автоколебаний. Из первого уравнения для стационаров исключим переменную $x$, получим:

$$x = \frac{\gamma \cdot x^0}{\gamma + k\exp(-E/(RT))}. \tag{1.46}$$

Из второго уравнения найдем зависимость какого-либо параметра от переменной $T$, например, $\alpha(T)$:

$$\alpha = \frac{\beta \cdot k\exp(-E/(RT)) \cdot \gamma \cdot x^0}{\left(\gamma + k\exp(-E/(RT))\right)(T - T^0)}. \tag{1.47}$$

Выберем некоторые значения параметров $k$ и $E$, характеризующих реакцию, концентрацию $x^0$ на входе положим равной 0,5, скорость потока $\gamma > 5$, а внешнюю температуру – больше 400 К, чтобы скорость реакции не была мала. Ясно, что интересные нелинейные явления могут возникнуть только при достаточно большом тепловыделении, поэтому положим $\beta > 1000$. Базовый набор параметров будет иметь вид:

$$k = 10^7 c^{-1}, \quad E = 14000 \frac{кал}{моль \cdot град}, \quad R = 1{,}987,$$

$$x^0 = 0{,}5, \quad T^0 = 450, \quad \beta = 1200, \quad \gamma > 5, \quad \alpha > \gamma$$

Выпишем элементы матрицы Якоби **A** на стационаре:

$$a_{11} = -\gamma - k\exp(-E/(RT)) < 0, \quad a_{12} = -\frac{E}{RT^2} k\exp(-E/(RT))x(T) < 0,$$

$$a_{21} = \beta \cdot k\exp(-E/(RT)) > 0, \qquad a_{22} = -\alpha + \frac{E}{RT^2}\beta \cdot k\exp(-E/(RT))x(T),$$

$$S_A = a_{11} + a_{22},$$

$$\Delta_A = \gamma \cdot \alpha + \alpha \cdot k\exp(-E/(RT)) - \gamma\frac{E}{RT^2}\beta \cdot k\exp(-E/(RT))x(T) =$$

$$= -\alpha[-\gamma - k\exp(-E/(RT)) + \frac{\gamma}{\alpha}(\frac{E}{RT^2}\beta \cdot k\exp(-E/(RT))x(T) - \alpha + \alpha)] = \tag{1.48}$$

$$= -\alpha[a_{11} + \frac{\gamma}{\alpha}a_{22} + \gamma].$$

Приравнивая к нулю последовательно след $S_A$ и определитель $\Delta_A$ матрицы **A**, нетрудно найти параметрические зависимости для линии нейтральности и линии кратности на плоскости двух параметров. В качестве основных двух параметров возьмем коэффициенты $\alpha$ и $\gamma$. Из выражения для определителя (1.48) следует, что автоколебания могут возникнуть только при $\alpha > \gamma$. Действительно, предельный цикл окружает стационарную точку типа неустойчивого узла или фокуса, у которой $S_A > 0, \quad \Delta_A > 0$. Но если $S_A > 0$, то,

как видно из последнего равенства в (1.48), при $\alpha \le \gamma$ $\Delta_A < 0$, то есть стационарная точка имеет тип седла. Поскольку $a_{11} < 0$, то след $S_A$ может стать больше нуля за счет элемента $a_{22}$, который может стать положительным при достаточно большом коэффициенте $\beta$.

Параметрические зависимости для линии кратности и линии нейтральности на плоскости параметров ($\gamma, \alpha$) находим следующим образом. Для каждого значения $T \in (T^0,\ 1000]$ последовательно вычисляем:

1) Для линии кратности:

***а***) $\gamma(T) = \dfrac{k \cdot \exp(-E/(RT))}{(E(T - T^0)/(RT^2) - 1)}$;

***б***) $x(\gamma, T)$ – по формуле (1.46);

***в***) $\alpha(\gamma, T)$ – по формуле (1.47).

2) Для определения линии нейтральности решаем квадратное уравнение:

$$A \cdot \gamma^2 + B \cdot \gamma + C = 0,$$

$$A = 1,\ B = k \cdot \exp(-\frac{E}{RT})[2 + \beta \cdot x_0\left(\frac{1}{T - T^0} - \frac{E}{RT^2}\right)],\ C = k^2 \cdot \exp(-\frac{2E}{RT})$$

и находим его корни: $\gamma_{1,2}(T) = 0{,}5(-B \pm \sqrt{B^2 - 4AC})$.

Далее по формулам (1.46) и (1.47) соответственно вычисляем $x(\gamma_{1,2}, T)$ и $\alpha(\gamma_{1,2}, T)$. Параметрический портрет реакции на плоскости ($\gamma, \alpha$) представлен на рис. 1.6.

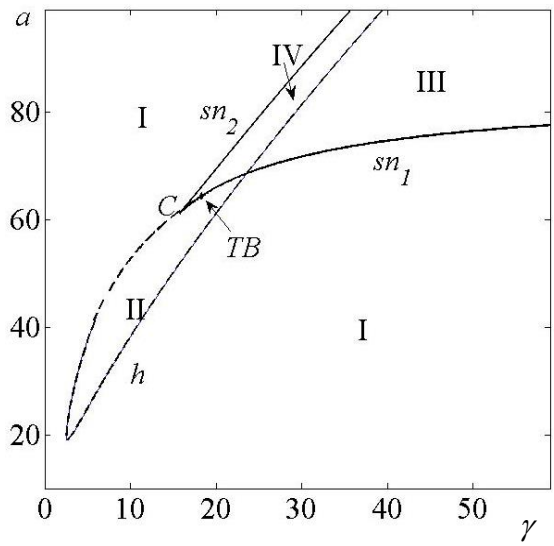



Рис. 1.6. Параметрический портрет модели (1.45) на плоскости ($\gamma,\alpha$):
II – область автоколебаний;
III, IV – области множественности стационарного состояния;
I – область единственности и устойчивости стационарного состояния

В области I существует единственное устойчивое стационарное состояние; в области II существует устойчивый предельный цикл, окружающий единственную неустойчивую стационарную точку; в областях III и IV система имеет три стационарных состояния. Часть линии нейтральности $h$, которая

проходит внутри области множественности, заключенной между двумя ветвями линии кратности $sn_1$ и $sn_2$, не является бифуркацией рождения цикла, а приводит лишь к потере устойчивости стационара. Так что в области III существует два неустойчивых стационара и один устойчивый, а в области IV – наоборот: один неустойчивый и два устойчивых стационара. *C* и *TB* – это точки бифуркации ко-размерности 2. Точка *C* соответствует трехкратному корню и является точкой возврата на линии кратности, а в точке *TB* пересекаются линии кратности и нейтральности и два собственных значения матрицы **A** обращаются в ноль.

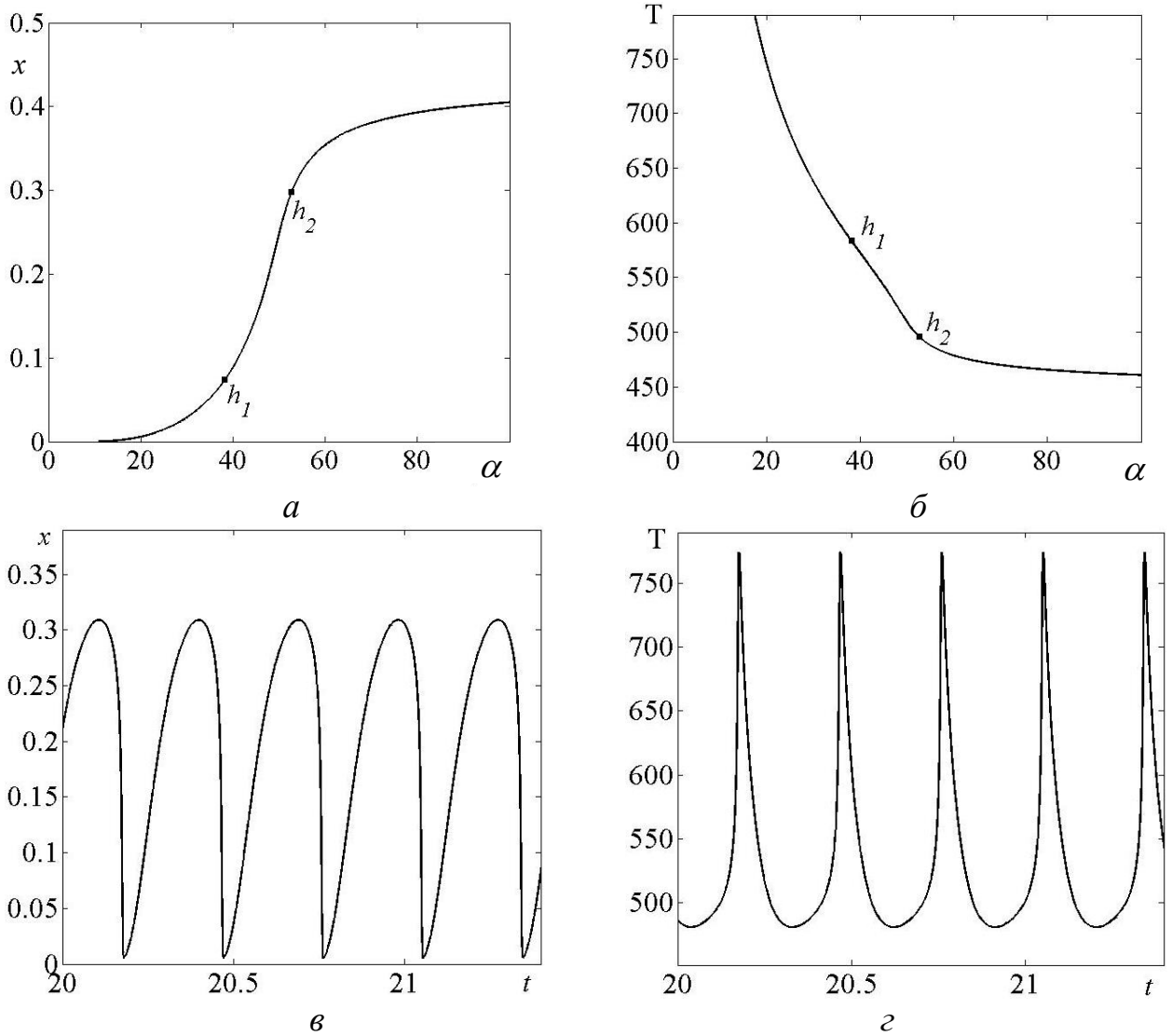



Рис. 1.7. Динамика модели (1.45) при $\gamma$=10:
*а, б* – зависимость стационарных значений концентрации *x* и температуры T внутри реактора от параметра $\alpha$; *в, г* – вид термокинетических колебаний при $\alpha$=45

Зафиксируем параметр $\gamma$ и сделаем вертикальный разрез на рис. 1.6 так, чтобы прямая разреза пересекала область автоколебаний II. Зависимость стационарных состояний от параметра $\alpha$ представлена на рис. 1.7, *а* и *б*. Колебания начинаются и заканчиваются в точках сверхкритической

бифуркации Андронова–Хопфа $h_1$ и $h_2$. Вид колебаний концентрации вещества *X* и температуры *T* внутри реактора для некоторого набора параметров показан на рис. 1.7, *в* и *г*.

Механизм термокинетических колебаний заключается в следующем. При высокой концентрации вещества *X* в реакторе и плохом теплоотводе начинает резко расти температура внутри реактора, при этом возрастает скорость реакции, а значит, и скорость расхода вещества *X*. Поскольку скорость потока невелика, то это приводит к тому, что в реакторе начинает падать концентрация *x*, с другой стороны, при увеличении разности температур $T - T_0$ возрастает скорость теплоотвода, а значит, и температура начинает падать.

## 1.6. Автоколебания, вызванные процессами окисления и восстановления поверхности катализатора в ходе реакции

Впервые механизм автоколебаний, вызванный процессами окисления-восстановления поверхности в ходе реакции, был предложен в работах авторов *Sales B.C., Turner J.E., Maple M.B.*, где исследовались кинетические колебания реакции окисления CO на палладиевой проволоке. В соответствии с предложенным механизмом авторами была построена и математическая модель реакции окисления CO, получившая название модели *STM*. Рассмотрим систему, близкую к модели *STM*.

Кинетическая схема реакции строится на основе механизма Лэнгмюра–Хиншельвуда и дополняется стадиями, отвечающими за окисление-восстановление поверхности:

$$1)\ CO + * \underset{k_{-1}}{\overset{k_{+1}}{\Leftrightarrow}} [CO], \quad 2)\ O_2 + 2* \underset{k_{-2}}{\overset{k_{+2}}{\Leftrightarrow}} 2[O], \quad 3)\ [CO] + [O] \overset{k_3}{\rightarrow} CO_2 + 2*$$

$$4)\ [O] \overset{k_4}{\rightarrow} [O]_v, \quad 5)\ [CO] + [O]_v \overset{k_5}{\rightarrow} CO_2 + 2*. \qquad (1.49)$$

Здесь $*$ – свободный адсорбционный центр на поверхности; [CO] и [O] – адсорбированные молекула CO и атом кислорода, соответственно; $[O]_v$ – атом приповерхностного кислорода. Первые три стадии (1),(2),(3) отражают механизм реакции на поверхности, стадии (4),(5) описывают процессы окисления и восстановления поверхностного слоя катализатора. Считается, что приповерхностный кислород, внедряясь глубже адсорбированного кислорода, находится на поверхности, но имеет другую активность.

Математическая модель STM представляет собой систему трех обыкновенных дифференциальных уравнений, описывающих изменение концентраций адсорбированных на поверхности веществ и приповерхностного кислорода, и имеет вид:

$$\frac{dx}{dt} = k_1(1-x-y-z) - k_{-1}x - k_3xy - k_5xz,$$
$$\frac{dy}{dt} = k_2(1-x-y-z)^2 - k_{-2}y^2 - k_3xy - k_4y, \qquad (1.50)$$
$$\frac{dz}{dt} = k_4y - k_5xz.$$

Модель определена на фазовом множестве $Si$:

$$Si: \{0 \le x, \quad 0 \le y, \quad 0 \le z, \quad z + x + y \le 1\}. \qquad (1.51)$$

Возьмем следующие значения констант скоростей элементарных стадий при $T = 550$ K:

$$k_1 = P_{CO} \cdot 10^4 \text{ с}^{-1}\text{Торр}^{-1}, \; k_{-1} = 3 \cdot 10^2 \text{ с}^{-1}, \; k_2 = 4P_{O_2} \cdot 2{,}5 \cdot 10^3 \text{ с}^{-1},$$
$$k_{-2} = 0 \text{ с}^{-1}, \; k_3 = 4 \cdot 2{,}5 \cdot 10^4 \text{ с}^{-1}, \; k_4 = 0{,}11 \text{ с}^{-1}, \; k_5 = 4 \cdot 6{,}5 \cdot 10^{-3} \text{ с}^{-1},$$

и проведем бифуркационный анализ зависимости стационарных и периодических решений системы (1.50) от основного внешнего параметра – давления $P_{CO}$ в газовой фазе. Рассмотрим систему для нахождения стационаров:

$$f_1 = k_1(1-x-y-z) - k_{-1}x - k_3xy - k_5xz = 0,$$
$$f_2 = k_2(1-x-y-z)^2 - k_3xy - k_4y = 0, \qquad (1.52)$$
$$f_3 = k_4y - k_5xz = 0.$$

Из третьего уравнения переменную $y$ выразим через $x$ и $z$ и подставим во второе и первое уравнения системы (1.52). Из первого уравнения выразим $z$ через $x$ и подставим во второе уравнение, получим:

$$y = \frac{k_5xz}{k_4}, \qquad z = \frac{k_1(1-x) - k_{-1}x}{k_1(1 + k_5x/k_4) + k_5x(1 + k_3x/k_4)}, \qquad (1.53)$$

$$A(x) \cdot k_1^2 - B(x) \cdot k_1 + C(x) = 0, \qquad (1.54)$$

$$A = a_1(a_1k_{-1}x - a_3); \quad B = a_3a_2 - 2k_{-1}xa_1a_2; \quad C = a_3^2k_2 + k_{-1}xa_2^2,$$
$$a_1 = 1 + k_5x/k_4; \quad a_2 = k_5x(1 + k_3x/k_4); \quad a_3 = a_2(1-x) + k_{-1}xa_1,$$

Уравнение (1.54) является квадратным относительно параметра $k_1$. Решая его, выпишем формулы зависимости $k_1$ от переменной $x$ и остальных параметров. Проведем однопараметрический анализ стационарных состояний. Изменяя переменную $x$ с некоторым шагом в пределах от 0 до 1, вычислим последовательно по полученным формулам значения параметра $k_1$, а по по формулам (1.53) − значения переменных $z$ и $y$. Для исследования устойчивости стационара и проведения бифуркационного анализа, выпишем элементы матрицы Якоби $A$ и вычислим в каждой точке определитель $\Delta_A$,

определитель матрицы Гурвица $\Delta_\Gamma$, след $S_A$ и сумму главных миноров второго порядка $p$:

$$
\begin{aligned}
&a_{11} = -k_1 - k_{-1} - k_3 y - k_5 z, \quad a_{12} = -k_1 - k_3 x, \quad a_{13} = -k_1 - k_5 z,\\
&a_{21} = -2k_2 w - k_3 y, \quad a_{22} = -2k_2 w - k_3 x - k_4, \quad a_{23} = -2k_2 w,\\
&a_{31} = -k_5 z, \quad a_{32} = k_4, \quad a_{33} = -k_5 x;\\
&p = -S_A = -(a_{11} + a_{22} + a_{33}) > 0; \qquad (1.55)\\
&q = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} a_{11} & a_{13} \\ a_{31} & a_{33} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} a_{22} & a_{23} \\ a_{32} & a_{33} \end{vmatrix};\\
&r = -\Delta_A;\\
&\Delta_\Gamma = R = pq - r.
\end{aligned}
$$

Отметим, что система (1.52) при любых значениях параметров имеет стационарное решение $x = 0,\ y = 0,\ z = 1$, которое находится на границе симплекса реакции (1.51). Это решение имеет тип седла и не оказывает особого влияния на динамику системы.

Результаты бифуркационного анализа модели от параметра $P_{CO}$ представлены на рис. 1.8. На интервале $(P_{h_1}, P_{sn_1})$ система имеет устойчивый предельный цикл, окружающий единственный в этой области неустойчивый стационар. Минимумы и максимумы колебаний концентрации [CO] отмечены жирными линиями. Колебания начинаются в результате сверхкритической бифуркации Хопфа $h_1$ при $P_{CO} = P_{h_1}$ и закачиваются при $P_{CO} = P_{sn_1}$ в точке глобальной бифуркации, отвечающей петле сепаратрисы седло-узла, в которой период цикла обращается в бесконечность.

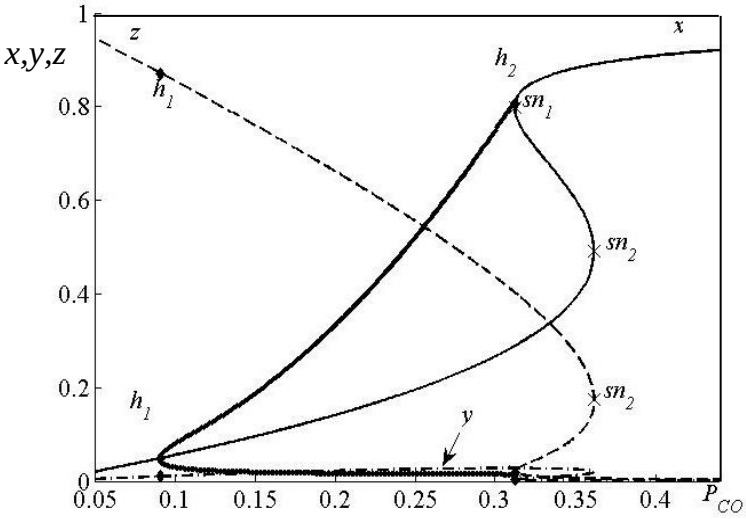



Рис. 1.8. Зависимости периодических решений и концентраций $x$, $y$ и $z$ на стационаре от давления $P_{CO}$ (Торр). Жирной линией обозначены максимумы и минимумы концентрации [CO] в колебаниях

Область автоколебаний справа граничит с областью множественности стационарных состояний $(P_{sn_1}, P_{sn_2})$, которая находится между двумя точками седло-узловой бифуркации $sn_1$ и $sn_2$. Здесь стационарное состояние, отвечающее набольшей концентрации [CO] ($x$), – устойчиво и имеет тип узла

(за исключением крайне узкой окрестности точки $h_2$, лежащей чуть правее точки $sn_1$), а два других – неустойчивы.

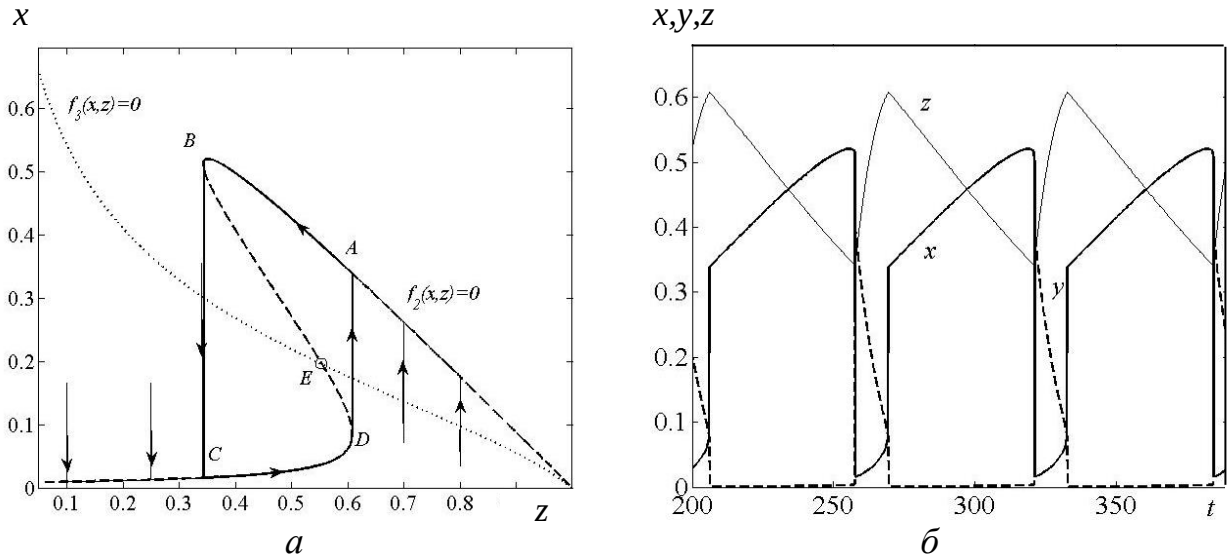



Рис. 1.9. Динамика модели (1.50) при $P_{CO}$=0,25 *Торр*:
*а* – фазовая плоскость модели; *ABCD* – предельный цикл; ..*б* – вид релаксационных колебаний

Зафиксируем давление $P_{CO}$=0,25 *Торр* из области колебаний и построим фазовый портрет системы (1.50). Проведем главные изоклины системы. Для этого из первого уравнения системы (1.52) выразим переменную $y$ через $x$ и $z$ и подставим во второе и третье уравнения этой системы. Из полученных уравнений найдем $z$ как функцию $x$. На рис. 1.9, *а* изображены проекции предельного цикла $ABCD$, некоторых траекторий и главных изоклин модели на фазовую плоскость $(z, x)$. Стрелки указывают направления движения вдоль траекторий.

## 2. Релаксационные колебания, бистабильная и возбудимая динамика

### 2.1. Описание динамики

Существует еще один способ нахождения параметров, при которых существуют автоколебания или множественность стационарных состояний. Рассмотрим систему ОДУ второго порядка вида:

$$\begin{aligned} \frac{dy_1}{dt} &= \frac{1}{\varepsilon} f_1(y_1, y_2), \\ \frac{dy_2}{dt} &= f_2(y_1, y_2), \end{aligned} \quad . \qquad (2.1)$$

где $0 < \varepsilon < 1$ – малый параметр.

Пусть изоклина первого уравнения $f_1(y_1, y_2) = 0$ имеет на фазовой плоскости *S*-, *N*-, или *И*-образный характер, например, как это показано на рис. 2.1. Пусть область, где функция $f_1$ больше нуля, находится под изоклиной, а

область, где она меньше нуля, находится выше изоклины. Вторая изоклина $f_2(y_1, y_2) = 0$ может пересекать первую в одной или трех стационарных точках. Пусть область, где функция $f_2$ больше нуля, находится ниже этой изоклины, а область, где она меньше нуля, находится выше изоклины. Тогда крайние ветви первой изоклины будут притягивающими, так как к ним стремятся траектории системы (2.1), а ветвь *EC*, находящаяся между ними – отталкивающей.

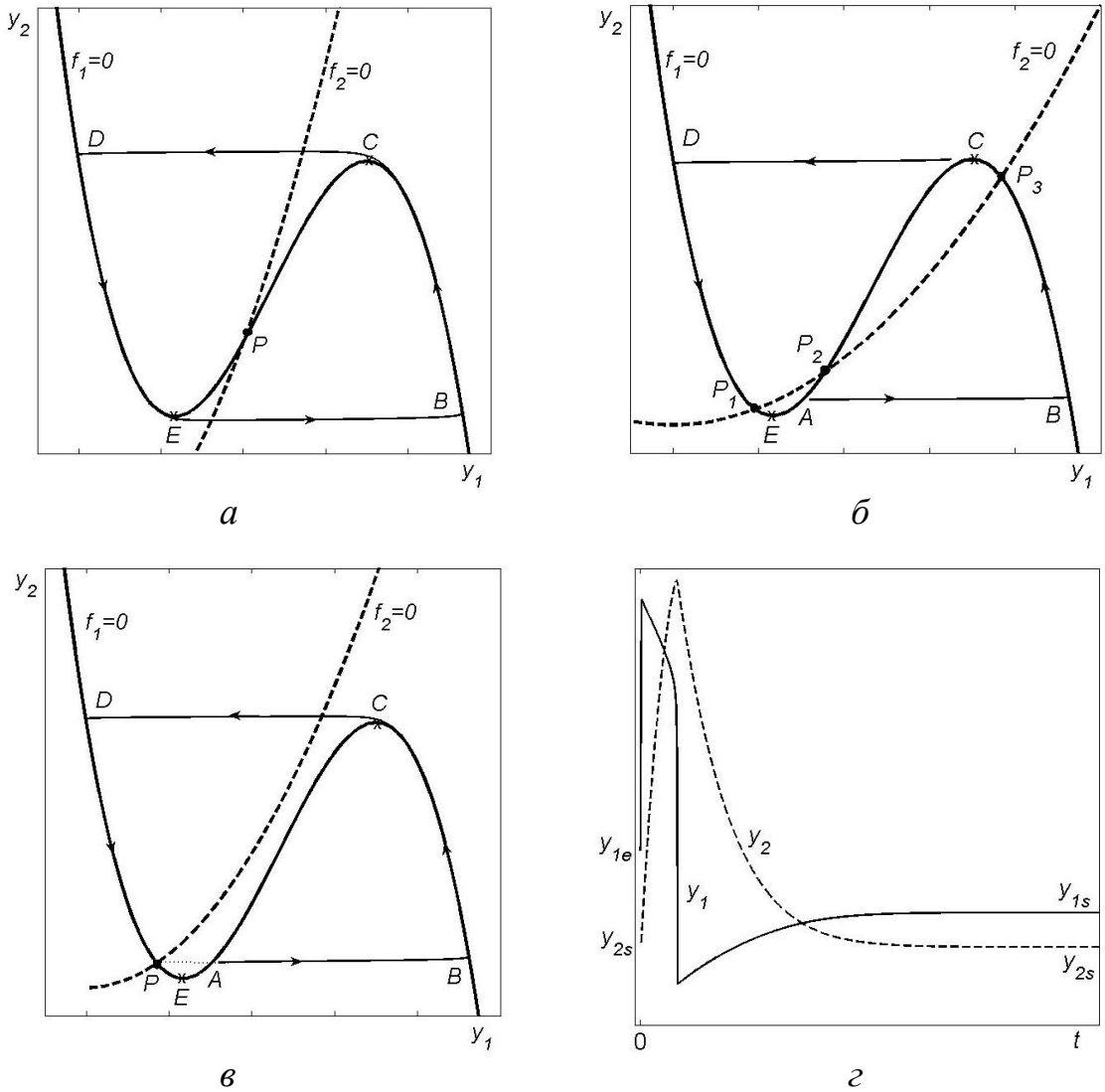



Рис. 2.1. Фазовые портреты активной динамики точечной модели:
*а* – автоколебательная динамика; *б* – бистабильная динамика; *в* – возбудимая динамика;
*г* – возбудимая динамика, немонотонный выход решения на стационар

***Автоколебательная динамика.*** Если пересечение изоклин происходит в единственной точке *P*, принадлежащей отталкивающей ветви *EC*, как это показано на рис. 2.1, *а*, то точка *P* является неустойчивой, и система (2.1) демонстрирует *автоколебательную динамику*. Устойчивый предельный цикл, описывающий автоколебания на фазовой плоскости, окружает неустойчивую точку *P* и задается замкнутой кривой *EBCDE*. Существование автоколебаний в системах с малым параметром при соответствующих условиях доказано в

теореме А.Н. Тихонова. Такие колебания называются релаксационными. Они далеки от гармонических и имеют в фазовом пространстве области быстрого и медленного изменения. Период цикла и кривую, описывающую предельный цикл можно условно разделить на 4 части. В процессе колебаний, система медленно движется вдоль ветвей *S*-образной изоклины по отрезкам *BC* и *DE*, и совершает быстрые переходы между ветвями изоклины по отрезкам *EB* и *CD*. Типичный вид релаксационных колебаний изображен на рис. 2.2, *б*.

***Бистабильная динамика.*** Если изоклина $f_2(y_1, y_2) = 0$ пересекает первую изоклину в трех точках, то система имеет три стационарных решения и демонстрирует *активную бистабильную динамику*. Стационарные точки $P_1$ и $P_3$, принадлежащие притягивающим ветвям *S*-образной изоклины, являются устойчивыми, а точка $P_2$, лежащая на отталкивающей ветви *EC* – неустойчивая. На рис. 2.1, *б* показан фазовый портрет системы (2.1) в этом случае. Мы видим, что существуют траектории (например, $CDP_1$), которые начинаются вблизи точки $P_3$ и стремятся к точке $P_1$. Существуют также траектории, которые начинаются вблизи точки $P_1$ и приближаются к точке $P_3$ (например, $ABP_3$). В распределенной системе с диффузией в этом случае можно возбудить волну переключения, которая будет переводить систему из состояния $P_1$ в состояние $P_3$ или наоборот, в зависимости от знака некоторого интеграла. Траектория, описывающая фронт на фазовой плоскости системы, как мы увидим ниже, будет очень близка к соответствующей траектории точечной модели.

***Возбудимая динамика.*** Рассмотрим случай, когда изоклины пересекаются в единственной устойчивой точке *P*, которая находится вблизи поворота *S*-образной изоклины, как это показано на рис. 2.1, *в*. Хотя точка *P* является единственным аттрактором системы ОДУ и все траектории на плоскости стремятся к этой точке, система демонстрирует интересную *активную динамику*. Пусть система находится в состоянии равновесия *P*, с координатами $(y_{1s}, y_{2s})$. Выведем систему из этого состояния, например, увеличив концентрацию $y_1$, так чтобы система перешагнула изоклину *EC* и очутилась в точке *A*, с координатами $(y_{1e}, y_{2s})$ (рис. 2.1, *в*). Такие возмущения называются *сверхкритическими.* Тогда динамика системы будет следующей. Сначала система будет быстро удаляться от точки *P* и переместится в точку *B*, находящуюся на притягивающей ветви первой изоклины. Затем она медленно будет двигаться вдоль ветви изоклины по кривой *BC* до точки поворота *C*. Здесь она повернет и быстро перейдет на другую устойчивую ветвь изоклины по отрезку *CD*. В точке *D* система снова повернет, и далее будет медленно двигаться вдоль изоклины по отрезку *DP*, приближаясь к стационарной точке *P*. На рис. 2.1, *г* этот процесс изображен во времени. Такая динамика *называется возбудимой*. В общем случае, для того чтобы система ОДУ демонстрировала возбудимый характер, необходимо, чтобы вблизи устойчивого по Ляпунову стационара существовали траектории, которые сначала от него удалялись, а затем к нему приближались.

Возбудимые среды интересны тем, что в соответствующих распределенных системах с диффузией в них могут распространяться *уединенные бегущие волны*, рассмотренные ниже.

## 2.2. Модель типа ФитцХью–Нагумо

Рассмотрим модельную систему второго порядка с малым параметром $\varepsilon$ при производной, которая может демонстрировать возбудимую, колебательную и бистабильную динамику в зависимости от значений параметров:

$$\varepsilon \frac{dy}{dt} = y - y^3 - x, \qquad \frac{dx}{dt} = y - kx - a, \tag{2.2}$$

где $a$, $k$ – параметры.

Исследуем фазовую плоскость системы (2.2). Сначала нарисуем главные изоклины системы. Изоклина горизонтальных наклонов $f_1(x,y)=0$, имеет характерный *г*-образный вид, а изоклина вертикальных наклонов $f_2(x,y)=0$ представляет собой прямую $y = \alpha$ (пусть сначала $k=0$). Функция $f_1(x,y)<0$ для всех точек плоскости, которые лежат выше изоклины, и соответственно, $f_1(x,y)>0$ для точек плоскости, лежащих ниже изоклины. Таким образом, верхняя и нижняя ветви $S$-образной изоклины являются притягивающими, а ветвь, лежащая между ними, – отталкивающей. Притягивающие ветви кривой $x = y - y^3$ находятся в интервалах $x \in (-\infty, -1/\sqrt{3})$, $x \in (1/\sqrt{3}, \infty)$, а отталкивающая ветвь заключена в интервале $x \in (-1/\sqrt{3},\ 1/\sqrt{3})$. Изоклины пересекаются в единственной стационарной точке $E = (\tilde{x}, a)$, где $\tilde{x} = a - a^3$.

***Автоколебания***. Если $a$ принадлежит интервалу $-1/\sqrt{3} < a < 1/\sqrt{3}$, то изоклина $f_2(x,y)=0$ пересекает $S$-образную изоклину в ее неустойчивой части, лежащей между точками поворота $B$ и $D$ (рис. 2.2, *а*).

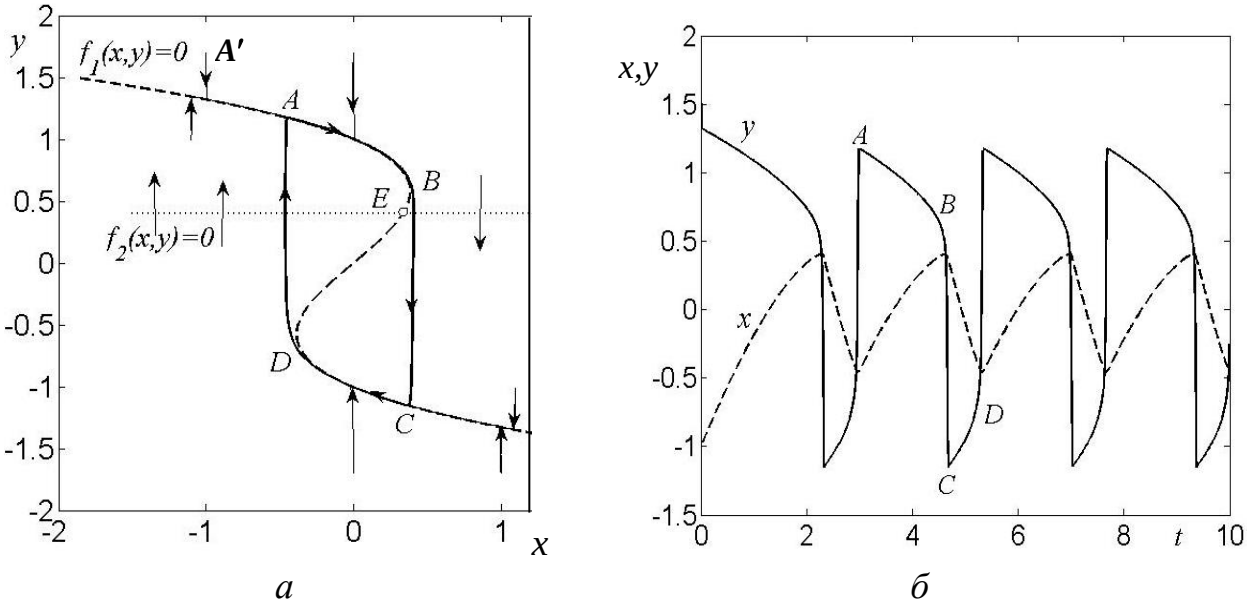



Рис. 2.2. Динамика системы (2.2) при $\varepsilon$=0,01, $\alpha$=0,4:
*а* – фазовая плоскость модели; *E* – стационарная точка, *ABCD* – предельный цикл;
*б* – вид релаксационных колебаний

Переменная $y$ – это быстрая переменная, характерное время ее изменения имеет порядок $\varepsilon$, а $x$ – медленная переменная. Если на фазовой плоскости взять точку, находящуюся на некотором расстоянии от изоклины $f_1(y,x)=0$ (например $A'$), и провести через нее траекторию, то скорость изменения $y$ на этой трактории сперва будет очень велика. Изображающая точка будет сначала быстро стремится к притягивающей ветви изоклины, а затем будет медленно двигаться вдоль этой ветви, приближаясь к точке поворота $B$ или $D$ (рис. 2.2). Быстрое движение происходит почти параллельно направлению оси $y$, а медленное движение происходит в близкой окрестности изоклины $x = y - y^3$.

Линеаризация системы (2.2) в стационарной точке $E$ имеет вид:

$$\begin{bmatrix} dy/dt \\ dx/dt \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1-3y^2 & -1 \\ 1 & -k \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y \\ x \end{bmatrix}. \qquad (2.3)$$

Определитель и след матрицы линеаризации **A** соответственно равны: $\Delta_A = 1$, $S_A = 1 - 3a^2$, откуда следует, что если $|a| > 1/\sqrt{3}$, то точка $E$ – асимптотически устойчива ($\Delta_A > 0,\ S_A < 0$), а если $|a| < 1/\sqrt{3}$, то неустойчива $(S_A > 0)$. В выбранном случае стационарная точка является неустойчивой, и, следовательно, движения изображающей точки по траекториям в системе происходят, как показано на фазовом портрете (рис. 2.2, *а*). В начале изображающая точка быстро приближается к той или иной устойчивой ветви изоклины в зависимости от начальных данных и далее следует вдоль нее вплоть до точки поворота, где изображающая точка срывается на другую устойчивую ветвь, и опять движется вдоль нее вплоть до точки поворота, где опять происходит срыв. Таким образом, в системе возникает устойчивый предельный цикл, состоящий из медленных и быстрых движений, то есть имеющий релаксационный характер. Период цикла определяется временем медленных движений вдоль устойчивых ветвей $S$-образной изоклины. На рис. 2.2, б показан вид релаксационных автоколебаний системы (2.2). Буквами обозначены фазы колебаний переменной $y$, при которых происходит переход от быстрых движений к медленным. Эти точки соответствуют точкам на предельном цикле на фазовой плоскости (рис. 2.2, *а*).

***Возбудимая динамика.*** При $\alpha > 1/\sqrt{3}$ точка пересечения изоклин $E$ находится выше точки поворота $B$ и является устойчивой стационарной точкой. Пусть $\alpha$ будет чуть больше $1/\sqrt{3}$, тогда точка $E$ находится вблизи точки $B$, и система (2.2) демонстрирует типичную возбудимую динамику. Траектории, начинающиеся вблизи точки $E$ и находящиеся справа от точки поворота $B$, сначала быстро удаляются от $E$, приближаясь к нижней ветви $S$-образной изоклины, затем поворачивают, медленно двигаются вдоль этой ветви до поворота в точке $D$, (как на рис. 2.2), затем опять быстро двигаются к верхней ветви $S$-образной изоклины, поворачивают, и наконец медленно приближаются к стационарной точке $E$.

***Бистабильная динамика.*** Чтобы система имела три стационара, надо параметр $k$ взять больше 1, а параметр $a$ можно положить равным нулю. Тогда пересечение изоклины $y = kx$ с $S$-образной изоклиной будет происходить в трех точках. Нетрудно показать, исследуя линеаризацию (2.3) на стационарах, что две крайние стационарные точки будут устойчивы, а средняя, лежащая на ветви *BD*, – неустойчива.

## 2.3. Модель STM

Снова обратимся к модели STM, в основе которой лежит система 3-х ОДУ (1.50) с малым параметром. Малым параметром здесь служит величина, обратная скорости реакции $k_3$, которая входит в два первых уравнения модели; $x$ и $y$ являются быстрыми переменными, а $z$ – медленной. Исключив из системы для стационаров (1.52) переменную $y$ и нарисовав на фазовой плоскости $(x, z)$ изоклины и траектории модели (1.50), мы получили фазовый портрет, характерный для релаксационных колебаний (рис. 1.9, *а*). Мы видим, что одна из изоклин имеет *S*-образный характер и пересекается с другой изоклиной в единственной неустойчивой стационарной точке *E*. Притягивающими ветвями *S*-образной изоклины являются верхняя и нижняя, отталкивающая ветвь расположена между ними. Жирной линией изображен предельный цикл $ABCD$, описывающий релаксационные автоколебания. Один цикл можно разбить на четыре этапа: два медленных и два быстрых. Медленные этапы соответствуют движению вдоль устойчивых ветвей *S*-образной изоклины, а быстрые этапы соответствуют переходам между этими ветвями. Понятно, что период колебаний определяется временем движения вдоль ветвей *S*-образной изоклины, когда идут медленные процессы окисления и восстановления поверхности, которые на 7–8 порядков медленнее скорости реакции $k_3$. На рис. 1.9, *б* представлен вид этих сильно релаксационных колебаний.

## 2.4. Модель реакции Филда–Кереша–Нойеса

Рассмотрим модель химической реакции Филда–Кереша–Нойеса (упрощенная модель реакции Белоусова– Жаботинского). В основе этой модели лежит система двух уравнений с малым параметром $\varepsilon$, описывающая изменение со временем концентраций $y(t)$ и $x(t)$:

$$\begin{aligned} \varepsilon \frac{dy}{dt} &= y(1-y) - \frac{x(y-a)}{(y+a)}, \\ \frac{dx}{dt} &= by - x + c, \end{aligned} \tag{2.4}$$

где $0 < a < 1,\ 0 < b,\ \varepsilon << 1-$ параметры. При этих значениях параметра $a$ изоклина первого уравнения имеет $S$-образный характер, причем две

полубесконечные ветви ее являются притягивающими, а средняя ветвь, лежащая между точками поворота, – отталкивающей.

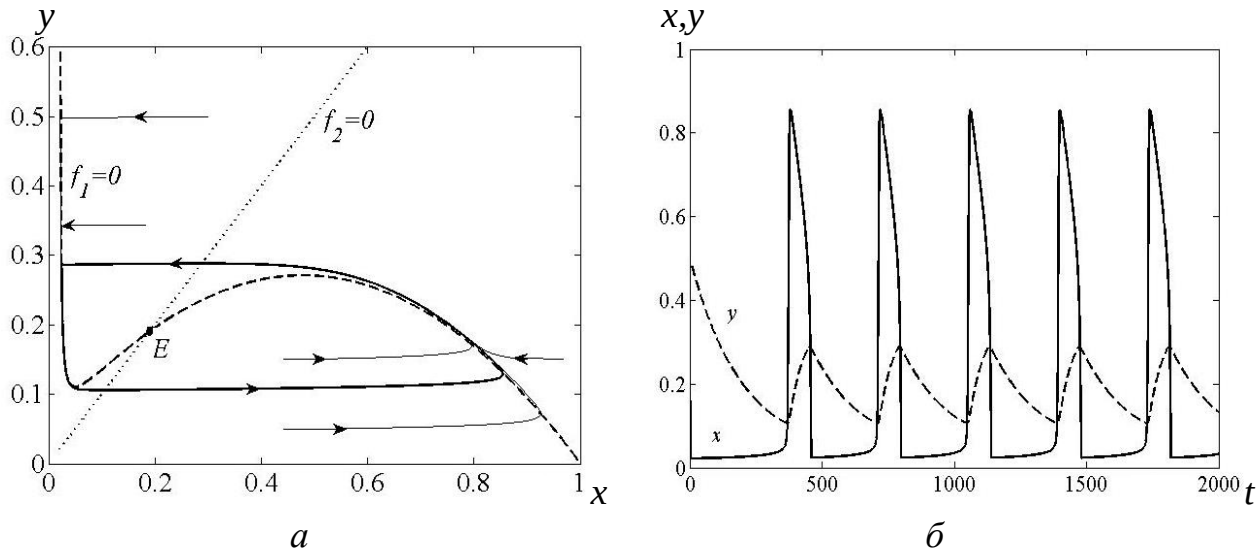



Рис. 2.3. Динамика системы (2.4) при $\varepsilon$=0,01, $\alpha$=0,02, $b$=1; $c$=0:
*а* – фазовая плоскость модели; *E* – стационарная точка, предельный цикл показан жирной линией;
*б* – вид релаксационных колебаний

Изоклина второго уравнения представляет собой прямую. При определенном наклоне прямой изоклины пересекаются в неустойчивой части изоклины первого уравнения, как показано на рис. 2.3, *а*. В этом случае система имеет единственную неустойчивую стационарную точку *E*, вокруг которой возникает предельный цикл релаксационного характера. На рис. 2.3, *б* показан вид этих релаксационных колебаний.

Изменяя параметры системы *b* и *c*, можно добиться того, что изоклина второго уравнения будет пересекать $S$-образную изоклину первого уравнения в трех точках или в одной, находящейся на одной из устойчивых ветвей изоклины вблизи точки поворота. Тогда мы будем иметь бистабильную или возбудимую динамику соответственно.

# II. ПРОСТРАНСТВЕННО-ВРЕМЕННЫЕ СТРУКТУРЫ

В следующих разделах будут рассмотрены методы поиска диссипативных структур и волн в системах типа реакция-диффузия. Они описываются стационарными или автомодельными решениями дифференциальных уравнений, к которым стремятся другие решения уравнений, то есть они играют роль аттракторов, подобно асимптотически устойчивым стационарным точкам или предельным циклам в системах ОДУ.

## 3. Структуры Тьюринга

### 3.1. Стационарные диссипативные структуры

Рассмотрим систему двух дифференциальных уравнений с частными производными параболического вида:

$$\frac{\partial y_1(x,t)}{\partial t} = D_1 \frac{\partial^2 y_1}{\partial x^2} + f_1(y_1, y_2, \alpha),$$
$$\frac{\partial y_2(x,t)}{\partial t} = D_2 \frac{\partial^2 y_2}{\partial x^2} + f_2(y_1, y_2, \alpha), \qquad 0 < x < L, \quad t > 0. \tag{3.1}$$

где $x$ – пространственная координата, $t$ – время.

Неизвестные функции $y_1(x,t)$, $y_2(x,t)$ описывают распределение концентраций. Члены со второй частной производной описывают «диффузию» ($D_1 > 0$, $D_2 > 0$ – коэффициенты диффузии), а функции $f_1$, $f_2$ задают «реакцию»; $\alpha$ – активный параметр.

Задача рассматривается на отрезке $0 < x < L$. На концах отрезка обычно задаются либо граничные условия первого рода (Дирихле):

$$y_i(0,t) = \bar{y}_i, \quad y_i(L,t) = \bar{\bar{y}}_i, \quad i = 1,2 \ , \tag{3.2′}$$

или второго рода (Неймана):

$$\frac{\partial y_i(0,t)}{\partial x} = \frac{\partial y_i(L,t)}{\partial x} = 0, \quad i = 1,2 \ . \tag{3.2″}$$

Условия (3.2) означают, что на концах отрезка поддерживаются определенные концентрации веществ. А условия (3.2') описывают отсутствие потока промежуточных веществ через границы, то есть условия непротекания.

В начальный момент времени определены начальные условия:

$$y_1(x,0) = y_1{}^0(x), \quad y_2(x,0) = y_2{}^0(x), \ 0 \le x \le L \ . \tag{3.3}$$

***Пространственно-однородные стационарные решения.*** Будем считать, что функции $f_1$, $f_2$ таковы, что система (3.1) имеет при любых допустимых значениях параметра $\alpha$, по крайней мере, одно пространственно-однородное стационарное состояние $\{\bar{y}_1, \bar{y}_2\}$, $\bar{y}_1 \equiv const$, $\bar{y}_2 \equiv const$. Оно удовлетворяет уравнениям:

$$f_1(y_1, y_2) = 0, \quad f_2(y_1, y_2) = 0. \tag{3.4}$$

***Пространственно-неоднородные стационарные решения, или диссипативные стационарные структуры.*** Стационарные диссипативные структуры, или структуры Тьюринга, являются решением $(\tilde{y}_1(x), \tilde{y}_2(x))$ системы (3.1), зависящим от пространственной координаты и не зависящим от времени, то есть они удовлетворяют системе нелинейных уравнений

$$D_1 \frac{d^2 \tilde{y}_1}{d x^2} + f_1(\tilde{y}_1, \tilde{y}_2, \alpha) = 0,$$
$$D_2 \frac{d^2 \tilde{y}_2}{d x^2} + f_2(\tilde{y}_1, \tilde{y}_2, \alpha) = 0, \qquad 0 < x < L. \tag{3.5}$$

и соответствующим граничным условиями (3.2).

Эти решения могут существовать только при определенных условиях, накладываемых на свойства реакции (функции $f_1$, $f_2$) и матрицы диффузии $\mathbf{D}$. Определим эти условия.

***Устойчивость стационарных решений.*** Устойчивость стационарного состояния $\{\bar{y}_1, \bar{y}_2\}$ в распределенной системе (3.1) определяется характеристическими числами $\gamma_1(n)$ и $\gamma_2(n)$ матрицы линеаризации **B**:

$$\mathbf{B} = \mathbf{A} - k^2\mathbf{D}, \tag{3.6}$$

где $\mathbf{D} = \begin{pmatrix} D_1 & 0 \\ 0 & D_2 \end{pmatrix}$ – диагональная матрица диффузии системы (3.1),

**A –** матрица Якоби: $$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial y_1}(\bar{y}_1, \bar{y}_2) & \frac{\partial f_1}{\partial y_2}(\bar{y}_1, \bar{y}_2) \\ \frac{\partial f_2}{\partial y_1}(\bar{y}_1, \bar{y}_2) & \frac{\partial f_2}{\partial x_2}(\bar{y}_1, \bar{y}_2) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix}. \tag{3.7}$$

$$k = \frac{\pi n}{L}, \ n = 1, 2, ... \tag{3.8}$$

где $k$ – волновое число, $n$ – номер гармоники.

Если для любой гармоники $n$ оба характеристических числа $\gamma_1(n)$ и $\gamma_2(n)$ имеют отрицательные действительные части, то малые возмущения стационара затухают, тогда стационар является устойчивым. Если хотя бы для одной гармоники с номером $n^*$ одно из характеристических чисел будет иметь положительную действительную часть, то стационар будет неустойчивым.

Условия устойчивости матрицы **B** задаются неравенствами:

$$S_{\mathbf{B}}(n) < 0, \ \forall \ n = 0,1,2,..., \tag{3.9}$$

$$\Delta\mathbf{B}(n) > 0, \ \forall n = 0,1,2,.... \tag{3.10}$$

где $S_{\mathbf{B}}$ – это след, а $\Delta\mathbf{B}$ – определитель матрицы **B**:

$$S_{\mathbf{B}} = S_{\mathbf{A}} - (D_1 + D_2)k^2, \tag{3.11}$$

$$\Delta\mathbf{B} = \Delta\mathbf{A} - (D_1 a_{22} + D_2 a_{11})k^2 + D_1 D_2 k^4. \tag{3.12}$$

где $S_{\mathbf{A}}$ – это след, а $\Delta\mathbf{A}$ – определитель матрицы **A**.

Будем считать, что стационар $\{\bar{y}_1, \bar{y}_2\}$ устойчив в соответствующей системе ОДУ без диффузионных членов. Тогда:

$$S_{\mathbf{A}} = a_{11} + a_{22} < 0, \tag{3.13}$$

$$\Delta\mathbf{A} = a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21} > 0, \tag{3.14}$$

Стационарные диссипативные структуры могут появляться в системе (3.1) в ***результате бифуркации Тьюринга***, при которой пространственно-однородный стационар $\{\bar{y}_1, \bar{y}_2\}$ теряет устойчивость в системе с диффузией (3.1) и от него

ответвляется пространственно-неоднородное стационарное решение $\left(\tilde{y}_1(x), \tilde{y}_2(x)\right)$.

Границами области устойчивости матрицы **B** являются либо $S_{\mathbf{B}} = 0$, либо $\Delta\mathbf{B} = 0$. Из (3.11) следует, что, так как $S_{\mathbf{A}} < 0$, то и $S_{\mathbf{B}} < 0$ для $\forall\, n$. Рассмотрим возможность нарушения условия устойчивости (3.10), то есть выполнения неравенства:

$$\Delta\mathbf{B} = \Delta\mathbf{A} - (D_1 a_{22} + D_2 a_{11})k^2 + D_1 D_2 k^4 \le 0. \qquad (3.15)$$

Уравнение (3.15), описывающее зависимость определителя матрицы **B** от волнового числа $k$, является биквадратным. На рис. 3.1 представлено несколько графиков биквадратной функции $\Delta\mathbf{B}(k^2)$ при разных значениях параметров. В случае 1 для всех гармоник выполняется условие устойчивости (3.10). В случае 2 существует единственное значение $k_c^2$: $\Delta\mathbf{B}(k_c^2) = 0$. В случае 3 имеется интервал значений $k^2$: $k_1^2 \le k^2 \le k_2^2$, для которых выполняется условие неустойчивости (3.15).

Из (3.15) выводится необходимое условие возникновения неустойчивости:

$$D_1 D_2 k^4 - (D_1 a_{22} + D_2 a_{11})k^2 < 0,$$

или

$$\frac{a_{11}}{D_1} + \frac{a_{22}}{D_2} > k^2 > 0. \qquad (3.16)$$

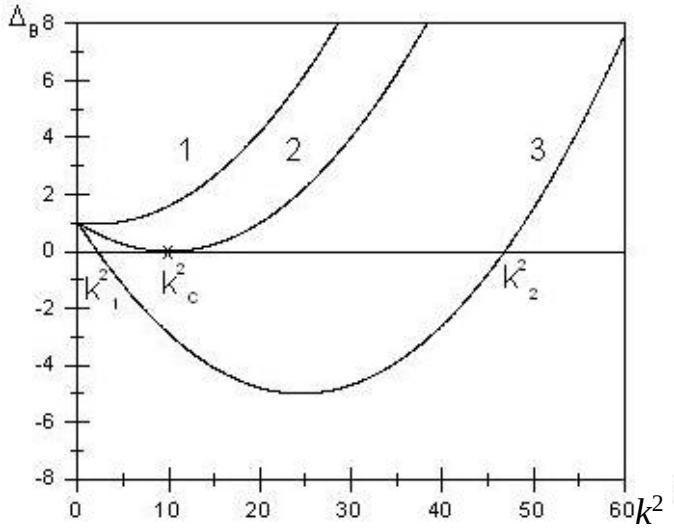



Рис. 3.1. Графики зависимости определителя $\Delta\mathbf{B}$ от волнового числа $k$:
кривая 1 соответствует устойчивости;
кривая 2 – нейтральной устойчивости;
кривая 3 – неустойчивости

Так как условие (3.16) должно выполняться совместно с неравенством (3.13), то для возникновения неустойчивости Тьюринга необходимо, чтобы:

1) $a_{11} \times a_{22} < 0$, (3.17)

2) $D_1 \ne D_2$. (3.18)

Условие (3.17) означает, что стационарные диссипативные структуры могут существовать только в автокаталитических системах в области, где один из коэффициентов $a_{jj}$ больше нуля, а другой – меньше; при этом определитель $\Delta A > 0$. Пусть для определенности $a_{11} > 0$, а $a_{22} < 0$, тогда $D_1 < D_2$, и, как следует из (3.16), по крайней мере, должно выполняться неравенство:

$$\frac{D_1}{D_2} < d_{\max} = \frac{a_{11}}{|a_{22}|}. \tag{3.19}$$

Более точное минимально необходимое отношение коэффициентов диффузии для возникновения неустойчивости Тьюринга можно найти, анализируя неравенство (3.15).

Заметим, что выполнение условия неустойчивости (3.17), (3.19) еще не означает, что однородный стационар потеряет устойчивость. Для потери устойчивости необходимо, чтобы длина отрезка, на котором идет реакция, была бы достаточно большой, такой чтобы там помещалась хотя бы одна самая простая структура, соответствующая первой гармонике $n = 1$. То есть существует критическая длина $L^*$:

$$L^* = \frac{\pi}{\tilde{k}}, \tag{3.20}$$

где либо $\tilde{k} = k_c$, либо $\tilde{k} = k_2$.

При $L > L^*$ существует одна или несколько неустойчивых гармоник $n_j$, у которых положительные показатели роста $\gamma$. Эти неустойчивые гармоники начинают расти, и система выходит из состояния однородного равновесия, со временем, если не существует других аттракторов, формируется структура Тьюринга.

При $L < L^*$ пространственно-однородный стационар устойчив даже при выполнении условий неустойчивости (3.15).

### 3.2. Методика поиска областей существования структур Тьюринга

Итак, чтобы найти области существования стационарных диссипативных структур в распределенной модели, надо провести *параметрический анализ соответствующей точечной (а не распределенной!)* модели реакции. Стационарные диссипативные структуры нужно искать вблизи линии нейтральности системы ОДУ второго порядка, на которой выполняется условие $a_{11}+a_{22}=0$. Тогда в прилегающей области, где $a_{11}+a_{22}<0$, можно найти подобласти, в которых диагональные члены матрицы **A** имеют разные знаки.

По методике, описанной в первом разделе, проводим однопараметрический анализ стационарных состояний. В каждой найденной стационарной точке $(y_1, y_2)$ вычисляем элементы матрицы Якоби $a_{ij}$, ее след и определитель. Находим границу (значение параметра $\alpha*$), где один из элементов $a_{jj}$ матрицы **A** обращается в ноль (пусть для определенности

$a_{11}=0,\ a_{22}<0$). В области $a_{11}>0$ найдем максимальное отношение коэффициентов диффузии $d_{\max}=\max(D_1/D_2),\ D_1<D_2$, удовлетворяющее формуле (3.19). По мере увеличения коэффициента $a_{11}$, при приближении к точке бифуркации Андронова-Хопфа (в которой $a_{11}$+$a_{22}$=0), значение $d_{\max}$ возрастает. Если отношение $d$ удовлетворяет неравенству

$$d=\frac{D_1}{D_2}<d_{\max}=\frac{a_{11}}{|a_{22}|}, \tag{3.21}$$

то делаем следующий шаг – находим точные границы области неустойчивости Тьюринга. Для этого, выбрав и зафиксировав коэффициенты $D_1,\ D_2$, исследуем определитель матрицы **B**. Он описывается уравнением, в котором элементы матрицы **A** зависят от параметра $\alpha$:

$$\Delta\mathbf{B}=\Delta\mathbf{A}-(D_1a_{22}+D_2a_{11})k^2+D_1D_2k^4=0, \tag{3.22}$$

и определяет неявную зависимость волнового числа $k^2$ от параметра. Решая уравнение (3.22), получаем:

$$k_{1,2}{}^2=\frac{(D_1a_{22}+D_2a_{11})\pm\sqrt{Di}}{2D_1D_2},$$
$$Di=(D_1a_{22}+D_2a_{11})^2-4\Delta\mathbf{A}D_1D_2 \tag{3.23}$$

Меняя местами оси координат, рисуем график зависимости $\alpha(k^2)$, который задает границу неустойчивости Тьюринга. В этой области отметим границу области колебаний – линию нейтральности $S_{\mathbf{A}}=0$.

Следующим этапом является нахождение минимальной длины отрезка из условия (3.20) и задание $L>L^*$.

Для выбранного набора параметров $(\alpha,D_1,D_2,L)$ построим зависимость характеристических чисел $\gamma_1(k(n))$ от номера гармоники и найдем номера $n_j$ неустойчивых гармоник, для которых $\gamma_1(n_j)>0$. Характеристические числа являются собственными значениями матрицы **B** и вычисляются по формуле:

$$\gamma(k^2)=0.5\left(S_{\mathbf{B}}\pm\sqrt{S_{\mathbf{B}}{}^2-4\Delta\mathbf{B}}\right), \tag{3.24}$$

Теперь остается построить диссипативные структуры. Это можно сделать, численно решив задачу (3.1), (3.2) с разными начальными данными (3.3). Поскольку в выбранной области только структуры Тьюринга являются аттракторами, то с течением времени решение задачи сойдется к одной из этих структур. При произвольных начальных данных чаще всего будут возникать структуры с числом максимумов, соответствующих неустойчивым гармоникам, лежащим вблизи максимума зависимости $\gamma_1(k(n))$.

### 3.3. Структуры Тьюринга в модели «Брюселлятор»

Методы поиска и исследования диссипативных структур рассмотрим на примере модели химической реакции «Брюселлятор»:

$$\begin{aligned} &\frac{\partial y_1(x,t)}{\partial t} = D_1 \frac{\partial^2 y_1}{\partial x^2} + a - (b+1)y_1 + y_1{}^2 y_2, \\ &\frac{\partial y_2(x,t)}{\partial t} = D_2 \frac{\partial^2 y_2}{\partial x^2} + by_1 - y_1{}^2 y_2, \end{aligned} \qquad t > 0,\ \ 0 < x < L. \qquad (3.25)$$

где $a$ и $b$ − параметры реакции ($a > 0$ и $b > 0$).

Система (3.25) имеет пространственно-однородное стационарное решение:

$$\bar{y}_1(x,t) \equiv const = a,\ \ \bar{y}_2(x,t) \equiv const = b/a, \qquad (3.26)$$

которое находится из системы:

$$\begin{cases} a - (b+1)\bar{y}_1 + \bar{y}_1{}^2 \bar{y}_2 = 0, \\ b\bar{y}_1 - \bar{y}_1{}^2 \bar{y}_2 = 0, \end{cases} \qquad (3.27)$$

Матрица **A** на стационаре $(\bar{y}_1, \bar{y}_2)$ имеет вид:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} = \left.\begin{bmatrix} 2xy - b - 1 & x^2 \\ b - 2xy & -x^2 \end{bmatrix}\right\|_{(a,b/a)} = \left.\begin{bmatrix} b-1 & a^2 \\ -b & -a^2 \end{bmatrix}\right\|. \qquad (3.28)$$

Ее собственные значения задаются формулой:

$$\lambda_{1,2} = \frac{1}{2}(b - 1 - a^2 \pm \sqrt{(b-1-a^2)^2 - 4a^2}). \qquad (3.29)$$

Условия устойчивости стационара (3.26) для рассматриваемого случая принимают вид:

$$S_{\mathbf{A}} = a_{11} + a_{22} = b - 1 - a^2 < 0, \qquad (3.30)$$

$$\Delta\mathbf{A} = a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21} = a^2 > 0. \qquad (3.31)$$

Они эквивалентны одному неравенству:

$$b < 1 + a^2. \qquad (3.32)$$

Известно, что граница области устойчивости $b^* = a^2 + 1$ соответствует бифуркации Андронова-Хопфа, при которой устойчивое стационарное состояние типа фокуса теряет устойчивость, а вокруг него рождается устойчивый предельный цикл.

Пусть условие устойчивости (3.32) выполнено. Найдем значения параметров, при которых пространственно-однородный стационар $\{\bar{y}_1, \bar{y}_2\}$ теряет устойчивость в системе с диффузией (3.25) и формируются стационарные диссипативные структуры.

Во-первых, для возникновения диффузионной неустойчивости необходимо, чтобы один из коэффициентов $a_{jj}$ матрицы **A** был

положительным. Из (3.28) и с учетом (3.32) получаем интересующий нас интервал изменения параметра $b$:

$$1 < b < 1 + a^2 . \tag{3.33}$$

Определитель матрицы **B** (3.22), который определяет устойчивость однородного стационара в системе с диффузией, имеет вид:

$$\begin{aligned} \Delta\mathbf{B} &= \Delta\mathbf{A} - (D_1 a_{22} + D_2 a_{11})k^2 + D_1 D_2 k^4 = \\ &= a^2 - (D_2(b-1) - D_1 a^2)k^2 + D_1 D_2 k^4. \end{aligned} \tag{3.34}$$

Приравнивая определитель к нулю ($\Delta\mathbf{B} = 0$) и выражая параметр $b$ через остальные параметры, находим критическое значение параметра $b_c(k^2)$, при котором теряет устойчивость гармоника, отвечающая волновому числу $k$:

$$b_c(k^2) = 1 + \frac{a^2}{k^2 D_2} + \frac{D_1 a^2}{D_2} + D_1 k^2 . \tag{3.35}$$

Из этого выражения видно, что функция $b_c(k^2)$ имеет минимум при некотором значении $(k_c^2)^*$, которое легко найти, приравняв к нулю производную:

$$\frac{db_c}{dk_c^2} = -\frac{a^2}{D_2 k_c^4} + D_1 = 0 .$$

Откуда находим

$$(k_c^2)^* = \frac{a}{\sqrt{D_1 D_2}} . \tag{3.36}$$

Этому значению волнового числа соответствует минимальное критическое значение параметра $b^*(k_c{}^2)*$, при котором всего одна гармоника становится нейтрально устойчивой ($\gamma_1(k_c)* = 0$):

$$\begin{aligned} b^*(k_c^2)^* &= 1 + \frac{a\sqrt{D_1 D_2}}{D_2} + \frac{D_1 a^2}{D_2} + D_1 \frac{a}{\sqrt{D_1 D_2}} = \\ &= 1 + 2a\frac{\sqrt{D_1}}{\sqrt{D_2}} + a^2 \frac{D_1}{D_2} = (1 + a\eta)^2 , \end{aligned} \tag{3.37}$$

где $\eta = \sqrt{\dfrac{D_1}{D_2}} < 1.$ (3.38)

Потеря устойчивости стационара может произойти при $b > b^*(k_c{}^2)^*$.

На рис. 3.2 изображен график функции $b_c(k^2)$ (3.35), описывающий границу области устойчивости однородного стационара при разных значениях коэффициента диффузии $D_1$. На графиках точками отмечены минимумы функции $b^*(k_c{}^2)^*$. Пунктирной линией проведена граница области устойчивости стационара в системе ОДУ: $b = 1 + a^2 = 2$. При $b > 2$ в

распределенной системе (3.25) могут существовать как пространственно-однородные колебания, так и стационарные диссипативные структуры.

Найдем максимальное значение отношения коэффициентов диффузии $\eta$ (3.38), при котором критическое значение $b^*(k_c{}^2)^*$ совпадает с границей области автоколебаний:

$$(1+a\eta)^2 = 1+a^2. \tag{3.39}$$

Отсюда получаем, что:

$$\eta \le \sqrt{1+a^{-2}} - a^{-1}. \tag{3.40}$$

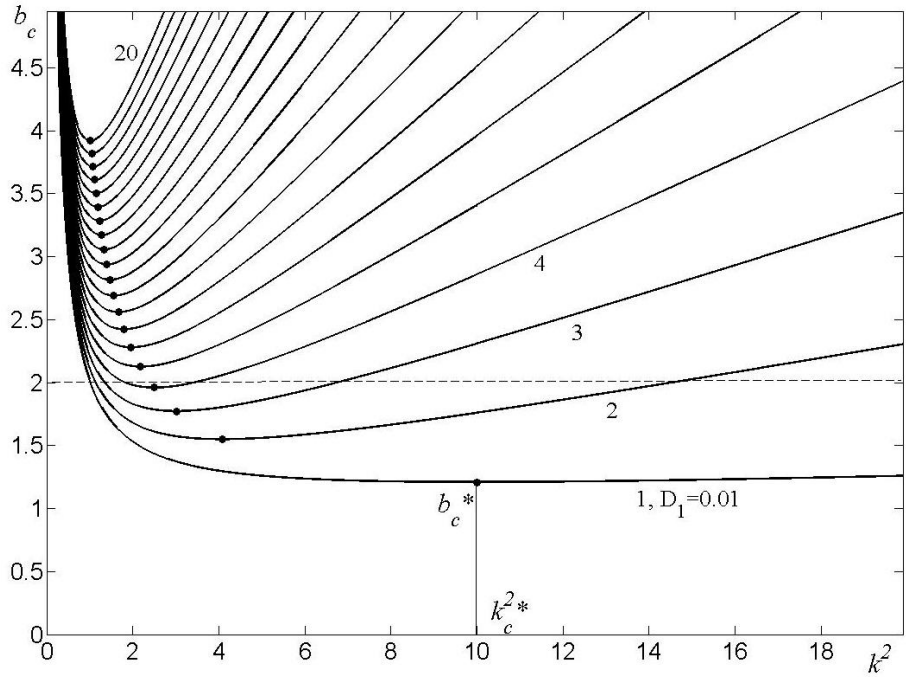



Рис. 3.2. Граница области устойчивости однородного стационара при $D_2$=1, $a$=1 и разных значениях $D_1$: 0.01, 0.06, …, 1

Подведем итог наших исследований. Пусть коэффициенты диффузии таковы, что выполнено неравенство (3.40). Будем увеличивать параметр $b$. При $b < b^*(k_c{}^2) < 1+a^2$ любая гармоника устойчива (действительные корни характеристического уравнения отрицательны для любого значения $k^2$), а, значит, и пространственно-однородный стационар устойчив. При $b = b^*(k_c{}^2)$ мода с волновым числом $k = k_c{}^*$ становится нейтрально устойчивой, и при дальнейшем малейшем изменении параметра теряет свою устойчивость. (Точнее, вследствие того, что спектр значений $k^2$ имеет дискретный характер, теряет устойчивость ближайшая к значению $k = k_c{}^*$ мода $k_{n,c}$ при значении параметра $b^*(k_{n,c}{}^2)$. В системе возникает неустойчивость, связанная с нарушением пространственной однородности, или неустойчивость Тьюринга. От пространственно однородного стационара ответвляется устойчивое пространственно неоднородное решение, отвечающее волновому числу $k_{n,c}$.

Однако, чтобы это имело место, длина отрезка должна превышать критический размер (3.20).

**Пример.** Рассмотрим нахождение структур Тьюринга на конкретном примере. Пусть $a=1$, $1<b<2$, $D_1=0.01$, $D_2=1$, тогда необходимые условия, накладываемые на матрицу **A** (3.33) и коэффициенты диффузии (3.40), выполнены. По формулам (3.36) и (3.37) вычислим нейтрально устойчивую моду и критическое значение параметра, получим: $k^2{}_c{}^*=10$, $b^*{}_c=1.21$; график зависимости $\Delta\mathbf{B}(k^2)$ в этом случае представлен на рис. 3.1, кривая 2.

Стационарные диссипативные структуры могут возникнуть в системе при $b>b^*{}_c$. Пусть $b=1.5$. График зависимости $\Delta_{\mathbf{B}}(k^2)$ для этого случая изображен на рис. 3.1, кривая 3. На рис. 3.3 представлена зависимость собственных значений $\gamma(k^2)$ матрицы **B** от волнового числа. Мы видим, что существуют неустойчивые моды $k_1{}^2<k^2<k_2{}^2$, для которых $\Delta_{\mathbf{B}}<0$ и $\gamma>0$.

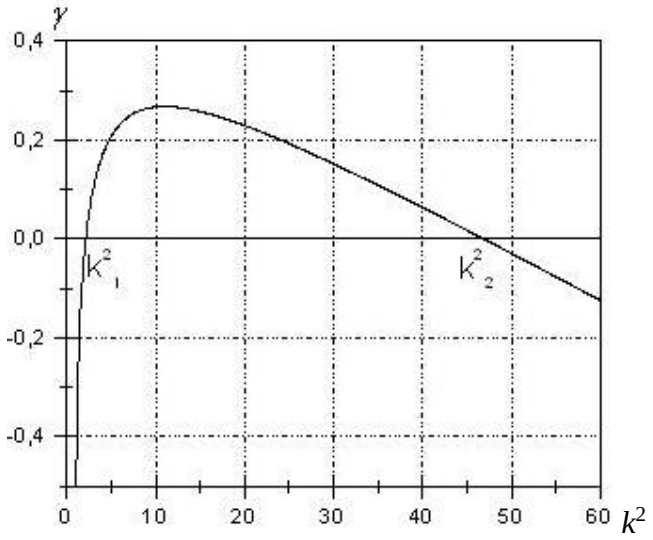
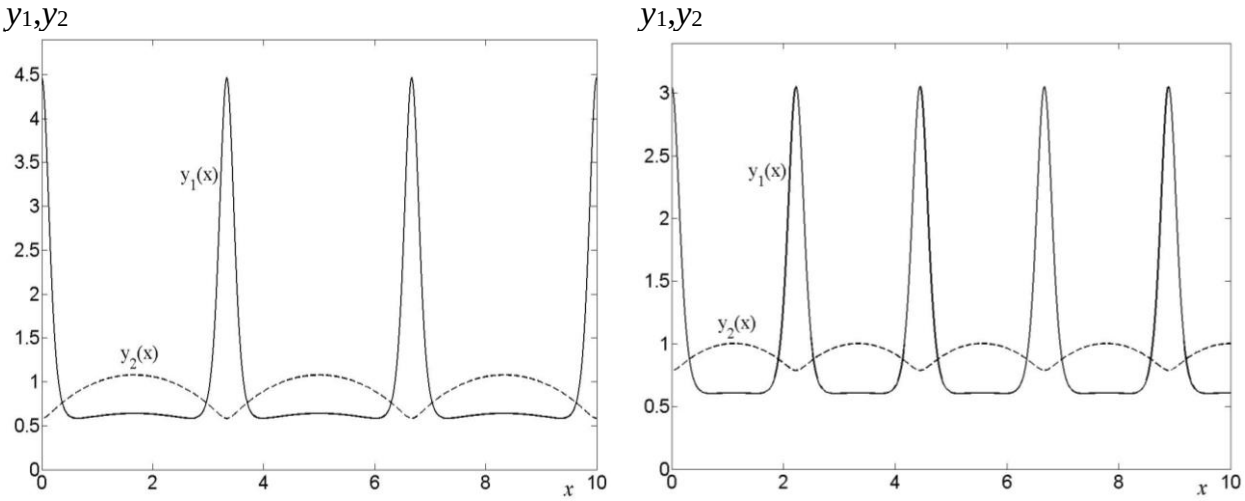



Рис. 3.3. Зависимость характеристических чисел матрицы **B** от волнового числа $k^2$ при $b$=1.5




*а* *б*

Рис. 3.4. Диссипативные структуры в модели «Брюселлятор», отвечающие волновому числу *n*: *а* – структура, отвечающая *n*=6; *б* – структура, отвечающая *n*=9

Выберем длину отрезка $L > L^* = \dfrac{\pi}{k_2}$ (3.20), например, $L = 10$, тогда из (3.8) найдем, что $n = 10k/\pi$. Неустойчивые гармоники $n$ лежат в диапазоне: $10k_1/\pi < n < 10k_2/\pi$. Для рассматриваемого случая это целые числа $\{n\}: 4-20$. Исследуем формирование диссипативных структур. В качестве начальных данных возьмем функции

$$y_1(x,0) = a + \delta\cos(\pi n/L), \quad y_2(x,0) = b/a, \ \delta \sim 0.1. \tag{3.41}$$

Решение системы (3.25) с начальными условиями (3.41) будем искать численно, используя, например, пакет Matlab. Спустя некоторое время, после перестройки начального профиля, наблюдается выход на ту или иную стационарную диссипативную структуру, в зависимости от начального распределения концентраций (3.41). На рис. 3.4 показан вид двух установившихся диссипативных структур, отвечающих неусточивым гармоникам *n*=6 и *n*=9.

## 3.4. Структуры Тьюринга в двухкомпонентной модели гетерогенной каталитической реакции

Методику поиска стационарных диссипативных структур применим к модели, описывающей неидеальную гетерогенную каталитическую реакцию $CO+O_2$, основанную на кинетической схеме Лэнгмюра–Хиншельвуда. Макроскопическая модель реакции, описывающая изменение концентраций адсорбированных молекул CO ($x(t)$) и атомов кислорода O ($y(t)$), имеет вид:

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= k_1(1-x-y) - k_{-1}x - k_3\varphi(y)xy, \\ \frac{dy}{dt} &= k_2(1-x-y)^2 - k_{-2}y^2 - k_3\varphi(y)xy, \end{aligned} \tag{3.42}$$

где $\varphi(y) = (1-y)^\alpha, \quad \alpha = 16.$

Для концентраций $x$ и $y$ справедливы ограничения:

$$Si: \{0 \le x, \quad 0 \le y, \quad x + y \le 1\}.$$

Исследуем зависимость стационарных решений системы (3.42) от параметра $k_2$ при $k_1 = 0.03, \ k_{-1} = 0.01, \ k_{-2} = 0.01, \ k_3 = 10$. Приравняем правые части системы к нулю. Из первого уравнения для стационаров выразим $x$ через $y$

$$x(y) = \frac{k_1(1-y)}{k_1 + k_{-1} + k_3(1-y)^\alpha y} \tag{3.43}$$

и подставим во второе уравнение. Из второго уравнения найдем зависимость параметра $k_2$ от $y$:

$$k_2(y) = \frac{k_{-2}y^2 + k_3 x(y) y (1-y)^\alpha}{(1-x(y)-y)^2}. \tag{3.44}$$

Дифференцируя правые части системы (3.42) выпишем элементы матрицы линеаризации **A**, а также ее след и определитель:

$$a_{11} = -k_1 - k_{-1} - k_3 y\varphi; \qquad a_{12} = -k_1 - k_3\varphi x - k_3 xy\varphi'_y;$$
$$a_{21} = -2k_2(1-x-y) - k_3 y\varphi;$$
$$a_{22} = -2k_2(1-x-y) - 2k_2 y - k_3 x\varphi - k_3 xy\varphi'_y; \qquad (3.45)$$
$$S_A = a_{11} + a_{22}, \quad \Delta\mathbf{A} = a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}$$

Пусть переменная $y$ с некоторым шагом пробегает интервал (0,1). Для каждого значения $y$ вычислим на стационаре значения $x(y)$, $k_2$ и элементы матрицы **A** и проанализируем. Результаты однопараметрического исследования приведены на рис. 3.5, *а*. Мы видим, что модель имеет область множественности стационарных решений и область автоколебаний.

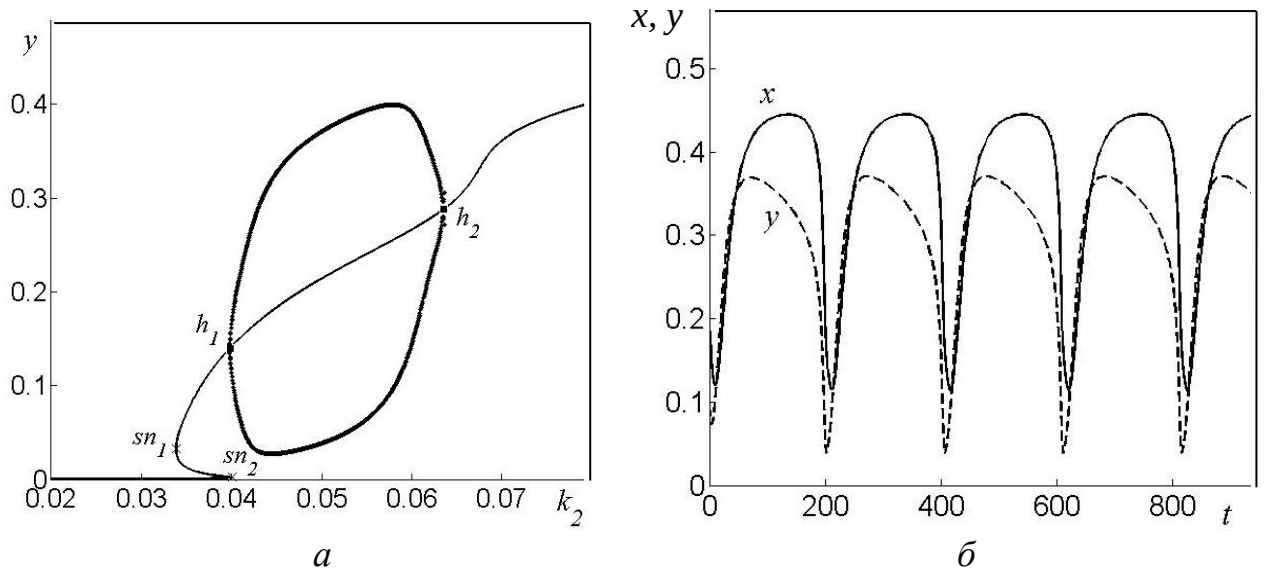



Рис. 3.5. Однопараметрический анализ:
*а* – зависимость концентрации *y* в стационарном режиме и ее минимумов и максимумов в колебательном режиме (жирная линия) от параметра $k_2$; *б* – вид автоколебаний при $k_2$=0,05

Точки на графиках $h_1$ и $h_2$ соответствуют точкам бифуркации Андронова–Хопфа, а точки $sn_1$, $sn_2$ – точкам седло-узловой бифуркации. Область автоколебаний примыкает к области множественности стационаров. Колебания начинаются и заканчиваются в точках бифуркации Андронова–Хопфа $h_1$ и $h_2$. Колебания имеют ярко выраженный релаксационный характер. Их вид представлен на рис. 3.5, *б*.

Область существования стационарных диссипативных структур, как и ожидалось, находится вблизи области колебаний. Здесь коэффициент матрицы **A** $a_{22}$ становится положительным, значит для возникновения структур необходимо, чтобы коэффициент диффузии $D_2 < D_1$. Вычисляя на стационаре отношение модулей коэффициентов $a_{11}$ и $a_{22}$, по формуле (3.21) найдем, что отношение коэффициентов диффузии $d = (D_2 / D_1)$ не превышает 0.01. Положим $D_1 = 10$, $D_2 = 0.01$ $(d = 0.001)$. Зная на стационаре значения

параметра $p = k_2$, коэффициенты $a_{11}$, $a_{22}$ и, вычисляя по формуле (3.23) волновые числа, на плоскости $(p, k^2)$ построим границу области тьюринговской неустойчивости – линию $\Delta B(p, k^2) = 0$. График зависимости $p(k^2)$ представлен на рис. 3.6.

Область, в которой могут возникнуть диссипативные структуры, лежит в диапазоне $p_1 < p < p_2$. В точках бифуркации $p_1$ и $p_2$ существует только одно нейтрально устойчивое волновое число. Область автоколебаний лежит между точками $p_{h1} < p < p_{h2}$ и перекрывается с областью существования структур Тьюринга. В диапазоне $p_1 < p < p_{h1}$ структуры Тьюринга существуют вне области автоколебаний.

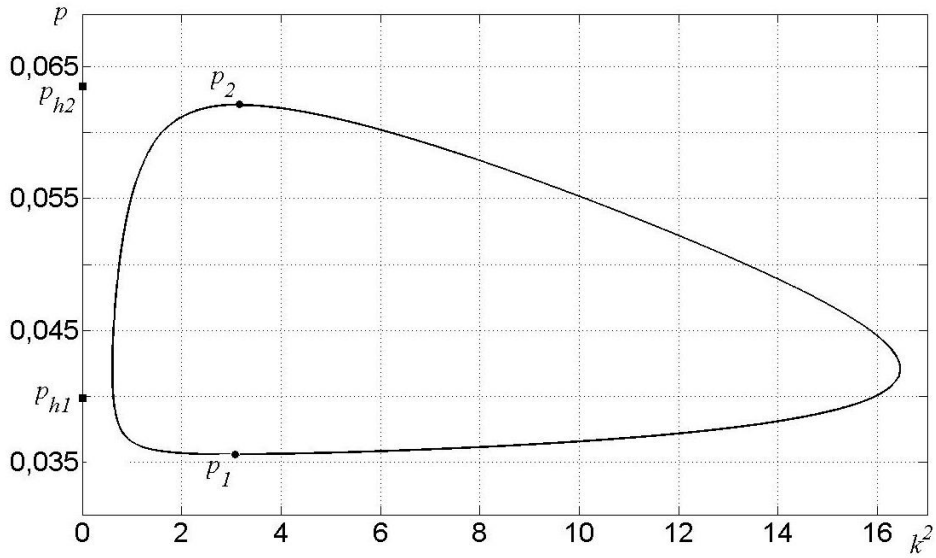



Рис. 3.6. Граница области тьюринговской неустойчивости

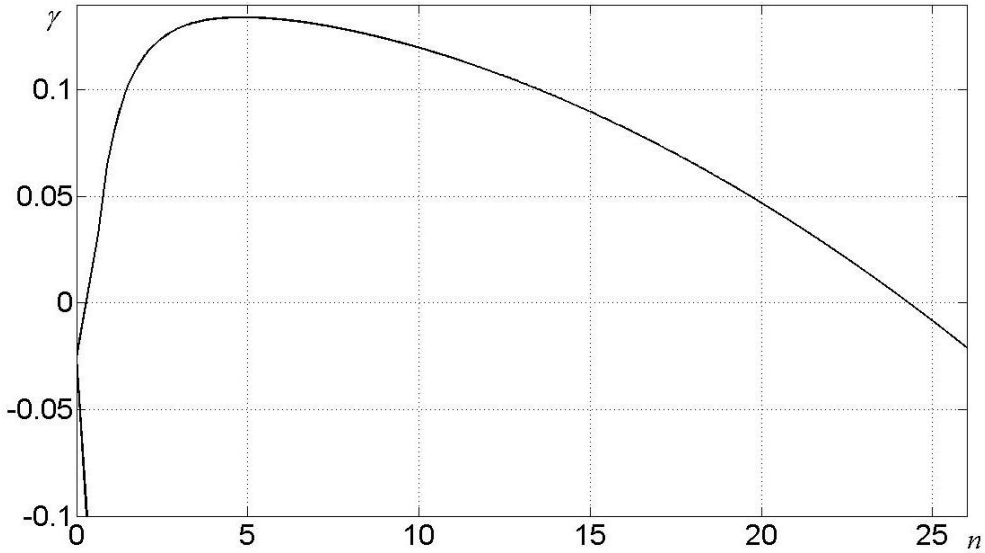



Рис. 3.7. Зависимость собственных значений матрицы **B** от номера гармоники *n*

Выберем из этой области параметр ($p = k_2 = 0.038$). Выберем $L > L^*$; пусть $L = 20$. Для выбранного набора параметров $(k_2, D_1, D_2, L)$ построим дисперсионную кривую $\gamma_{1,2}(n)$. График зависимости $\gamma_{1,2}(n)$ изображен на рис. 3.7. Мы видим, что первые 24 гармоники неустойчивы ($\gamma(n) > 0,\ n = 1,...,24$). Наибольшую скорость роста имеют гармоники с номерами 3−10.

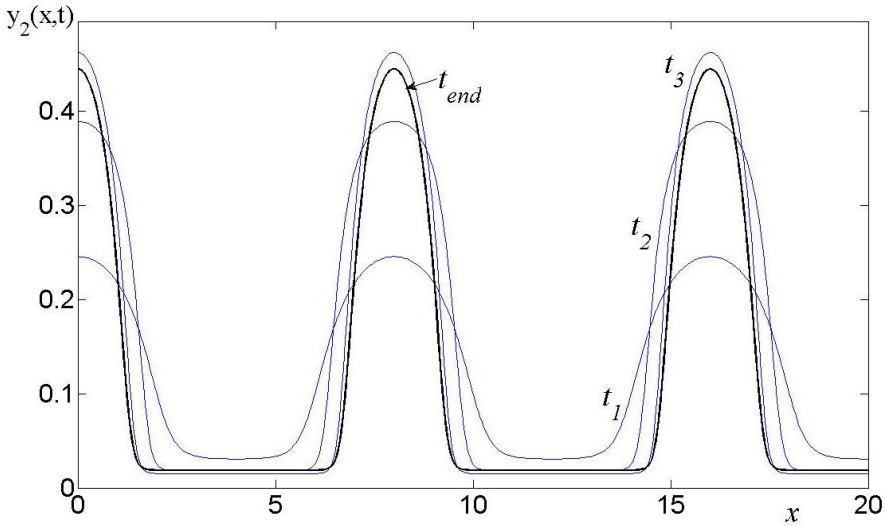



Рис. 3.8. Профили решений в моменты времени $t_1 < t_2 < t_3 < t_{end}$.
В момент $t_{end}$ изображена установившаяся структура Тьюринга

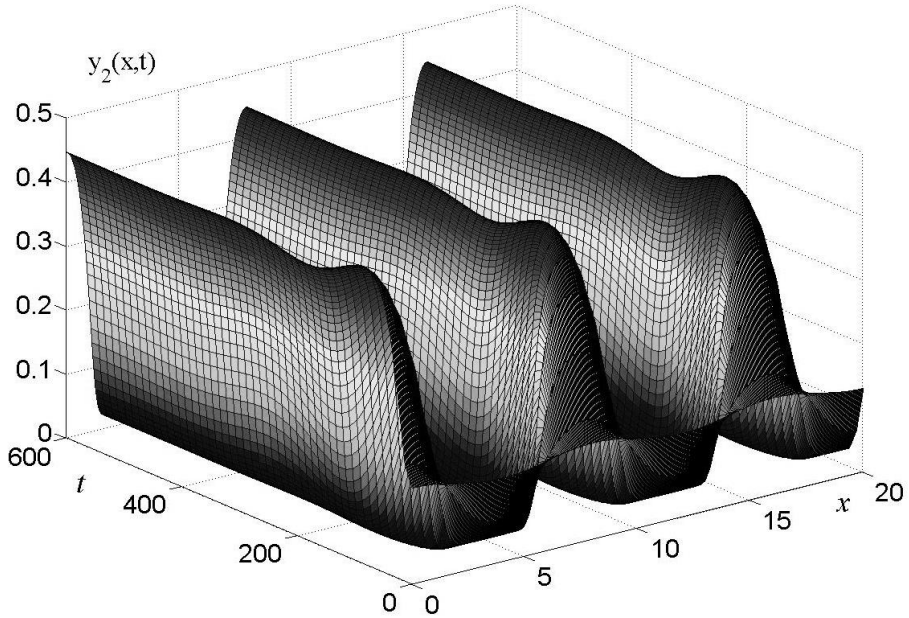



Рис. 3.9. Выход начального распределения на структуру Тьюринга

После выбора параметров можно приступить к построению стационарных структур. Рассмотрим систему уравнений типа реакция-диффузия и численно найдем ее решения, например, с помощью среды Matlab. Зададим на концах отрезка условия непротекания Неймана, а в качестве начальных распределений концентраций возьмем функции:

$$y_1(x,0) = y_1^0 + \delta\cos(\pi n / L), \quad y_2(x,0) = y_2^0 - \delta\cos(\pi n / L), \tag{3.46}$$

Здесь $x$ – пространственная координата, $y_1(x,t)$ – концентрация первого вещества, $y_2(x,t)$ – концентрация второго вещества.

Сначала в расчетах наблюдается перестройка начального профиля, затем решение перестает меняться, и в системе устанавливается стационарная диссипативная структура. На рис. 3.8 представлены профили решения в некоторые моменты времени и установившаяся структура Тьюринга, соответствующая неустойчивой гармонике $n = 5$ в линейном анализе устойчивости однородного стационара. На пространственно-временной диаграмме (рис. 3.9) изображено, как происходит выход начальных данных (3.46) на структуру Тьюринга.

# 4. Волны переключения

В этом и следующем разделах мы рассмотрим методы поиска уединенных бегущих волн в активных средах с диффузией. Мы рассмотрим два типа волн: волны переключения и уединенные бегущие импульсы. Начнем с волн переключения, которые возникают в бистабильных средах.

## 4.1. Волны переключения в однокомпонентной модели КПП (Колмогорова–Петровского–Пискунова)

Рассмотрим модель КПП, предложенную авторами в 1937 г. для описания некоторой биологической системы. Модель может быть использована и для описания автокаталитической химической реакции (1.21) и записана в виде:

$$\frac{\partial y(x,t)}{\partial t} = D\frac{\partial^2 y}{\partial x^2} + f(y), \qquad t > 0 \qquad -\infty < x < +\infty \tag{4.1}$$

$$f(y) = -a(y - y_1)(y - y_2)(y - y_3)$$

где $D$ – коэффициент диффузии; параметры: $a > 0$, $0 < y_1 < y_2 < y_3$.

Будем считать, что реакция происходит в длинной тонкой трубке, которую в модели можно считать бесконечной.

Граничные условия имеют вид:

$$\left(\frac{\partial y}{\partial x}\right)_{x\to\infty} \to 0, \quad \left(\frac{\partial y}{\partial x}\right)_{x\to-\infty} \to 0. \tag{4.2}$$

Функция $f(y)$, определяющая реакцию, представляет собой кубический полином. Уравнение (4.1) имеет три однородных стационарных решения: $\bar{y}_j(x,t) \equiv const = y_j$, $j = 1,2,3$, которые являются корнями полинома $f(y)$. Линейный анализ устойчивости показывает, что стационары $y_1$ и $y_3$ по отношению к малым возмущениям являются устойчивыми, а стационар $y_2$ –

неустойчивым. Среды, в которых существует два устойчивых стационарных состояния, называются *бистабильными*.

Рассмотрим следующую задачу. Мысленно разделим перегородкой реактор, в котором идет химическая реакция, на две половины. Пусть при одних и тех же параметрах в одной половине реактора установилась стационарная скорость реакции, соответствующая устойчивому стационару $y_1$, а во второй половине – $y_3$. Поставим вопрос, что будет происходить в среде, если убрать перегородку.

Исследования показали, что в общем случае с течением времени установится волна, имеющая вид фронта и движущаяся с постоянной скоростью либо в сторону стационара $y_1$, либо $y_3$, либо стоящая на месте. Эта волна в той области пространства, где она проходит, переводит (или переключает) систему из состояния $y_1$ в состояние $y_3$ или наоборот; поэтому она и получила название *волны переключения*, или *триггерной волны переключения*, поскольку происходит в среде с тремя стационарами.

Волна переключения описывается *автомодельным решением уравнения* (4.1) типа бегущей волны: $y(x,t) = y(\xi)$, где $\xi$ – автомодельная переменная:

$$\xi = x - Vt\,, \tag{4.3}$$

где $V$ – скорость волны.

Профиль волны переключения $y(\xi)$ имеет вид ступеньки, задается автомодельным уравнением:

$$D\frac{d^2y}{d\xi^2} + V\frac{dy}{d\xi} + f(y) = 0\,. \tag{4.4}$$

и удовлетворяет граничным условиям:

$$y(\xi) \underset{\xi\to[\mp\infty}{\to} y_1, \quad \left(\frac{dy}{d\xi}\right)_{\xi\to-\infty} \to 0\,, \tag{4.5}$$

$$y(\xi) \underset{\xi\to[\pm\infty}{\to} y_3, \quad \left(\frac{dy}{d\xi}\right)_{\xi\to\infty} \to 0\,. \tag{4.5′}$$

Уравнение (4.4) получается при подстановки $y(\xi)$ в модель (4.1).

Задача (4.4), (4.5) имеет аналитическое решение:

$$y(\xi) = \frac{y_1 + y_3 C e^{-\sqrt{\frac{a}{2D}}\xi(y_3 - y_1)}}{1 + C e^{-\sqrt{\frac{a}{2D}}\xi(y_3 - y_1)}}, \tag{4.6}$$

$$V = \sqrt{\frac{Da}{2}}\left(y_1 + y_3 - 2y_2\right). \tag{4.7}$$

Постоянная $C > 0$ определяет положение фронта. При разных $C$ решения получаются друг из друга преобразованием подобия – смещением вдоль оси $\xi$.

При $C=1$ решение можно выписать в симметричной форме через гиперболический тангенс:

$$y(\xi)=\frac{1}{2}\left((y_1+y_3)-(y_3-y_1)\mathrm{th}\frac{\alpha}{2}\right),\quad \alpha=\sqrt{\frac{a}{2D}}\xi(y_3-y_1).$$

Ширина переходной области, или фронта, зависит от параметров. Из вида функции (4.6) следует, что фронт тем шире, чем больше коэффициент диффузии $D$ и чем меньше параметр реакции $a$. Несколько графиков функции $y(\xi)$ для разных значений $D$ приведено на рис. 4.1.

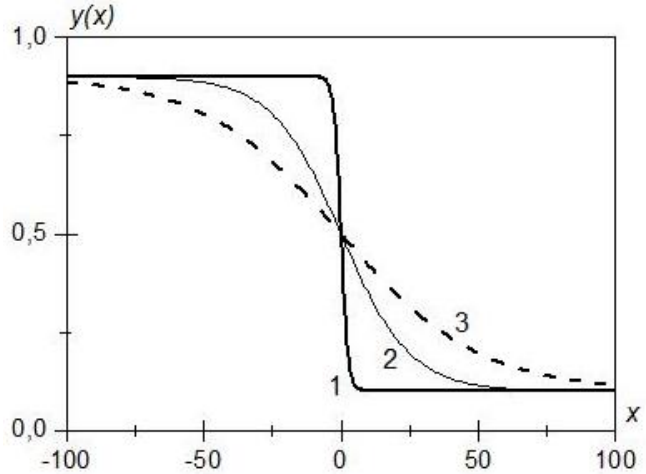



Рис. 4.1. Вид волны переключения при разных коэффициентах диффузии: $D_3 > D_2 > D_1$

***Скорость волны переключения.*** Скорость волны переключения в бистабильной среде всегда определяется однозначно. В системе (4.1) она задается формулой (4.7). Из этой формулы следует, что скорость волны может быть больше нуля, меньше нуля или равна нулю в зависимости от положения точки $y_2$ на интервале $y_1 < y_2 < y_3$.

$V=0$, если $y_2=0{,}5(y_1+y_3)$. В этом случае фронт стоит на месте.

Если $y_2>0{,}5(y_1+y_3)$, то $V<0$ и волна переключения движется в сторону большей концентрации. После прохождения фронта в среде устанавливается концентрация $y_1$, то есть переключение имеет направление: $y_1 \leftarrow y_3$. Если наоборот $y_2<0{,}5(y_1+y_3)$, то $V>0$ и волна переключения направлена в сторону меньшей концентрации; переключение имеет направление $y_1 \to y_3$.

Доказано, что автомодельное решение (4.6), (4.7) обладает свойством асимптотической устойчивости и начальные данные из широкого класса стремятся к нему. На рис. 4.2 показан пример расчета, в котором происходит формирование фронта и выход на автомодельный режим. В расчетах использовался отрезок достаточно большой длины $0\le x\le L$, на порядок превосходивший ширину фронта. Начальное распределение концентрации $y$ при $t$=0 имело вид ступенчатой функции: $y(x,0)=y_3,\ 0\le x<L_1$; $y(x,0)=y_1,\ L_1\le x\le L,\ L_1<<L$. Вначале наблюдалась перестройка профиля волны, затем она прекратилась, и волна стала перемещаться без изменения

профиля с постоянной скоростью в сторону состояния $y_1$. После прохождения фронта в системе установилось состояние $y_3$, как показано на рис. 4.2.

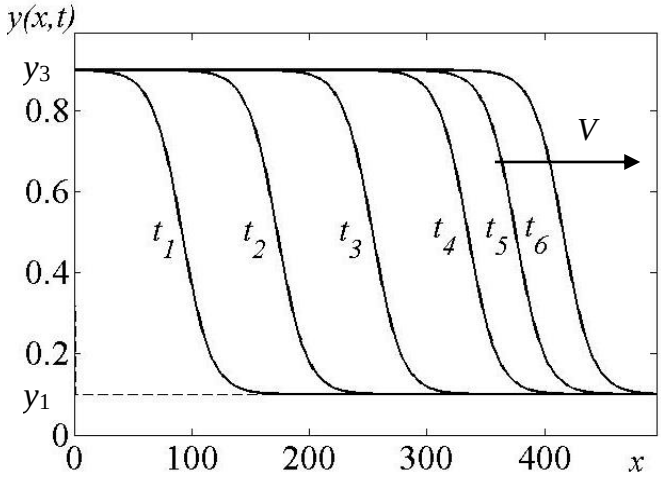



Рис. 4.2. Профили волны переключения из $y_1 \to y_3$ в некоторые моменты времени $t_1 < t_2 < t_3 < t_4 < t_5 < t_6$.

Параметры модели: $y_1$=0,1, $y_2$=0,4, $y_3$=0,9, $a$=20

***Замечание.*** Триггерные волны переключения существуют во всех средах, где функция $f(y)$, определяющая взаимодействия, имеет $S$-образный вид и три стационара, два из которых устойчивы, а средний стационар – неустойчив. Хотя аналитическое решение найти в общем случае не удается, но направление переключения определить можно. Доказано, что направление скорости определяется знаком интеграла:

$$U = \int_{y_1}^{y_3} f(y)dy. \tag{4.8}$$

Если $U > 0$, то скорость направлена в сторону концентрации $y_3$ (переключение $y_1 \to y_3$); если $U < 0$, то скорость направлена в сторону концентрации $y_1$; при $U = 0$ $V = 0$, и фронт стоит.

***Фазовые волны переключения.*** Волны, описывающие движение фронта в системе (4.1), могут возникнуть и в случае, когда функция $f(y)$ имеет два стационара, один из которых неустойчив, а другой – асимптотически устойчив. При этом производная $f'(y)$ на неустойчивом стационаре равна нулю. Вид функции $f(y)$ в двух случаях представлен на рис. 4.3, *а* и *б*. Волны переключения, возникающие в таких случаях, называются *фазовыми*. В отличие от триггерных волн переключения, фазовые волны не обладают однозначно определенной скоростью распространения. Их скорость распространения может быть больше некоторой минимальной $V \geq V_{\min}$. Если $f(y)$ представляет собой полином третьей степени, то, чтобы найти минимальную скорость, нужно в формуле (4.7) положить $y_2 = y_1$:

$$V_{\min} = \sqrt{\frac{Da}{2}}(y_3 - y_1). \tag{4.9}$$

Если функция $f(y)$ имеет вид, представленный на рис. 4.3, *а*, то возникает фазовая волна, переключающая систему из состояния $y_1$ в состояние $y_3$. В

случае, представленном на рис. 4.3, *б*, фазовая волна переключает систему из состояния $y_3$ в состояние $y_1$.

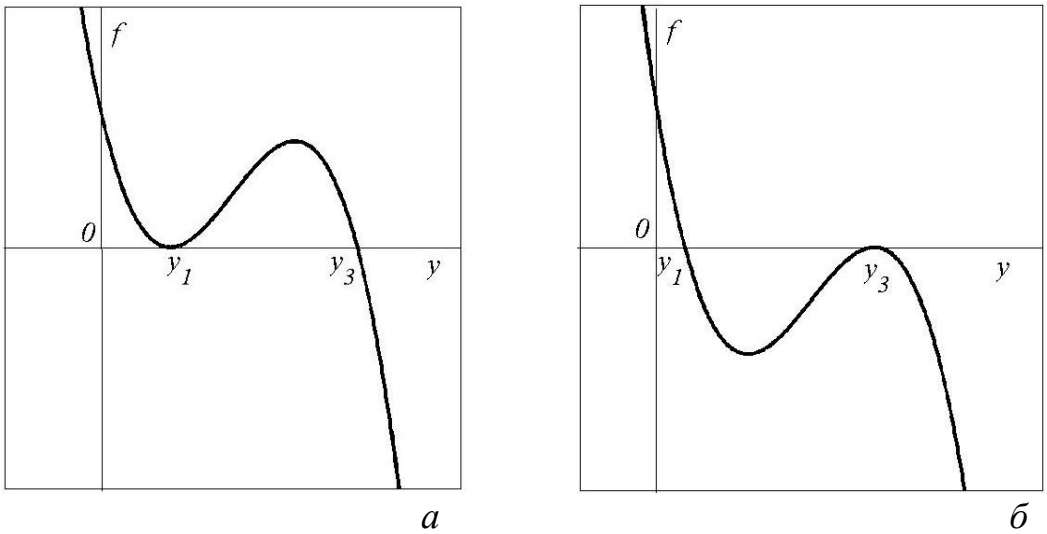



Рис. 4.3. Графики функции *f*(*y*), при которой в системе (4.1) могут возникнуть фазовые волны переключения

Исследования устойчивости показали, что, как правило, фазовая волна, отвечающая минимальной скорости, устойчива.

## 4.2. Волны переключения в двухкомпонентной модели реакции Филда–Кереша–Нойеса

Исследуем распределенную модель реакции Филда–Кереша–Нойеса, добавив в точную систему (2.4) диффузионный член. Точечная модель рассматривалась выше разделе 2.4. Было показано, что при определенных условиях она демонстрирует релаксационные автоколебания. Теперь покажем, что она при других значениях параметров может иметь область множественности стационарных состояний и демонстрировать бистабильность. Стационары лежат на пересечении изоклин точечной системы (2.4):

$$\begin{cases} f_1(y_1, y_2) = y_1(1 - y_1) - \dfrac{y_2(y_1 - a)}{(y_1 + a)} = 0, \\ f_2(y_1, y_2) = by_1 - y_2 + b_0 = 0, \end{cases} \tag{4.10}$$

где $0 < a < 1,\ \ 0 < b,\ \ 0 \le b_0$ – параметры.

Рассмотрим фазовую плоскость $(y_1, y_2)$. Первая изоклина $f_1(y_1, y_2) = 0$ имеет $S$-образный характер, а вторая изоклина представляет собой прямую, которая в зависимости от значений параметров может пересекать первую изоклину в одной, двух или трех точках. На рис. 4.4 изображена фазовая плоскость системы для двух наборов параметров. Мы видим, что вторая изоклина, она изображена пунктирной линией, в обоих случаях пересекает первую изоклину в трех точках $p_1$, $p_2$ и $p_3$. Состояния $p_1$ и $p_3$ устойчивы, а состояние $p_2$ неустойчиво и имеет тип седла.

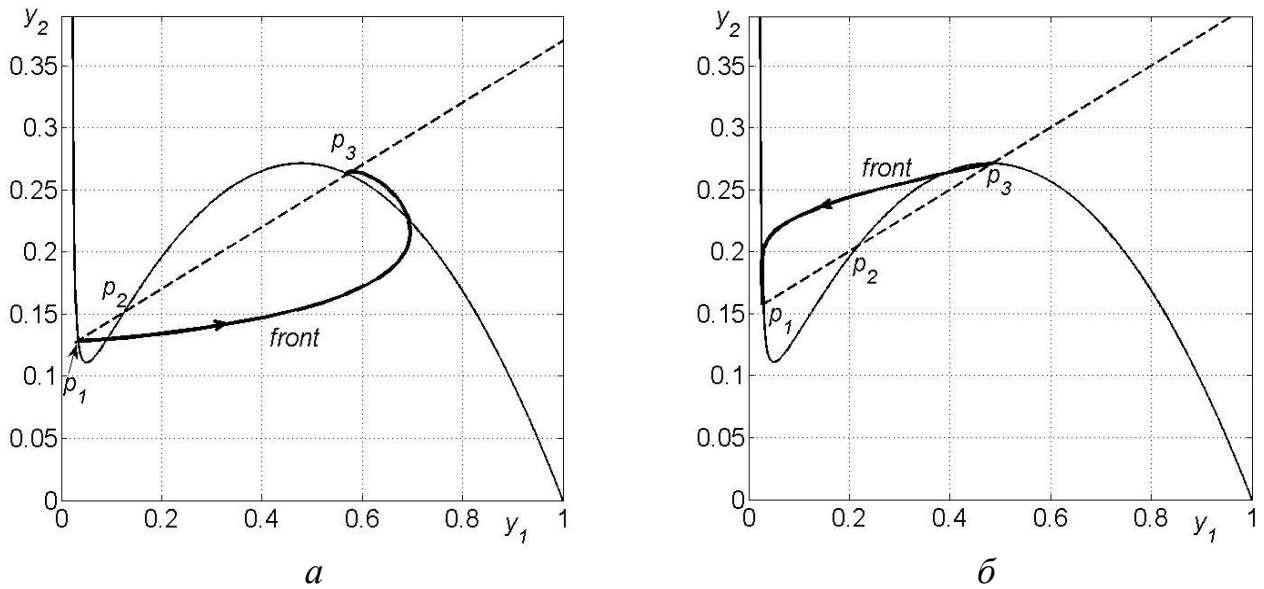



Рис. 4.4. Фазовая плоскость модели; $p_1$, $p_2$ и $p_3$ – стационарные точки. Траектория фронта выделена жирной линией (*front*). Параметры модели: $a$=0,02, $b$=0,25, $\varepsilon$=0,9, $b_0$: *а* – $b_0$=0,12, волна переключения из $p_1$ в $p_3$; *б* – $b_0$=0,15, волна пеключения из $p_3$ в $p_1$

Значит, в распределенной системе с диффузией в этих случаях могут существовать волны переключения. Чтобы найти направление переключения, из уравнения $f_2(y_1, y_2) = 0$ выразим $y_2$ через $y_1$ и подставим в уравнение $f_1(y_1, y_2) = 0$, получим:

$$f(y_1) = y_1(1 - y_1) - \frac{(by_1 + b_0)(y_1 - a)}{(y_1 + a)}. \tag{4.11}$$

Найдем численно корни $p_1$, $p_2$ и $p_3$ функции (4.11) и вычислим интеграл:

$$U = \int_{p_1}^{p_3} f(y)dy.$$

Знак интеграла определяет направление переключения. Так в первом случае при $b_0 = 0{,}12$ $U > 0$ и переключение идет в сторону $p_1 \to p_3$, а во втором случае при $b_0 = 0{,}15$ $U < 0$ и переключение направлено из $p_3 \to p_1$.

Теперь численно построим волны переключения в системе с диффузией:

$$\begin{aligned} \frac{\partial y_1(x,t)}{\partial t} &= D_1 \frac{\partial^2 y_1}{\partial x^2} + \frac{1}{\varepsilon} f_1(y_1, y_2), \\ \frac{\partial y_2(x,t)}{\partial t} &= D_2 \frac{\partial^2 y_2}{\partial x^2} + f_2(y_1, y_2), \end{aligned} \tag{4.12}$$

Рассмотрим задачу на прямой ($-\infty < x < +\infty$) с граничными условиями:

$$y(x,t) \underset{x\to\infty}{\to} p_1, \quad y(x,t) \underset{x\to-\infty}{\to} p_3.$$

При численной реализации задачи будем использовать отрезок $0 \le x \le L$ достаточно большой длины, введем сетку и напишем разностную аппроксимацию уравнений на сетке. Начальное распределение концентраций на отрезке возьмем в виде ступеньки, на верхней части которой зададим стационар $p_3$, а на нижней части – стационар $p_1$ (рис. 4.5: тонкая сплошная линия для концентрации $y_1(x,0)$ и тонкая пунктирная линия для $y_2(x,0)$).

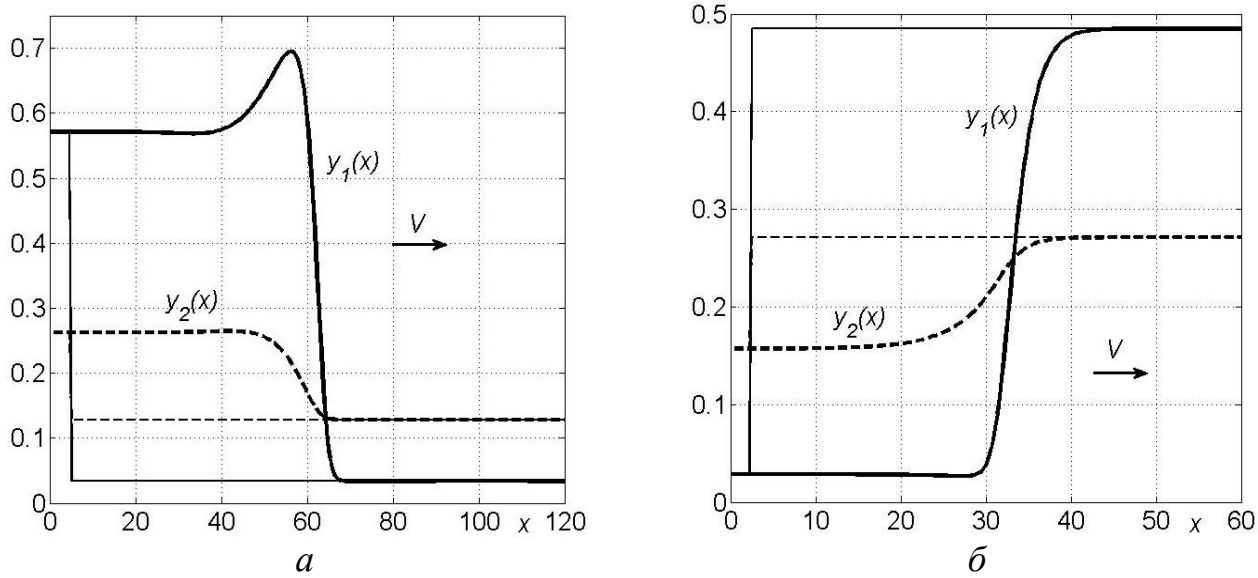



Рис. 4.5. Волны переключения в модели Филда–Кереша–Нойеса для значений параметров: $a$=0,02, $b$=0,25, $\varepsilon$=0,9, $D_1$=$D_2$=10:
*а* – $b_0$=0,12, прямая волна (переключение из $p_1$ в $p_3$);
*б* – $b_0$=0,15, инверсная волна (переключение из $p_3$ в $p_1$)

Расчеты показали, что действительно, в первом случае формируется фронт, который переводит среду из состояния $p_1$ в состояние $p_3$, а во втором случае – из состояния $p_3$ в состояние $p_1$. Профили установившихся автомодельных решений, описывающие волны переключения, представлены на рис. 4.5, *а* и *б* жирными линиями, а соответствующие траектории на фазовой плоскости показаны на рис. 4.4, *а* и *б*. Ширина фронта и его скорость продвижения зависят от значений коэффициентов диффузии. С увеличением коэффициентов диффузии ширина фронта становится больше.

## 4.3. Волны переключения в модели STM

Рассмотрим поиск волн переключения в более сложной трехкомпонентной системе. Возьмем модель STM реакции $CO+O_2$, происходящей на поверхности платины. Ранее было показано, что точечная модель (1.50) этой реакции демонстрирует автоколебания и множественность стационарных состояний при определенных значениях параметров. В этой модели существуют области бистабильности, в которых могут распространяться волны переключения.

В систему ОДУ (1.50), описывающую изменение поверхностных концентраций адсорбированных частиц [CO] – $y_1$, кислорода [O] – $y_2$ и припо-

верхностного кислорода [$O_v$] – $y_3$, добавим диффузионные члены. Распределенная математическая модель будет иметь вид:

$$\frac{\partial y_i(x,t)}{\partial t} = D_i\left( z\frac{\partial^2 y_i}{\partial x^2} + y_i \sum_{j=1}^{3}\frac{\partial^2 y_j}{\partial x^2}\right) + f_i, \quad i = 1,2,3 \ , \tag{4.13}$$

где $f_i$ – правые части системы ОДУ (1.50); $z = 1 - y_1 - y_2 - y_3$; $D_1$, $D_2$, $D_3$ – коэффициенты диффузии ($D_1 >> D_2 \sim D_3$).

Возьмем следующий набор параметров: $k_1 = P_{CO} \cdot 10^4$ с$^{-1}$Торр$^{-1}$, $k_{-1} = 0{,}02$ с$^{-1}$, $k_2 = 0{,}5$с$^{-1}$, $k_{-2} = 0$ с$^{-1}$, $k_3 = 100$ с$^{-1}$, $k_4 = 0{,}03$ с$^{-1}$, $k_5 = 0{,}06$ с$^{-1}$ и проведем параметрический анализ точечной модели (1.50) по методике, описанной в первой главе. На рис. 4.6, *а* представлены результаты однопараметрического анализа стационарных состояний модели в зависимости от давления $P_{CO}$. На интервале $(P_{sn_1}, P_{sn_2})$ между двумя точками седло-узловой бифуркации $sn_1$ и $sn_2$ располагается область множественности стационарных состояний. На интервале $(P_{sn_1}, P_h)$ система имеет два устойчивых состояния и одно неустойчивое (бистабильная среда), а на интервале $(P_h, P_{sn_2})$ – одно устойчивое и два неустойчивых. В точке бифуркации $h$ теряет устойчивость стационар, отвечающий наименьшей концентрации [CO].

Таким образом, бифуркационный анализ точечной модели выявил область бистабильности $(P_{sn_1}, P_h)$, в которой могут существовать устойчивые волны переключения в распределенной модели (4.13).

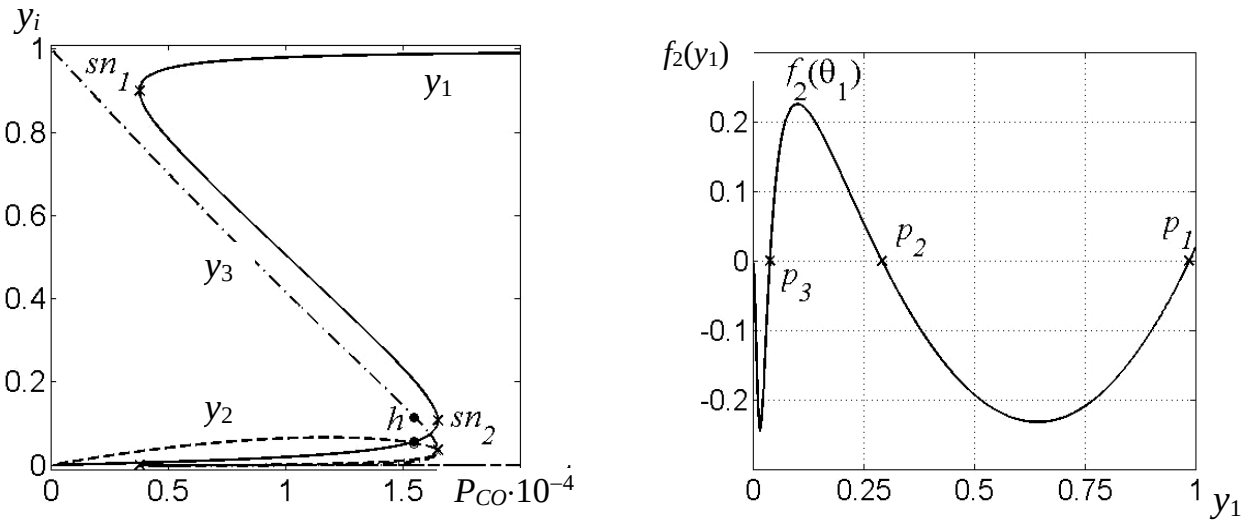
Направление переключения также определяется с помощью точечной модели. Для определения направления переключения из системы для стационаров (1.52) с помощью первого и третьего уравнений исключим переменные $y_2$ и $y_3$, и получим эквивалентное системе уравнение $f_2(y_1) = 0$. Рассмотрим функцию $f_2(y_1)$, ее график изображен на рис. 4.6, *б*. Вычислим интеграл

$$I = \int_{y_1(p_3)}^{y_1(p_1)} f_2(y)dy, \tag{4.14}$$

где нижняя и верхняя границы интегрирования равны значениям переменной $y_1$ в устойчивых стационарах точечной модели: $p_3$ и $p_1$, $y_1(p_3) < y_1(p_1)$.

Если $I < 0$, то переключение идет из $p_3$ в $p_1$, и стационар $p_3$ с низкой концентрацией молекул [CO] вытесняется стационаром $p_1$ с высокой концентрацией [CO]. Это соответствует распространению волны [CO].

Если $I > 0$, то, наоборот, переключение идет из $p_1$ в $p_3$, или $p_1 \to p_3$, и стационар $p_1$ с низкой концентрацией поверхностного и приповерхностного кислорода вытесняется стационаром $p_3$ с высокой концентрацией кислорода, что соответствует распространению кислородной волны.




*а* *б*

Рис. 4.6. Стационарные состояния в точечной системе:
*а* – зависимость стационарных решений от давления $P_{CO}$;
*б* – график функции $f_2(y_1)$, определяющий направление переключения при $k_1$=1,4

***Волна* CO.** Возьмем давление $P_{CO} = 1{,}4 \cdot 10^{-4}$ Торр; тогда интеграл (4.14) $I < 0$, и, следовательно, в модели с диффузией (4.13) должна возникнуть волна [CO]. Рассмотрим задачу построения волны переключения в распределенной модели. Коэффициенты диффузии положим следующими: $D_1$=100, $D_2$=$D_3$=10. На отрезке $0 \le x \le L$ достаточно большой длины зададим начальные данные в виде сглаженной ступеньки между стационарами $p_1$ и $p_3$. Граничные условия будут иметь вид:

$$y(x,t) \underset{x\to\infty}{\to} p_1, \quad y(x,t) \underset{x\to-\infty}{\to} p_3.$$

Расчеты показали, что с течением времени формируется волна переключения, которая без изменения своей формы смещается с постоянной скоростью в сторону стационара $p_1$, как и показали предварительные исследования. Профиль сформировавшейся волны переключения изображен на рис. 4.7, *а*. Она имеет вид волны CO; после прохождения фронта поверхность почти полностью покрывается молекулами CO.

На рис. 4.7, *б* изображен фазовый портрет системы, отмечены стационарные точки и изоклины точечной модели. Жирной линией выделена сепаратриса, описывающая фронт. Она выходит из стационарной точки $p_3$, приближается к одной из притягивающих ветвей изоклины $f_2 = 0$ и далее следует вдоль нее вплоть до стационарной точки $p_1$. На фронте происходит восстановление поверхности из окисленного состояния в состояние, почти полностью покрытое молекулами [CO].

Отметим, что в точечной модели существуют траектории, которые начинаются вблизи стационарной точки $p_3$ и приходят в стационарную точку $p_1$. Эти траектории быстро приближаются к притягивающей ветви изоклины $f_2 = 0$ и далее медленно следуют вдоль нее вплоть до точки $p_1$. Они описывают достаточно хорошо форму фронта, который возникает в распределенной

системе, и могут быть использованы для построения начального приближения волны переключения.

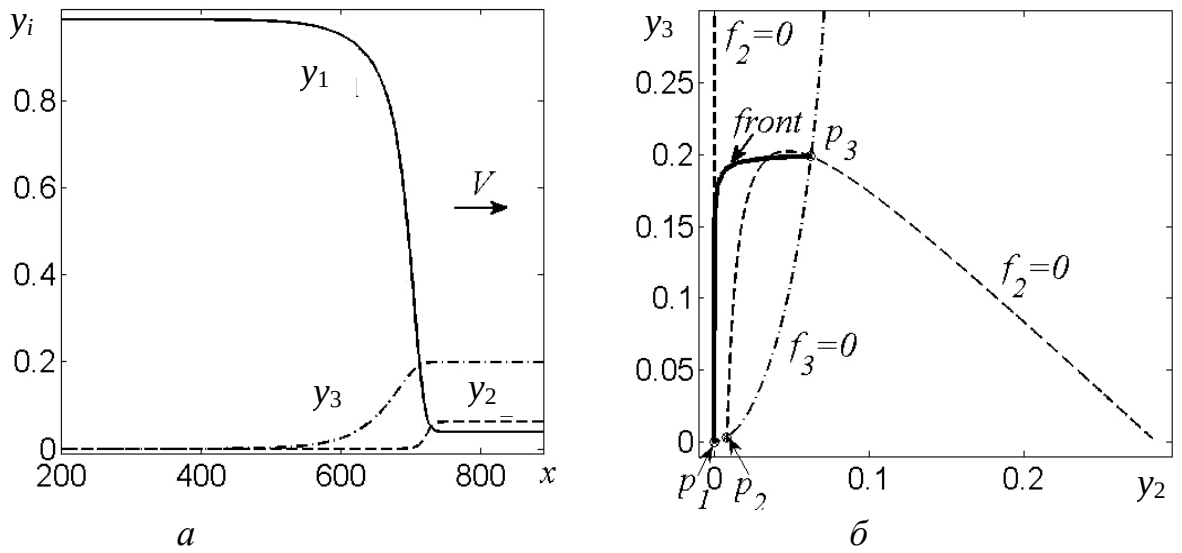
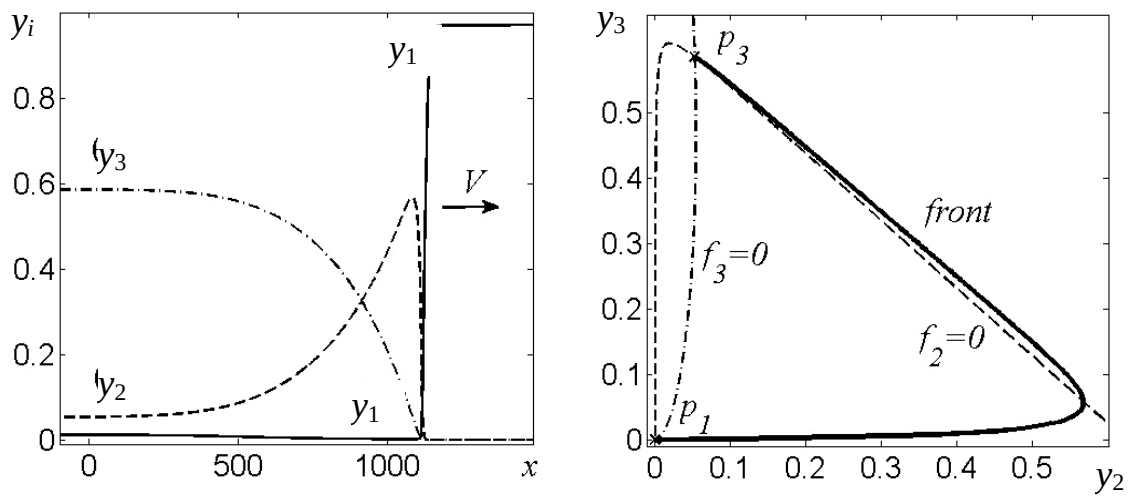



Рис. 4.7. Волна переключения CO в модели STM:
*а* – профиль фронта; *б* – фазовый портрет системы; траектория, соответствующая волне переключения, изображена жирной линией

***Кислородная волна.*** Теперь положим давление $P_{\mathrm{CO}} = 0{,}7 \cdot 10^{-4}$ Торр; тогда интеграл (4.14) $I > 0$ и, следовательно, в распределенной модели должна существовать кислородная волна переключения, осуществляющая переход из состояния $p_1$ в состояние $p_3$. Возьмем те же коэффициенты диффузии и зададим начальные данные в виде сглаженной ступеньки между стационарами $p_1$ и $p_3$. Расчеты показали, что, как и ожидалось, с течением времени формируется волна переключения, смещающаяся в сторону стационара $p_3$. В отличие от волны [CO], кислородная волна переключения имеет немонотонный профиль (рис. 4.8, *а*). Особенно сильно изменяется концентрация адсорбированного кислорода на фронте. Сначала она резко возрастает со значения $4{,}71 \cdot 10^{-6}$ на стационаре $p_1$ до значения примерно 0,6, а затем плавно опускается до значения $5{,}336 \cdot 10^{-2}$ на стационаре $p_3$.

На рис. 4.8, *б* изображена фазовая плоскость рассматриваемой системы. Сепаратриса, описывающая волну переключения (отмечена жирной линией), в рассматриваемом случае идет вдоль другой притягивающей ветви изоклины $f_2 = 0$. Это совпадает с фазовым портретом точечной модели, в которой траектории, начинающиеся вблизи стационарной точки $p_1$, сначала притягиваются к правой ветви изоклины $f_2 = 0$ и затем следуют вдоль нее вплоть до точки $p_3$, при этом происходит медленное окисление поверхности.




*а* *б*

Рис. 4.8. Кислородная волна переключения в модели STM:
*а* – профиль фронта; *б* – фазовый портрет системы;
траектория фронта изображена жирной линией

Таким образом, изучение точечной модели позволяет не только найти области бистабильности, где могут существовать волны переключения, и определить направление переключения, но и установить форму траектории в фазовом пространстве системы, описывающую фронт.

## 5. Уединенные бегущие импульсы

### 5.1. Механизм формирования импульса

Одиночные бегущие волны могут возникать в возбудимых средах с диффузией. Возбудимая среда определяется особой конфигурацией изоклин точечной системы и наличием устойчивого стационарного состояния, вблизи которого существуют траектории, которые от него сначала удаляются, а затем к нему асимптотически приближаются. Методы нахождения возбудимых стационаров рассмотрены в главе 2.

Механизм формирования одиночного импульса в возбудимой среде изучим на примере базовой двухкомпонентной системы типа реакция–диффузия:

$$\begin{aligned} \frac{dy_1(x,t)}{\partial t} &= D_1 \frac{\partial^2 y_1}{\partial x^2} + \frac{1}{\varepsilon} f_1(y_1, y_2), \\ \frac{dy_2(x,t)}{\partial t} &= D_2 \frac{\partial^2 y_1}{\partial x^2} + f_2(y_1, y_2), \end{aligned} \qquad -\infty < x < \infty \tag{5.1}$$

с начальными данными:

$$y_1(x,0) = y_1{}^0(x), \quad y_2(x,0) = y_2{}^0(x).$$

Функции $f_1$ и $f_2$ описывают «реакцию», $\varepsilon$ – малый параметр. $D_1$, $D_2$ – коэффициенты диффузии; во многих случаях можно положить $D_2 = 0$. Пусть

первая изоклина системы $f_1 = 0$ имеет *S*-образный характер, а вторая изоклина $f_2 = 0$ пересекает первую в точке *A* – единственной устойчивой стационарной точке *p*, находящейся вблизи поворота *S*-образной изоклины, как это показано на рис. 5.1, *а*. Тогда система (5.1) является возбудимой и может проводить импульсы.

Уединенные бегущие импульсы описываются автомодельными решениями системы (5.1) типа бегущей волны, зависящими от одной автомодельной переменной $\xi$ (4.3). Профиль и скорость импульса находятся из системы автомодельных уравнений:

$$D_1 \frac{d^2 y_1}{d\xi^2} + V \frac{dy_1}{d\xi} + \frac{1}{\varepsilon} f_1(y_1, y_2) = 0,$$
$$D_2 \frac{d^2 y_2}{d\xi^2} + V \frac{dy_2}{d\xi} + f_2(y_1, y_2) = 0. \qquad (5.3)$$

и граничных условий на бесконечности:

$$y_1(\xi) \to y_{1s}, \quad y_2(\xi) \to y_{2s} \quad \text{при} \quad \xi \to \pm\infty, \qquad (5.4)$$

где $y_{1s}$, $y_{2s}$ – устойчивое стационарное состояние *p*.

Аналитическое решение задачи (5.3), (5.4) удалось получить только в нескольких самых простых моделях, в частности, для кусочно-линейных функций $f_1$ и $f_2$.

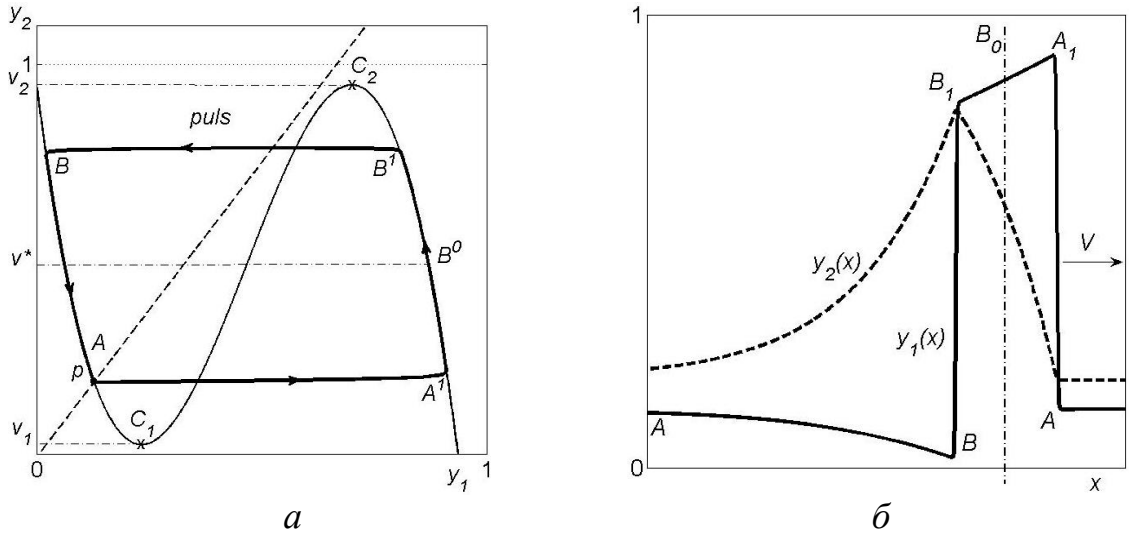



Рис. 5.1. Уединенный бегущий импульс в возбудимой среде:
*а* – траектория $AA^1B^1BA$ на фазовой плоскости; *б* – профиль импульса

Импульс представляет собой диссипативную структуру, имеющую вид солитона. Характерный профиль одиночного импульса изображен на рис. 5.1, *б*. Его условно можно разделить на 4-е части. Рассмотрим функцию $y_1(x)$. Импульс имеет резкий передний фронт ($A_1A$) и резкий задний фронт – спад ($B_1B$), где функция $y_1$ быстро меняется, а также области медленного изменения

функции $y_1$ – это вершина импульса ($A_1B_1$) и следующий за спадом «хвост» ($BA$). Функция $y_2$ не совершает быстрых изменений – она медленно возрастает при прохождении импульса до некоторого значения $\bar{\bar{y}}_2$, а затем еще более плавно спадает до стационарного значения $y_{2s}$. Движущийся импульс имеет несимметричную форму, и задний фронт всегда более пологий.

Чтобы качественно объяснить механизм образования импульса, условно разделим его профиль пополам по линии $B_0$, как показано на рис. 5.1, *б*, тогда область фронта и область спада импульса можно рассмотреть как две волны переключения, движущиеся друг за другом с одной скоростью. На фронте происходит переключение состояния $y_{1s}$ в некоторое возбужденное состояние $\tilde{y}_1$, а на спаде – обратное переключение – возврат в стационарное состояние $y_{1s}$. Переключением функции $y_1$ управляет при этом медленно меняющаяся переменная $y_2$. При небольших значениях $y_2$ может происходить только прямое переключение, а при больших – только обратное переключение. Поясним, как это происходит. В областях фронта и спада, где резко изменяется $y_1$, величину $y_2$ можно считать постоянной. Это означает, что поведение функции $y_1$ на фронте и спаде описывается первым уравнением системы (5.1), в котором переменная $y_2$ является параметром. Но это уравнение описывает волны переключения в бистабильной среде, рассмотренные выше. Пусть на фронте $y_2 = \bar{y}_2$, а на спаде $y_2 = \bar{\bar{y}}_2$, в промежутке между ними переменная $y_2$ меняется в диапазоне: $\bar{y}_2 \le y_2 \le \bar{\bar{y}}_2$. Направление переключения (но не направление движения!) определяется знаком интеграла:

$$U(y_2) = \int_{\bar{y}_1(y_2)}^{\bar{\bar{y}}_1(y_2)} f_1(y_1, y_2)dy_1 \qquad (5.5)$$

Если $U(y_2) > 0$, то переключение происходит из состояния $\bar{y}_1$ в состояние $\bar{\bar{y}}_1$, то есть с левой ветви *S*-образной изоклины на правую; такая волна переключения может описывать фронт импульса (линия $AA^1$ на рис. 5.1, *а*). Если же $U(y_2) < 0$, то переключение происходит из $\bar{\bar{y}}_1$ в $\bar{y}_1$, то есть, наоборот – с правой ветви *S*-образной изоклины – на левую; такая волна переключения может отвечать спаду импульса (линия $B^1B$). Между фронтом и спадом по мере того, как система движется вдоль изоклины по кривой ($A^1B^1$), функция $y_2$ возрастает от значения $y_2 = \bar{y}_2$ до значения $\bar{\bar{y}}_2$, при этом интеграл $U(y_2)$ меняет знак, а значит и изменяется направление переключения. Положение заднего фронта ($B^1B$) (значение $y_2 = \bar{\bar{y}}_2$) определяется скоростью движения переднего фронта. Во многих системах имеются механизмы, заставляющие задний фронт подстраиваться к переднему и двигаться с одной скоростью, то есть, приводящие к формированию единой структуры. В этом процессе синхронизации особую роль играет диффузия.

***Замечание 1.*** Волна переключения в некоторых случаях стоит на месте, $V$=0. Уединенный бегущий импульс в некоторых случаях может стоять на месте. Тогда импульс представляет собой *симметричную локализованную диссипативную структуру*.

Существуют нелинейные системы, в которых импульсы могут колебаться как регулярно с определенным периодом, так и хаотически. При этом колеблющийся импульс или перемещается в пространстве, или стоит на месте. В последнем случае он представляет собой *дышащую локализованную структуру*.

***Замечание 2.*** Импульсы бывают устойчивыми и неустойчивыми. Устойчивые импульсы играют роль аттракторов для широкого класса начальных распределений. Задав некоторое сверхкритическое возмущение стационара в начальный момент времени, можно наблюдать формирование уединенной бегущей волны, которая бежит по стационару с постоянной скоростью без изменения своей формы. В этом случае говорят, что начальное распределение вышло на автомодельное решение типа бегущего импульса.

Неустойчивый импульс можно найти, только решив автомодельную задачу (5.3), (5.4). Хотя неустойчивые импульсы не наблюдаются в натурных экспериментах, они описывают важнейшие гомоклинические траектории в фазовом пространстве системы, влияющие на общую динамику.

### 5.2. Уединенные бегущие импульсы в модели ФитцХью–Нагумо

Модель ФитцХью–Нагумо является одной из наиболее известных систем, демонстрирующих возбудимую динамику. Она была предложена для описания прохождения импульсов по нервному волокну. В основе модели лежит система двух дифференциальных уравнений типа реакция–диффузия (5.1), в которой функции, описывающие взаимодействия, имеют вид:

$$\begin{cases} f_1(y_1, y_2) = -a(y_1 - a_1)(y_1 - a_2)(y_1 - a_3) - y_2 + a_0, \\ f_2(y_1, y_2) = by_1 - y_2. \end{cases} \tag{5.6}$$

Таким образом, функция $f_1$ представляет собой кубический полином и на фазовой плоскости ($y_1$,$y_2$) имеет $S$-образный характер, а функция $f_2$ – линейная. (В исходной модели ФитцХью–Нагумо функция $f_1 = -y_1+y_1^3/3-y_2+a$).

Возьмем следующий набор параметров:

$$a=18,\quad a_1=0{,}1,\quad a_2=0{,}4,\quad a_3=0{,}9,\quad a_0=0{,}3,\quad b=1{,}5.$$

В этом случае вторая изоклина пересекает первую в единственной точке $p$, находящейся на устойчивой ветви изоклины $f_1$, как это показано на рис. 5.1, *а*, что обеспечивает возбудимую динамику и возможность возникновения импульсов в системе с диффузией (5.6).

Импульс на рис. 5.1, *б* был получен в модели ФитцХью–Нагумо при коэффициентах диффузии $D_1 = D_2 = 100$ и малом параметре $\varepsilon$ =0,01. На рис. 5.2, *b* представлен вид уединенного бегущего импульса в этой модели для

другого набора параметров: $D_1 = D_2 = 10$, $\varepsilon$ =0,1. Поскольку в этом случае параметр $\varepsilon$ не слишком мал, форма импульса – более плавная.

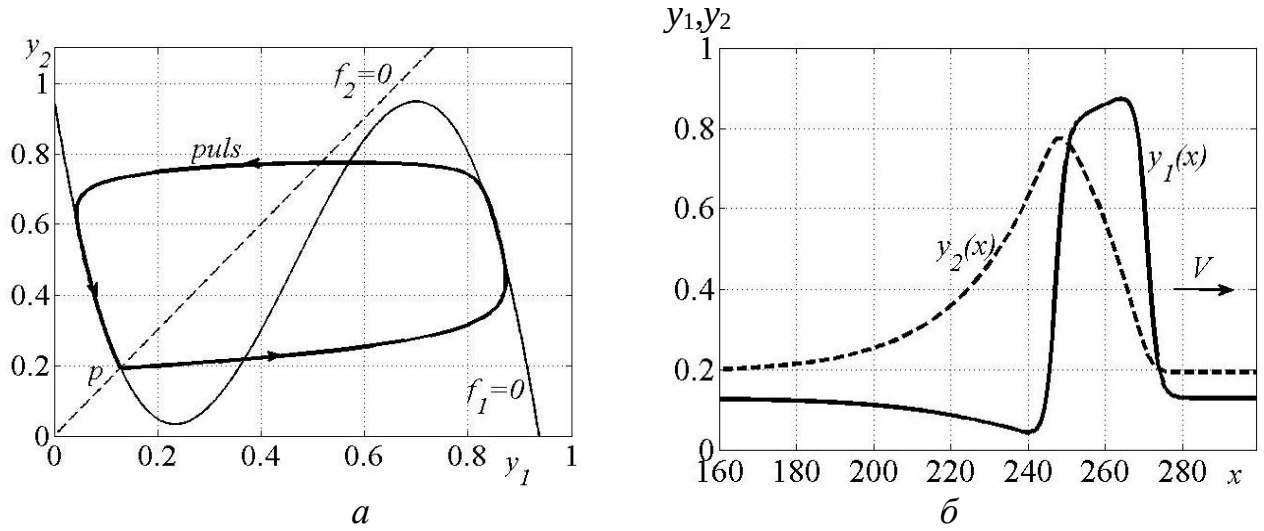



Рис. 5.2. Уединенный бегущий импульс в модели ФитцХью–Нагумо:
*а* – траектория импульса на фазовой плоскости; *б* – профиль импульса

Импульс рассчитывался в среде МАТЛАБ и получался в расчетах методом на установление. Брался отрезок достаточно большой длины, превышающий характерный размер импульса в несколько раз. Начальные данные задавались в виде ступеньки, которая стояла на стационаре *p*. Ступенька располагалась с левой стороны отрезка. Высота ступеньки соответствовала вершине импульса и находилась из решения системы ОДУ, это точка $A_1$ на рис. 5.1, *а*. На границе отрезка задавались условия Неймана. Вводилась сетка с числом узлов 500 ÷ 1000. Использовалась стандартная программа, предназначенная для решения систем типа реакция-диффузия.

В численных расчетах сначала происходила перестройка начального профиля, а затем наблюдался выход на автомодельное решение – уединенную волну, которая двигалась по стационару *p* с постоянной скоростью без изменения своей формы.

### 5.3. Уединенные импульсы в модели Филда–Кереша–Нойеса

Снова обратимся к модели реакции Филда–Кереша–Нойеса, которую мы рассматривали и при изучении автоколебаний, и при изучении волн переключения. Покажем теперь, что при определенных параметрах она может демонстрировать еще один тип активной динамики – возбудимую.

Модель Филда–Кереша–Нойеса относится к типу систем (5.1). Правые части, описывающие реакцию, задаются функциями:

$$f_1(y_1, y_2) = y_1(1 - y_1) - \frac{y_2(y_1 - a)}{(y_1 + a)},$$
$$f_2(y_1, y_2) = by_1 - y_2 + b_0. \qquad (5.7)$$

Параметры $a$, $b$, $b_0$ – неотрицательные: $0 < a < 1,\ 0 < b,\ 0 \le b_0$.

Поскольку первая изоклина $f_1 = 0$ имеет на фазовой плоскости $S$-образный характер, а вторая изоклина $f_2 = 0$ может пересекать первую в единственной устойчивой стационарной точке, находящейся вблизи поворота, то эта модель имеет необходимые условия, чтобы демонстрировать возбудимую динамику.

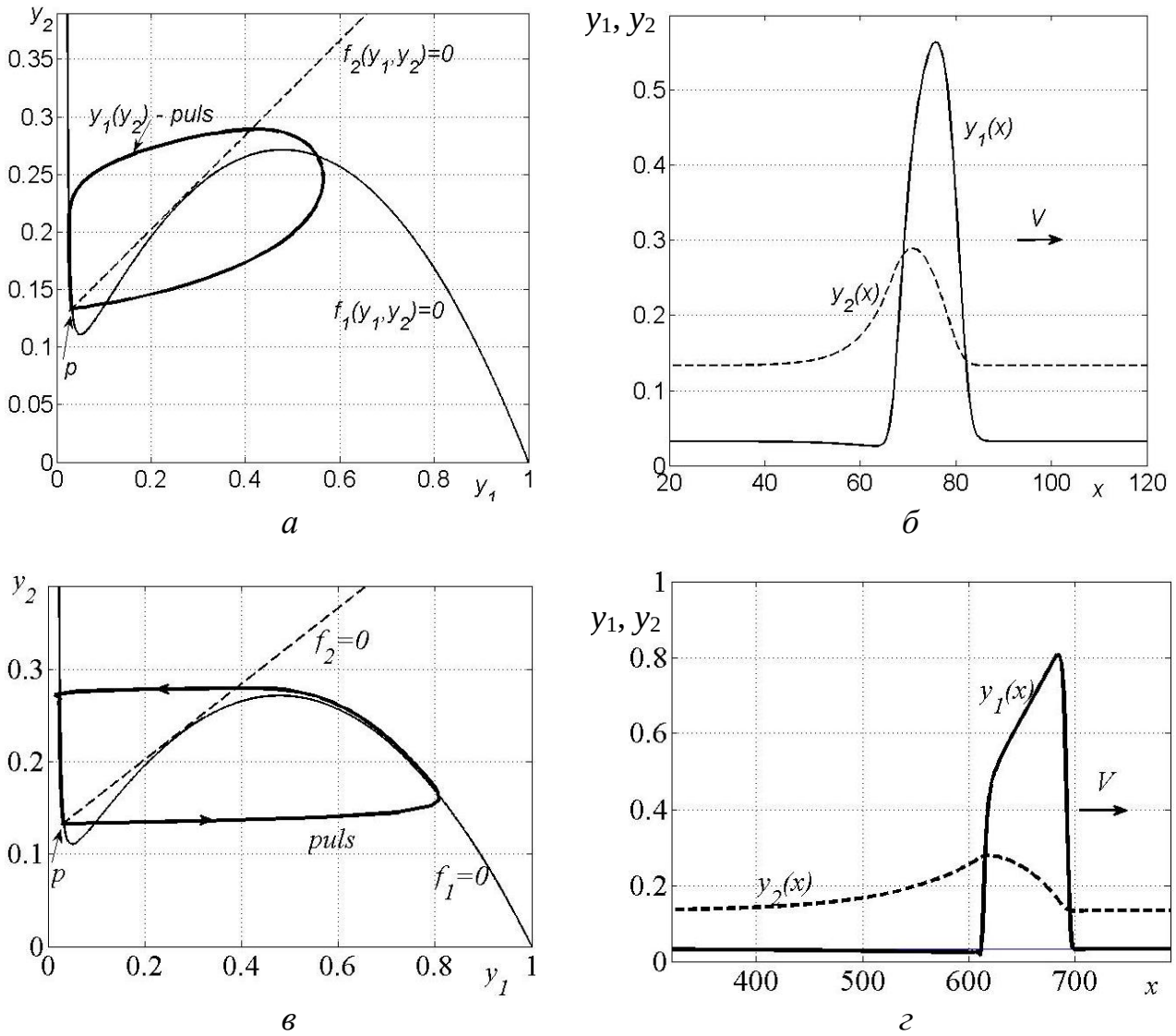



Рис. 5.3. Уединенные бегущие импульсы в модели Филда–Кереша–Нойеса:
*а, в* – траектории импульсов на фазовой плоскости; *б, г* – профили импульсов;
*а, б* – $\varepsilon$=0,1; *в, г* – $\varepsilon$=0,01

Зададим параметры, определяющие возбудимую среду, например, $a = 0{,}02,\ b = 0{,}4,\ b_0 = 0{,}12$, и построим уединенные бегущие волны в модели типа реакция-диффузия (5.1), (5.7). Устойчивое автомодельное решение найдем методом на установление, как это было сделано в модели ФитцХью–Нагумо. Начальные данные зададим в виде ступеньки. На рис. 5.3, *б* и *г* изображены полученные в расчетах уединенные импульсы для двух значений малого

параметра: $\varepsilon = 0{,}1$ и $\varepsilon = 0{,}01$ и коэффициентов диффузии $D_1$=$D_2$=10. А на рис. 5.3, *а* и *в* показаны их образы в фазовом пространстве системы. Мы видим, что для значения $\varepsilon = 0{,}1$ передний и задний фронты импульса – более плавные, чем в случае $\varepsilon = 0{,}01$. Кроме того, его ширина на порядок уже. Это следовало ожидать, поскольку ширина импульса определяется временем медленного движения изображающей точки вдоль ветвей *S*-образной изоклины, а в случае $\varepsilon = 0{,}1$ точка двигается примерно на порядок быстрее, чем при $\varepsilon = 0{,}01$.

# ПРИЛОЖЕНИЕ 1. КУРСОВЫЕ ЗАДАЧИ

## П.1.1 ЗАДАЧИ К РАЗДЕЛУ 1: Построение параметрического портрета системы. Нахождение областей множественности стационарных состояний и автоколебаний

### Модель № 1

Рассмотреть автокаталитическую химическую реакцию, происходящую на поверхности катализатора. Кинетическая схема реакции имеет вид:

$$1)\ X + * \underset{k_{-1}}{\overset{k_{+1}}{\Leftrightarrow}} [X], \quad 2)\ [X] + 2* \xrightarrow{k_2} 3* + X, \quad 3)\ Y + * \underset{k_{-3}}{\overset{k_{+3}}{\Leftrightarrow}} [Y].$$

Схеме отвечает математическая модель, описывающая изменение концентраций адсорбированных веществ $[X]$ и $[Y]$, $x$ и $y$:

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= k_1 z - k_{-1} x - k_2 z^2 x, \\ \frac{dy}{dt} &= k_3 z - k_{-3} y. \end{aligned} \qquad (П1)$$

Здесь $z = 1 - x - y$ – концентрация свободных мест.

$$0 \le x \le 1, \quad 0 \le y \le 1, \quad 0 \le x + y \le 1.$$

Базовый набор параметров: $k_2$=2; $k_{-3}$=0,003; $k_3$=0,0032; $k_{-1}$=0,03; $k_1$=0,3.

### Модель № 2

Рассмотреть автокаталитическую химическую реакцию, происходящую на поверхности катализатора. Кинетическая схема реакции имеет вид:

$$1)\ X + * \underset{k_{-1}}{\overset{k_{+1}}{\Leftrightarrow}} [X], \quad 2)\ [X] + 2* \xrightarrow{k_2} 3* + X, \quad 3)\ Y + 2* \underset{k_{-3}}{\overset{k_{+3}}{\Leftrightarrow}} [Y].$$

Схеме отвечает математическая модель, описывающая изменение концентраций адсорбированных веществ $[X]$ и $[Y]$, $x$ и $y$:

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= k_1 z - k_{-1} x - k_2 z^2 x, \\ \frac{dy}{dt} &= k_3 z^2 - k_{-3} y. \end{aligned} \qquad (П2)$$

Здесь $z = 1 - x - 2y$ – концентрация свободных мест.

$$0 \le x \le 1,\ \ 0 \le y \le 0{,}5,\quad 0 \le x + 2y \le 1.$$

Базовый набор параметров: $k_1$ = 0,12, $k_1^-$ = 0,01, $k_3$ = 0,0032, $k_2$ = 2,5, $k_3^-$ = 0,001.

**Модель № 3**

Рассмотреть автокаталитическую химическую реакцию, происходящую на поверхности катализатора. Кинетическая схема реакции имеет вид:

$$1)\ X + * \underset{k_{-1}}{\overset{k_{+1}}{\Leftrightarrow}} [X],\quad 2)\ [X] + 2* \xrightarrow{k_2} 3* + X,\quad 3)\ Y + 2* \underset{k_{-3}}{\overset{k_{+3}}{\Leftrightarrow}} 2[Y].$$

Схеме отвечает математическая модель, описывающая изменение концентраций адсорбированных веществ $[X]$ и $[Y]$, $x$ и $y$:

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= k_1 z - k_{-1}x - k_2 z^2 x, \\ \frac{dy}{dt} &= k_3 z^2 - k_{-3} y^2. \end{aligned} \qquad (П3)$$

Здесь $z = 1 - x - y$ – концентрация свободных мест.

$$0 \le x \le 1,\ \ 0 \le y \le 1,\quad 0 \le x + y \le 1.$$

Базовый набор параметров: $k_1$ = 0,12, $k_1^-$ = 0,005, $k_3$ = 0,0032, $k_2$ = 1,05, $k_3^-$ = 0,002.

**Модель № 4**

Рассмотреть автокаталитическую химическую реакцию, происходящую на поверхности катализатора. Кинетическая схема реакции имеет вид:

$$1)\ X + * \underset{k_{-1}}{\overset{k_{+1}}{\Leftrightarrow}} [X],\quad 2)\ [X] + 2* \xrightarrow{k_2} 3* + X,\quad 3)\ [X] \underset{k_{-3}}{\overset{k_{+3}}{\Leftrightarrow}} [Y].$$

Схеме отвечает математическая модель, описывающая изменение концентраций адсорбированных веществ $[X]$ и $[Y]$, $x$ и $y$:

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= k_1 z - k_{-1}x - k_3 x + k_{-3} y - k_2 z^2 x, \\ \frac{dy}{dt} &= k_3 x - k_{-3} y. \end{aligned} \qquad (П4)$$

Здесь $z = 1 - x - y$ – концентрация свободных мест.

$$0 \le x \le 1,\ \ 0 \le y \le 1,\quad 0 \le x + y \le 1.$$

Базовый набор параметров: $k_1$ = 1, $k_1^-$ = 0.01, $k_3$ = 0.0032, $k_2$ = 2, $k_3^-$ = 0.002.

**Модель № 5**

Рассмотреть автокаталитическую химическую реакцию, происходящую на поверхности катализатора. Кинетическая схема реакции имеет вид:

$$1)\ X + * \underset{k_{-1}}{\overset{k_{+1}}{\Leftrightarrow}} [X],\quad 2)\ [X] + 2* \xrightarrow{k_2} 3* + X,\quad 3)\ [X] + * \underset{k_{-3}}{\overset{k_{+3}}{\Leftrightarrow}} [Y].$$

Схеме отвечает математическая модель, описывающая изменение концентраций адсорбированных веществ $[X]$ и $[Y]$, $x$ и $y$:

$$\frac{dx}{dt} = k_1 z - k_{-1}x - k_3 xz + k_{-3}y - k_2 z^2 x,$$
$$\frac{dy}{dt} = k_3 xz - k_{-3}y. \qquad (П5)$$

Здесь $z = 1 - x - 2y$ – концентрация свободных мест.

$$0 \le x \le 1, \quad 0 \le y \le 1, \quad 0 \le x + 2y \le 1.$$

Базовый набор параметров: $k_1$ = 0,12, $k_1^-$ = 0,01, $k_3$ = 0,0032, $k_2$ = 0,95, $k_3^-$ = 0.002.

**Модель № 6**

Рассмотреть автокаталитическую химическую реакцию, происходящую на поверхности катализатора и основанную на кинетической схеме Лэнгмюра–Хиншельвуда:

$$1)\ X + * \underset{k_{-1}}{\overset{k_{+1}}{\Leftrightarrow}} [X], \quad 2)\ Y_2 + 2* \underset{k_{-2}}{\overset{k_{+2}}{\Leftrightarrow}} 2[Y], \quad 3)\ [X] + [Y] \xrightarrow{k_3} XY + 2*.$$

Идеальная модель, написанная в соответствии с законом действующих масс, не имеет автоколебаний. Рассмотреть неидеальную модель реакции, учитывающую изменение константы скорости реакции от степени покрытия поверхности реагирующими веществами. Пусть $k_3 = k_3^0 \varphi(x, y)$, где $k_3^0$ – коэффициент скорости реакции в идеальной модели ($k_3^0 = const$ при $T = const$), а функция $\varphi(x, y)$ описывает дополнительные взаимодействия. Тогда модель будет иметь вид:

$$\frac{dx}{dt} = k_1 z - k_{-1}x - k_3^0 \varphi(x, y) \cdot xy,$$
$$\frac{dy}{dt} = k_2 z^2 - k_{-2}y^2 - k_3^0 \varphi(x, y) \cdot xy. \qquad (П6)$$

Здесь $z = 1 - x - y$ – концентрация свободных мест.

$$0 \le x \le 1, \quad 0 \le y \le 1, \quad 0 \le x + y \le 1.$$

Исследовать случай:

$$\varphi(x, y) = \varphi_1(x) = (1 - x)^{\alpha};$$

Базовый набор параметров: $\alpha$=18; $k_1$=0,012; $k_{-1}$=0,01; $k_{-2}$=$10^{-9}$, $k_3$=10, $k_2$=0,012.

**Модель № 7**

Рассмотреть автокаталитическую химическую реакцию, происходящую на поверхности катализатора и основанную на кинетической схеме Лэнгмюра–Хиншельвуда:

$$1)\ X + * \underset{k_{-1}}{\overset{k_{+1}}{\Leftrightarrow}} [X], \quad 2)\ Y_2 + 2* \underset{k_{-2}}{\overset{k_{+2}}{\Leftrightarrow}} 2[Y], \quad 3)\ [X] + [Y] \xrightarrow{k_3} XY + 2*.$$

Идеальная модель, написанная в соответствии с законом действующих масс, не имеет автоколебаний. Рассмотреть неидеальную модель реакции, учитывающую изменение константы скорости реакции от степени покрытия поверхности реагирующими веществами. Пусть $k_3 = k_3^0 \varphi(x, y)$, где $k_3^0$ – коэффициент скорости

реакции в идеальной модели ($k_3^0 = const$ при $T = const$), а функция $\varphi(x, y)$ описывает дополнительные взаимодействия. Тогда модель будет иметь вид:

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= k_1 z - k_{-1} x - k_3^0 \varphi(x, y) \cdot xy, \\ \frac{dy}{dt} &= k_2 z^2 - k_{-2} y^2 - k_3^0 \varphi(x, y) \cdot xy. \end{aligned} \qquad (П7)$$

Здесь $z = 1 - x - y$ – концентрация свободных мест.

$$0 \le x \le 1, \quad 0 \le y \le 1, \quad 0 \le x + y \le 1.$$

Исследовать случай:

$$\varphi(x, y) = \varphi_2(y) = (1 - y)^{\alpha};$$

Базовый набор параметров: $\alpha$=16; $k_1$=0,03; $k_{-1}$=0,01; $k_{-2}$=0.01, $k_3$=10, $k_2$=0,05.

**ЗАДАНИЯ:**

**Для моделей 1–5 провести однопараметрический анализ 1;**

**Для моделей 6, 7 − однопараметрический анализ 2;**

**Для моделей 1–7 выполнить двухпараметрический анализ.**

### Однопараметрический анализ 1

1. Используя аналитические методы продолжения по параметру, построить зависимость стационарных решений $x_c$ и $y_c$ от параметра $k_1$ $(k_2)$ для нескольких значений параметра $k_1^-$: 0,001, 0,005, 0,01, 0,015 и 0,02.

2. Используя аналитические методы продолжения по параметру, построить зависимость стационарных решений $x_c$ и $y_c$ от параметра $k_1$ $(k_2)$ для нескольких значений параметра $k_3^-$: 0.0005, 0.001, 0.002, 0.003 и 0.004.

3. Исследуя след и определитель матрицы Якоби на стационаре, найти точки бифуркаций, уточнить их и отметить на графиках.

### Однопараметрический анализ 2

1. Используя аналитические методы продолжения по параметру, построить зависимость стационарных решений $x_c$ и $y_c$ от параметра $k_1$ $(k_2)$ для нескольких значений параметра $\alpha$: 10, 15, 18, 20 и 25.

2. Используя аналитические методы продолжения по параметру, построить зависимость стационарных решений $x_c$ и $y_c$ от параметра $k_1$ $(k_2)$ для нескольких значений параметра $k_3$: 1, 5, 10, 50 и 100.

3. Исследуя след и определитель матрицы Якоби на стационаре, найти точки бифуркаций, уточнить их и отметить на графиках.

### Двухпараметрический анализ

1. На плоскости параметров $(k_1^-, k_2)$, или $(k_1^-, k_1)$, или $(k_1, k_2)$ построить параметрический портрет системы, провести линии кратности и нейтральности. Найти и отметить точки бифуркации ко-размерности-2: С (трехкратный корень) и ТВ (Такенса−Богданова, когда два собственных значения равны нулю).

2. Задать параметры из области автоколебаний. С помощью стандартных программ численного интегрирования систем ОДУ в среде Matlab решить систему (1), задав некоторые начальные данные. Нарисовать графики установившихся колебаний $x(t)$ и $y(t)$. На фазовой плоскости построить фазовый портрет системы: отметить стационарную точку, нарисовать предельный цикл, нарисовать несколько траекторий, которые наматываются на цикл.

## П.1.2 ЗАДАЧИ К РАЗДЕЛУ 2: Исследование свойств активных сред. Поиск условий возникновения релаксационных колебаний, условий возбудимой среды и бистабильной среды

### Модель № 8

Рассмотреть модель химической реакции Филда–Кереша–Нойеса (упрощенная модель реакции Белоусова–Жаботинского), протекающей в реакторе идеального смешения. В основе модели лежит система двух уравнений с малым параметром $\varepsilon$, описывающая изменение концентраций $y_1(t)$ и $y_2(t)$ в реакторе со временем:

$$\begin{aligned} \varepsilon \frac{dy_1}{dt} &= y_1(1-y_1) - \frac{y_2(y_1-a)}{(y_1+a)}, \\ \frac{dy_2}{dt} &= by_1 - y_2, \end{aligned} \qquad (П8)$$

где $a,\ b,\ \varepsilon -$ параметры, $0 < a < 1$ и $b > 0$, $0 < y_1,\ 0 < y_2$.

### Модель № 9

Рассмотреть модель химической реакции, в основе которой лежит система двух уравнений с малым параметром $\varepsilon$, описывающая изменение концентраций $y_1(t)$ и $y_2(t)$ со временем:

$$\begin{aligned} \varepsilon \frac{dy_1}{dt} &= -a(y_1-a_1)(y_1-a_2)(y_1-a_3) - y_2 + a_0, \\ \frac{dy_2}{dt} &= by_1 - y_2, \end{aligned} \qquad (П9)$$

где $a_i,\ b,\ \varepsilon -$ положительные параметры; $0 < a_1 < a_2 < a_3 < 1$.

### Модель № 10

Рассмотреть модель типа модели ФитцХью-Нагумо, описывающей прохождение импульсов по нервному волокну. В основе модели лежит система двух уравнений с малым параметром $\varepsilon$, описывающая изменение переменных $y_1(t)$ и $y_2(t)$ со временем:

$$\begin{aligned} \varepsilon \frac{dy_1}{dt} &= (y_1 - \frac{y_1^3}{3} - y_2), \\ \frac{dy_2}{dt} &= \varepsilon(y_1 - by_2 + a), \end{aligned} \qquad (П10)$$

где $a,\ b,\ \varepsilon -$ положительные параметры

**ЗАДАНИЯ:**

**1.** Определить, 1) при каких значениях параметров изоклина первого уравнения имеет S-образный характер; 2) при каких значениях параметров изоклина второго уравнения пересекает изоклину первого уравнения так, что в системе возможно возникновение

***а.*** *релаксационных автоколебаний;*

***б***. *возбудимой динамики*;

***в.*** *множественности стационарных состояний*.

Для всех трех случаев ***а, б, в*** выбрать параметры $a$ и $b$ и на фазовой плоскости нарисовать главные изоклины системы, отметить стационарные точки.

**2.** Рассмотреть случай ***а***. Для четырех значений параметра $\varepsilon =$ 0,001, 0,01, 0,1 и 0,5 построить фазовые портреты системы (четыре фазовых портрета отдельно). Для этого численно посчитать несколько траекторий системы с разными начальными точками. На фазовой плоскости нарисовать изоклины системы и отметить стационарные точки. Нарисовать графики зависимости концентраций от времени для разных значений $\varepsilon$.

**3.** Рассмотреть случай ***б***. Для четырех значений параметра $\varepsilon =$ 0.001, 0.01, 0.1 и 0.5 построить фазовые портреты системы (четыре фазовых портрета отдельно), нарисовать изоклины.

Нарисовать зависимости концентраций от времени для разных $\varepsilon$.

**4.** Рассмотреть случай ***в***. Положить $\varepsilon =$ 0,01 и нарисовать фазовый портрет системы. Траекторий должно быть не менее десяти (половина из них должна стремиться к одному стационару, половина – к другому).

## П.1.3 ЗАДАЧИ К РАЗДЕЛУ 3: Нахождение параметров и построение стационарных диссипативных структур Тьюринга

### Модель № 11

Рассмотреть модель химической реакции «Брюселлятор»:

$$\begin{aligned} \frac{\partial y_1(x,t)}{\partial t} &= D_1 \frac{\partial^2 y_1}{\partial x^2} + a - (b+1)y_1 + y_1^2 y_2, \\ \frac{\partial y_2(x,t)}{\partial t} &= D_2 \frac{\partial^2 y_2}{\partial x^2} + b y_1 - y_1^2 y_2. \end{aligned} \qquad t > 0, \quad 0 \le x \le L \qquad (\text{П}11)$$

Здесь $x-$ пространственная координата, $t-$ время. Функции $y_1(x,t),\ y_2(x,t)$ описывают распределение концентраций; $D_1 > 0,\ D_2 > 0-$ коэффициенты диффузии, $a$ и $b$ − параметры реакции ($a > 0,\ b > 0$).

1. Найти пространственно-однородный стационар и определить его устойчивость в системе ОДУ (без диффузии).

2. Выбрать параметр $a$ $(0<a)$, выбрать параметр $b$ из интервала: $1<b<1+a^2$ и найти критическое максимальное отношение коэффициентов диффузии $d_{\max}=\max(D_1/D_2),\ D_1<D_2$, при котором пространственно-однородный стационар в системе с диффузией (1) может потерять устойчивость. Выбрать коэффициенты диффузии, такие, что $d=(D_1/D_2)<d_{\max}$.

4. Для выбранных значений параметров $a,\ b,\ D_1,\ D_2,\ L$ провести линейный анализ устойчивости пространственно-однородного стационара в системе (1). Исследуя определитель матрицы линеаризации $\mathbf{B}$: $\Delta\mathbf{B}=\Delta\mathbf{A}-(D_1a_{22}+D_2a_{11})k^2+D_1D_2k^4$, $\Delta\mathbf{B}-$ определитель матрицы $\mathbf{B}$, $\Delta\mathbf{A}-$ определитель матрицы линеаризации системы ОДУ, $k$ − волновое число, найти неустойчивые волновые числа, для которых $\Delta\mathbf{B}(k)<0$. Построить график зависимости $\Delta\mathbf{B}$ от $k$ и дисперсионную кривую (зависимость собственных чисел от волнового числа $k$).

5. Найти минимальную длину отрезка $L_{\min}$, при котором возможно возникновение структур Тьюринга. Выбрать значение $L$: $L>10L_{\min}$.

6. Построить дисперсионную кривую (зависимость собственных чисел от номера гармоники $n$: $k=\dfrac{\pi n}{L},\ n=1,2,...$), найти неустойчивые гармоники.

7. С помощью стандартных программ численного интегрирования систем с частными производными в среде Matlab решить систему (1) на отрезке $0\le x\le L$, задав начальные распределения концентраций и условия на концах отрезка. Использовать граничные условия Неймана и начальные данные вида:

$$y_1(x,0)=a+\delta\cos(\pi n/L),\qquad y_2(x,0)=b/a,$$

где $\delta-$ параметр интегрирования.

Положить $\delta\sim 0.1$ и взять несколько значений $n$, соответствующих неустойчивым гармоникам. Нарисовать несколько графиков установившихся стационарных диссипативных структур с разным количеством экстремумов $\tilde{y}_1(x),\ \tilde{y}_2(x)$: $y_1(x,t)\to\tilde{y}_1(x),\quad y_2(x,t)\to\tilde{y}_2(x)$ при $t\to\infty$.

**Модели 1−7 с диффузией**

Рассмотреть модели 1–7 с учетом скоростей диффузии компонент реакции:

$$\begin{aligned}\frac{\partial y_1(x,t)}{\partial t}&=D_1\frac{\partial^2 y_1}{\partial x^2}+f_1(y_1,y_2,\alpha),\\ \frac{\partial y_2(x,t)}{\partial t}&=D_2\frac{\partial^2 y_2}{\partial x^2}+f_1(y_1,y_2,\alpha).\end{aligned}\qquad t>0,\quad 0\le x\le L \qquad (\text{П}12)$$

Здесь $x-$ пространственная координата, $t-$ время. Функции $y_1(x,t),\ y_2(x,t)$ описывают распределение концентраций; $D_1>0,\ D_2>0-$ коэффициенты диффузии, функции $f_1,\ f_2$ задают «реакцию» и совпадают с правыми частями в системах ОДУ 1-7; $\alpha-$ активный параметр.

1. Используя результаты двухпараметрического анализа соответствующей системы ОДУ и найденную область автоколебаний, выбрать такие параметры модели, чтобы при однопараметрическом исследовании разрез пересекал область автоколебаний. Для этого набора параметров, используя аналитические методы продолжения по параметру, исследовать зависимость стационарного решения $x_c$, $y_c$ системы ОДУ от параметра $\alpha$ ($k_1$ , или $k_2$, или $k_1^-$). Вычислить элементы матрицы Якоби на стационаре. Отметить точки бифуркации Андронова-Хопфа. Найти интервал значений параметра, в котором элементы $a_{11}$ и $a_{22}$ имеют разные знаки.

2. Найти критическое максимальное отношение $d_{\max}$ коэффициентов диффузии $D_1$, $D_2$, при котором пространственно-однородный стационар в системе с диффузией (1) может потерять устойчивость. Выбрать коэффициенты диффузии $D_1$, $D_2$, такие, что их отношение $d < d_{\max}$ ($d_{\max} = |a_{11}|/|a_{22}|$, или, наоборот, $d_{\max} = |a_{22}|/|a_{11}|$).

3. Для выбранных коэффициентов диффузии провести однопараметрический анализ и построить границу области тьюринговской неустойчивости − линию $\Delta\mathbf{B}(\alpha, k^2) = 0$ на плоскости $(\alpha, k^2)$, где $\Delta\mathbf{B} = \Delta\mathbf{A} - (D_1 a_{22} + D_2 a_{11})k^2 + D_1 D_2 k^4$, $\Delta\mathbf{B}-$ определитель матрицы **B**:, $\Delta\mathbf{A}-$ определитель матрицы Якоби на стационаре. Выбрать значение параметра $\alpha$ так, чтобы однородный стационар был устойчив в системе ОДУ (лежал вне области колебаний), но принадлежал области неустойчивости Тьюринга, где $\Delta\mathbf{B}(\alpha, k^2) < 0$.

4–7. Выполнить задания 4–7 для модели брюселлятора (П11). В задании 7 использовать начальные данные вида:

$$y_1(x,0) = y_1^s + \delta\cos(\pi n x / L), \qquad y_2(x,0) = y_2^s$$

где $y_1^s$, $y_2^s$ − однородный стационар для выбранного значения параметра $\alpha$.

## П.1.4 ЗАДАЧИ К РАЗДЕЛУ 4. Исследование волн переключения в нелинейной бистабильной среде

### Модели 1−10 с диффузией

Найти и построить волны переключения в моделях 1–10 с учетом скоростей диффузии компонент реакции:

$$\begin{aligned} \frac{\partial y_1(x,t)}{\partial t} &= D_1 \frac{\partial^2 y_1}{\partial x^2} + \frac{1}{\varepsilon} f_1(y_1, y_2, \alpha), \\ \frac{\partial y_2(x,t)}{\partial t} &= D_2 \frac{\partial^2 y_2}{\partial x^2} + f_1(y_1, y_2, \alpha). \end{aligned} \qquad t > 0, \quad -\infty < x < \infty \qquad \text{(П13)}$$

Здесь $x-$ пространственная координата, $t-$ время. Функции $y_1(x,t)$, $y_2(x,t)$ описывают распределение концентраций; $D_1 > 0$, $D_2 \geq 0-$ коэффициенты диффузии, функции $f_1$, $f_2$ задают «реакцию» и совпадают с правыми частями в системах ОДУ 1-10; $\alpha-$ параметры модели, $\varepsilon$ − малый параметр.

1. Используя результаты параметрического анализа соответствующей системы ОДУ (см. задачи к разделам 1 и 2), выбрать такие параметры модели, чтобы система

имела три однородных стационарных состояния, два из которых асимптотически устойчивые.

2. Построить фазовый портрет соответствующей системы ОДУ. Провести изоклины системы. Найти и отметить координаты $(y_1, y_2)$ стационарных точек $p_1$, $p_2$ и $p_3$. Начертить несколько траекторий, которые начинаются вблизи одной устойчивой стационарной точки $p_1$ или $p_3$, а стремятся к другой стационарной точке $p_3$ или $p_1$ при $t \to \infty$.

3. Определить направление волны переключения. Для этого из уравнения $f_2(y_1, y_2) = 0$ выразить $y_2$ через $y_1$ и подставить в уравнение $f_1(y_1, y_2) = 0$. Численно найти значение интеграла:

$$I = \int_{y_1(p_3)}^{y_1(p_1)} f(y)dy. \qquad (П14)$$

4. Положить, как правило, $D_1 = 100$, $D_2 = 0$. С помощью стандартных программ численного интегрирования систем с частными производными (13) в среде Matlab построить волну переключения в модели (13). Для этого выбрать отрезок $0 \le x \le L$ достаточно большой длины, задать начальные данные при $t = 0$ и граничные условия Неймана на концах отрезка.

Начальное распределение концентраций на отрезке определить в виде ступеньки, на верхней части которой задать стационар $p_3$, а на нижней части – стационар $p_1$. (Пусть $p_1 < p_3$ для определенности). Если переключение имеет направление $p_1 \to p_3$, то ширину уровня $p_3$ задать небольшой, а ширину уровня $p_1$ – во весь оставшийся отрезок. Если переключение идет из $p_3$ в $p_1$, то, наоборот, уровень $p_3$ должен быть широким, а уровень $p_1$ – узким.

Наблюдать формирование волны переключения. Нарисовать несколько профилей в разные моменты времени.

5. Исследовать зависимость ширины фронта волны переключения от коэффициента диффузии. Для этого построить волну переключения еще в двух случаях, при $D_1 = 10$ и $D_1 = 100$. Как ширина фронта зависит от коэффициента диффузии?

## П.1.5 ЗАДАЧИ К РАЗДЕЛУ 5. Исследование уединенных бегущих импульсов в возбудимой среде

### Модели 8−10 с диффузией

Найти и построить уединенные бегущие импульсы в моделях 8–10 с учетом скоростей диффузии компонент реакции (см. систему (П13)).

1. Используя результаты параметрического анализа соответствующей системы ОДУ (см. задачи к разделу 2), выбрать такие параметры модели, чтобы система имела единственный устойчивый стационар, который был бы возбудимым.

2. Построить фазовый портрет соответствующей системы ОДУ. Провести изоклины системы. Найти и отметить координаты $(y_1, y_2)$ стационарной точки $p_1$. Начертить несколько траекторий, которые начинаются вблизи стационарной точки $p_1$, удаляются от нее, а потом снова приближаются и стремятся к ней при $t \to \infty$.

4. Положить, как правило, $D_1 = 100$, $D_2 = 100$, $\varepsilon =$ 0.01. С помощью стандартных программ численного интегрирования систем с частными производными вида (13) в среде Matlab построить уединенный бегущий импульс. Для этого выбрать отрезок $0 \le x \le L$ достаточно большой длины, задать начальные данные при $t = 0$ и граничные условия Неймана на концах отрезка.

Начальное распределение концентраций на отрезке определить в виде ступеньки, на верхней части которой задать некоторое значение, соответствующее точки максимального удаления траектории от стационара $p_1$ (см. фазовый портрет), а на нижней части – стационару $p_1$, по которому бежит импульс. Ширину уровня $p_3$ задать небольшой, а ширину уровня $p_1$ – во весь оставшийся отрезок.

Наблюдать формирование импульса. Нарисовать несколько профилей в разные моменты времени.

# ПРИЛОЖЕНИЕ 2. ПРОГРАММЫ

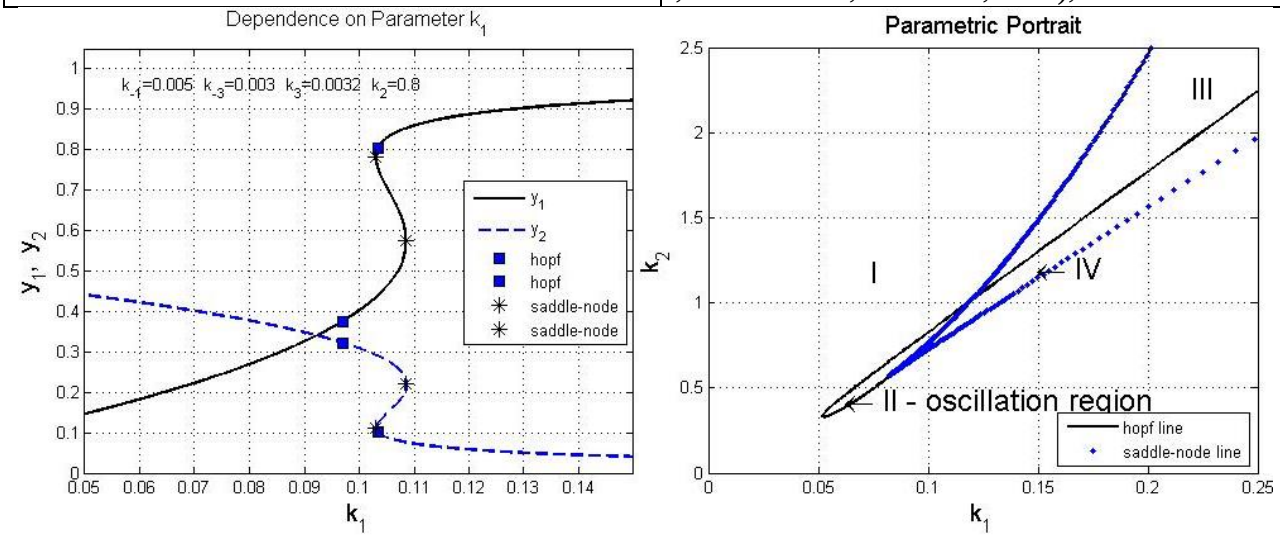
## П.2.1 ПРОГРАММЫ К РАЗДЕЛАМ 1 и 2. Построение фазового портрета модели. Интегрирование системы ОДУ

**Программа № 1.** Методом продолжения по параметру по аналитическим формулам рассчитывается зависимость стационарного состояния от параметра. Вычисляются элементы матрицы Якоби, находятся точки бифуркации. Проводится двухпараметрический анализ и однопараметрический.

```
function phase_portrait
% двухпараметрический анализ
 на плоскости  (k1,k2)
k1m =0.005;
k3m = 0.003
k3 = 0.0032
alk = k3m/(k3m + k3);

x=[0.001:0.001:0.987];
n = max(size(x))
% расчет линии нейтральности
for i = 1:n
y(i) = (1-x(i))*(1-alk);
z(i) = (1-y(i)-x(i));
k2(i) = (k1m*(1-y(i))/z(i)+k3m+k3)/
(z(i)*(x(i)-z(i)));
k1(i) = (k1m*x(i)+k2(i)*x(i)*z(i)^2)/z(i);
a11 = -k1(i)-k1m-k2(i)*z(i)^2+2*k2(i)*
x(i)*z(i);
a12 = -k1(i)+2*k2(i)*x(i)*z(i);
a21 = -k3;
a22 = -k3-k3m;
sp(i)= a11+a22;
del(i)=a11*a22-a12*a21;
if del(i) <= 0
   k2(i) =-1;
end
end
% расчет линии кратности
for i = 1:n
y(i) = (1-x(i))*(1-alk);
z(i) = (1-y(i)-x(i));
K2(i) = k1m*(alk*x(i)+z(i))/(z(i)^2*(x(i)*
alk-z(i)));
K1(i) = (k1m*x(i)+K2(i)*x(i)*(1-x(i)-y(i))^2)
/(1-x(i)-y(i));
a11 = -K1(i)-k1m-K2(i)*z(i)^2+2*K2(i)*
x(i)*z(i);
a12 = -K1(i)+2*K2(i)*x(i)*z(i);
a21 = -k3;
a22 = -k3-k3m;
Sp(i)= a11+a22;
Del(i)=a11*a22-a12*a21;
end
% построение фазового портрета
   figure;
   plot(k1(1:n),k2(1:n),'k', 'LineWidth', 2);
hold on
 plot(K1(1:n),K2(1:n),'b.','MarkerSize', 6);
 hold on
  title('Parametric Portrait','FontWeight',
'bold','FontSize',14)
xlabel('k_1','FontSize',14); ylabel('k_2',
'FontSize',14);
axis([0.0 0.25 0.0 2.5]); grid on;
legend('hopf line','saddle-node line',
'Location','SouthEast');
% однопараметрический анализ
 по параметру k1
k2i = 0.8;
k1m = 0.005
k3m = 0.003
k3 = 0.0032
alk = k3m/(k3m + k3);

x=[0.001:0.001:0.987];
n = max(size(x))

j1 = 0;
j2 = 0;
j3 = 0;
i = 1;
y(i) = (1-x(i))*(1-alk);
z(i) = (1-y(i)-x(i));
k1(i) = (k1m*x(i)+k2i*x(i)*z(i)^2)/z(i);
a11 = -k1(i)-k1m-k2i*z(i)^2+2*k2i
*x(i)*z(i);
a12 = -k1(i)+2*k2i*x(i)*z(i);
a21 = -k3;
a22 = -k3-k3m;
```

```
sp(i)= a11+a22;
del(i)=a11*a22-a12*a21;
DI(i) = sp(i)^2-4*del(i);
      for i = 2:n
y(i) = (1-x(i))*(1-alk);
z(i) = (1-y(i)-x(i));
k1(i) = (k1m*x(i)+k2i*x(i)*z(i)^2)/z(i);
a11 = -k1(i)-k1m-k2i*z(i)^2+2*k2i
*x(i)*z(i);
a12 = -k1(i)+2*k2i*x(i)*z(i);
a21 = -k3;
a22 = -k3-k3m;
sp(i)= a11+a22;
del(i)=a11*a22-a12*a21;
DI(i) = sp(i)^2-4*del(i);
 if sp(i)*sp(i-1)<= 0
    j1 = j1+1;
    yh(j1) = y(i);
    xh(j1) = x(i);
    k1h(j1) = k1(i);
      end
if del(i)*del(i-1)<= 0
    j2 = j2+1;
    ysn(j2) = y(i);
    xsn(j2) = x(i);
    k1sn(j2) = k1(i);
end
if DI(i)*DI(i-1)<= 0
    j3 = j3+1;
    ydi(j3) = y(i);
    xdi(j3) = x(i);
    k1di(j3) = k1(i);
end
```

```
end
mh = j1
msn = j2
mdi = j3
     figure;
plot(k1(1:n),x(1:n),'black', 'LineWidth', 2);
    hold on
plot(k1(1:n),y(1:n),'b--', 'LineWidth', 2);
     hold on
plot(k1h(1:mh),yh(1:mh),'s','MarkerFaceColor'
,'b','MarkerEdgeColor','k','MarkerSize',6);
     hold on
plot(k1h(1:mh),xh(1:mh),'s','MarkerFaceColor',
'b','MarkerEdgeColor','k','MarkerSize',6);
      hold on
plot(k1sn(1:msn),ysn(1:msn),'*','MarkerFace
Color','k','MarkerEdgeColor','k',
'MarkerSize',10);
      hold on
plot(k1sn(1:msn),xsn(1:msn),'*','MarkerFace
Color','k','MarkerEdgeColor','k',
'MarkerSize',10);
      hold on
title('Dependence on Parameter k_1',
'FontSize',12);
text(0.055,0.95, ['  k_{-1}=',num2str(k1m),...
    '  k_{-3}=',num2str(k3m),'  k_3=',
num2str(k3),'  k_2=',num2str(k2i)]);
xlabel('k_1','FontSize',14); ylabel('y_1,  y_2',
 'FontSize',14);
axis([0.05 0.15 0.0 1.05]); grid on
 legend('y_1','y_2','hopf','hopf','saddle-node'
,'saddle-node','Location','East');
```




*а* *б*

Рис. 1. Зависимость стационарных решений от параметров:
*а* – однопараметрический анализ; *б* – двухпараметрический анализ

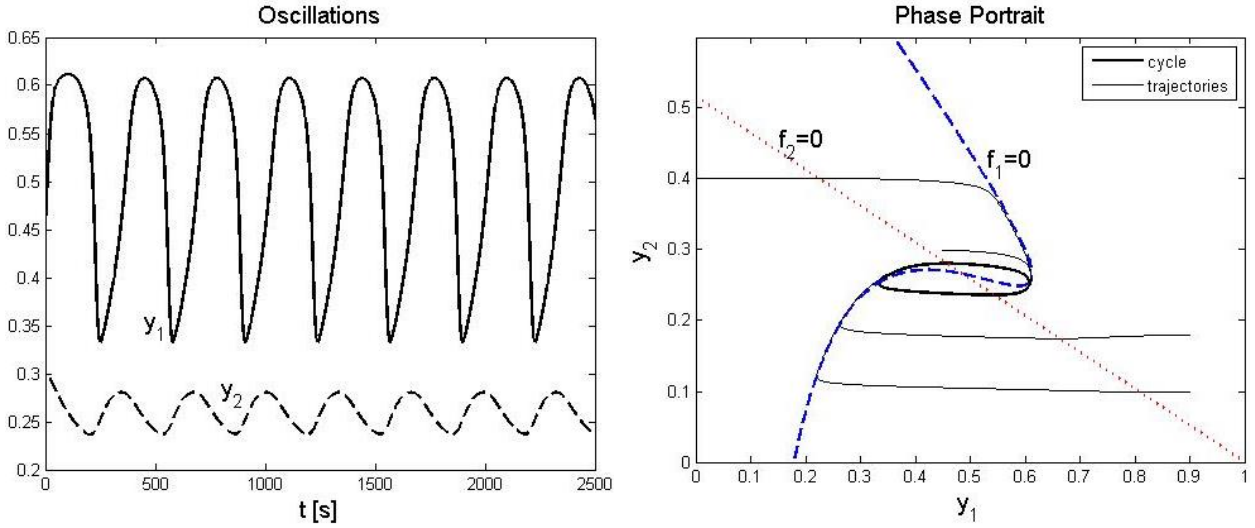
Результатом работы программы является построение 2-х графиков. На первом графике показана зависимость стационарного решения от параметра $k_1$, отмечены точки бифуркаций (рис.1, *а*). На втором графике изображен параметрический портрет модели на плоскости двух параметров, проведены линии кратности и нейтральности (рис.1, *б*). Римскими цифрами отмечены области с разным динамическим поведением.

**Программа № 2.** Интегрирование системы ОДУ, нахождение зависимости решений от времени. Построение фазового портрета модели. Рассчитывается та же модель, что и в программе 1. Параметры взяты из области автоколебаний.

```
function ode
global k1 k1m k2 k3 k3m;
k2 =2;
k1 = 0.3;
k1m = 0.03;
k3m = 0.003;
k3 = 0.0032;
rtol = 1.e-7;
atol = 1.e-8;
rfn = 5;
options = odeset('BDF','ON','RelTol',rtol,
'AbsTol',atol,'Refine',rfn);
% численное интегрирование системы
 ОДУ с помощью  ode15s – стандартной
 программы для жестких систем
 с контролем точности
tmax = 2500;
tspan = [0; tmax];
y0 = [0.45 0.3];
[t,y] = ode15s(@f,tspan,y0,options);
n0 = max(size(t))

yc0=[y(n0,1) y(n0,2)];
[tc,yc] = ode15s(@f,tspan,yc0,options);
nc = max(size(tc))

y01 = [0 0.4];
[t1,y1] = ode15s(@f,tspan,y01,options);
n1 = max(size(t1))

y02 = [0.9 0.18];
[t2,y2] = ode15s(@f,tspan,y02,options);
n2 = max(size(t2))

y03 = [0.9 0.1];
[t3,y3] = ode15s(@f,tspan,y03,options);
n3 = max(size(t3))

x=[0.001:0.001:0.999];
n = max(size(x))
for i = 1:n
   B =1-x(i)-0.5*k1/(k2*x(i));
   C = k1m/k2-k1*(1-x(i))/(k2*x(i))+(1-x(i))^2;
   dis(i)=B*B-C;
   if dis(i)>0
   Y1(i)=B + dis(i)^0.5;
   Y2(i)=B-dis(i)^0.5;
   end
   Y3(i)=(1-x(i))*k3/(k3m+k3);
   end
nY = max(size(Y1))
    figure;
plot(t(1:n0),y(1:n0,1),'k', 'LineWidth', 2);
    hold on
plot(t(1:n0),y(1:n0,2),'k--', 'LineWidth', 2);
    hold on
xlabel('t [s]','FontSize',14);
text(450,0.35,'y_1','FontSize',14);
text(800,0.28,'y_2','FontSize',14);
title('Oscillations','FontSize',14);
    figure;
plot(yc(:,1),yc(:,2),'black', 'LineWidth', 2);
    hold on
plot(y(:,1),y(:,2),'black', 'LineWidth', 1);
    hold on
plot(y1(:,1),y1(:,2),'black', 'LineWidth', 1);
     hold on
plot(y2(:,1),y2(:,2),'black', 'LineWidth', 1);
     hold on
plot(y3(:,1),y3(:,2),'black', 'LineWidth', 1);
    hold on
plot(x(1:nY),Y1(1:nY),'b--', 'LineWidth', 2);
    hold on
plot(x(1:nY),Y2(1:nY),'b--', 'LineWidth', 2);
    hold on
plot(x(1:n),Y3(1:n),'b--', 'LineWidth', 2);
   hold on
axis([0.0 1 0.0 0.6]);
title('Phase Portrait','FontSize',14);
xlabel('y_1','FontSize',14); ylabel('y_2', 'Font
```

| | |
|---|---|
| Size',14);<br>legend('cycle','trajectories','Location','NorthEast');<br>text(0.15,0.45,'f_2=0','FontSize',14);<br>text(0.53,0.42,'f_1=0','FontSize',14); | function dydt = f(t,y)<br>global k1 k1m k2 k3 k3m;<br>dydt = [k1*(1-y(1)-y(2))-k1m*y(1)- k2*y(1)<br>*(1-y(1)-y(2))^2<br>k3*(1-y(1)-y(2))-k3m*y(2)]; |

Результатом работы программы является построение 2-х графиков. На первом графике (рис. 2, *а*) показан вид автоколебаний, на втором изображен фазовый портрет модели (рис. 2, *б*).




*а* *б*

Рис. 2. Автоколебания в модели:
*а* – график автоколебаний; *б* – фазовый портрет модели

**Программа № 3**. Программа 3 также, как и программа 2 рассчитывает систему ОДУ, строит графики зависимостей решений от времени и рисует фазовые портреты модели. На примере системы Филда –Кереша-Нойеса показаны расчёты для двух наборов параметров: для случая автоколебаний и для случая возбудимого стационара. Построены графики зависимостей решений от времени и нарисованы фазовые портреты системы и для случая автоколебаний (рис. 3, *а*, *б*), и для случая возбудимого стационара (рис. 3, *в*, *г*).

| | |
|---|---|
| function ode_OREG<br>global a b eps b0;<br>% oscillations<br>a = 0.02;<br>b = 2%0.25;<br>eps = 0.01;<br>b0 = 0 %0.15;<br>rtol = 1.e-8;<br>atol = 1.e-9;<br>rfn = 5;<br>r1 = [0.0201:0.001:1];<br>nr1 = max(size(r1))<br>for i = 1:nr1<br>u(i) = r1(i)*(1-r1(i))*(r1(i) + a)/(r1(i) - a); | end<br>r2 = [0.0001:0.001:1];<br>nr2 = max(size(r2))<br><br>for i = 1:nr2<br>v(i) = b*r2(i)+b0;<br>end<br><br>tmax = 1000;<br>tspan = [0; tmax];<br>y0 = [0.02 0.03];<br>options = odeset('BDF','ON','RelTol',rtol,<br>'AbsTol',atol,'Refine',rfn);<br>[t,y] = ode15s(@f,tspan,y0,options); |

```
n0 = max(size(t))
     yc0=[y(n0,1) y(n0,2)];
[tc,yc] = ode15s(@f,tspan,yc0,options);
nc = max(size(tc))
     y01 = [0.2 0.45];
[t1,y1] = ode15s(@f,tspan,y01,options);
n1 = max(size(t1))
    y02 = [0.9 0.36];
[t2,y2] = ode15s(@f,tspan,y02,options);
n2 = max(size(t2))
    y03 = [0.9 0.1];
[t3,y3] = ode15s(@f,tspan,y03,options);
n3 = max(size(t3))
   figure;
plot(t(1:n0),y(1:n0,1),'k', 'LineWidth', 2);
   hold on
plot(t(1:n0),y(1:n0,2),'k--', 'LineWidth', 2);
  hold on
xlabel('t [s]','FontSize',14);
text(270,0.6,'y_1','FontSize',14);
text(350,0.2,'y_2','FontSize',14);
title('Oscillations','FontSize',14);
    figure;
plot(yc(:,1),yc(:,2),'black', 'LineWidth', 2);
   hold on
plot(y(:,1),y(:,2),'black', 'LineWidth', 1);
   hold on
plot(y1(:,1),y1(:,2),'black', 'LineWidth', 1);
   hold on
plot(y2(:,1),y2(:,2),'black', 'LineWidth', 1);
   hold on
plot(y3(:,1),y3(:,2),'black', 'LineWidth', 1);
   hold on
plot(r2,v,'b--','LineWidth',2);
   hold on
plot(r1,u,'r--','LineWidth',2);
   hold on
axis([0.0 1 0.0 0.6]);
grid on
title (['Phase Portrait       parameters: a = ',
num2str(a), '   b = ',num2str(b)]);
xlabel('y_1','FontSize',14); ylabel('y_2',
'FontSize',14);
legend('cycle','trajectories','Location',
'NorthEast');
text(0.25,0.45,'f_2=0','FontSize',14);
text(0.04,0.55,'f_1=0','FontSize',14);
%  exitable stationary state
a = 0.02;
b = 4;
eps = 0.01;
b0 = 0;
rtol = 1.e-8;
atol = 1.e-9;
rfn = 5;
r1 = [0.0201:0.001:1];
nr1 = max(size(r1))
    for i = 1:nr1
u(i) = r1(i)*(1-r1(i))*(r1(i) + a)/(r1(i) - a);
   end
r2 = [0.0001:0.001:1];
nr2 = max(size(r2))
   for i = 1:nr2
v(i) = b*r2(i)+b0;
   end

tmax = 350;
tspan = [0; tmax];
y0 = [0.1 0.1];
options =
odeset('BDF','ON','RelTol',rtol,'AbsTol'
,atol,'Refine',rfn);
[t,y] = ode15s(@f,tspan,y0,options);
n0 = max(size(t))
y01 = [0.02 0.02];
[t1,y1] = ode15s(@f,tspan,y01,options);
n1 = max(size(t1))
y02 = [0.2 0.15];
[t2,y2] = ode15s(@f,tspan,y02,options);
n2 = max(size(t2))
y03 = [0.59 0.01];
[t3,y3] = ode15s(@f,tspan,y03,options);
n3 = max(size(t3))
    figure;
plot(t(1:n0),y(1:n0,1),'k', 'LineWidth', 2);
   hold on
plot(t(1:n0),y(1:n0,2),'k--', 'LineWidth', 2);
   hold on
xlabel('t [s]','FontSize',14);
text(20,0.6,'y_1','FontSize',14);
text(200,0.2,'y_2','FontSize',14);
title('exitable stationary state','FontSize',14);
figure;
plot(y(:,1),y(:,2),'black', 'LineWidth', 1);
hold on
plot(y1(:,1),y1(:,2),'black', 'LineWidth', 1);
hold on
plot(y2(:,1),y2(:,2),'black', 'LineWidth', 1);
    hold on
plot(y3(:,1),y3(:,2),'black', 'LineWidth', 1);
    hold on
plot(r2,v,'b--','LineWidth',2);
```

```
    hold on
plot(r1,u,'r--','LineWidth',2);
    hold on
axis([0.0 1 0.0 0.6]);
grid on
title([' Phase Portrait        parameters: a = ',
num2str(a), '   b = ',num2str(b)]);
xlabel('y_1','FontSize',14); ylabel('y_2',
'FontSize',14);
legend('trajectories','Location','NorthEast');
text(0.135,0.45,'f_2=0','FontSize',14);
text(0.03,0.55,'f_1=0','FontSize',14);
function dydt = f(t,y,N)
global a b eps b0;
dydt = [y(1)*(1-y(1))-y(2)*(y(1)-a)/(y(1)+a)
        eps*(b*y(1)-y(2)+b0)];
```

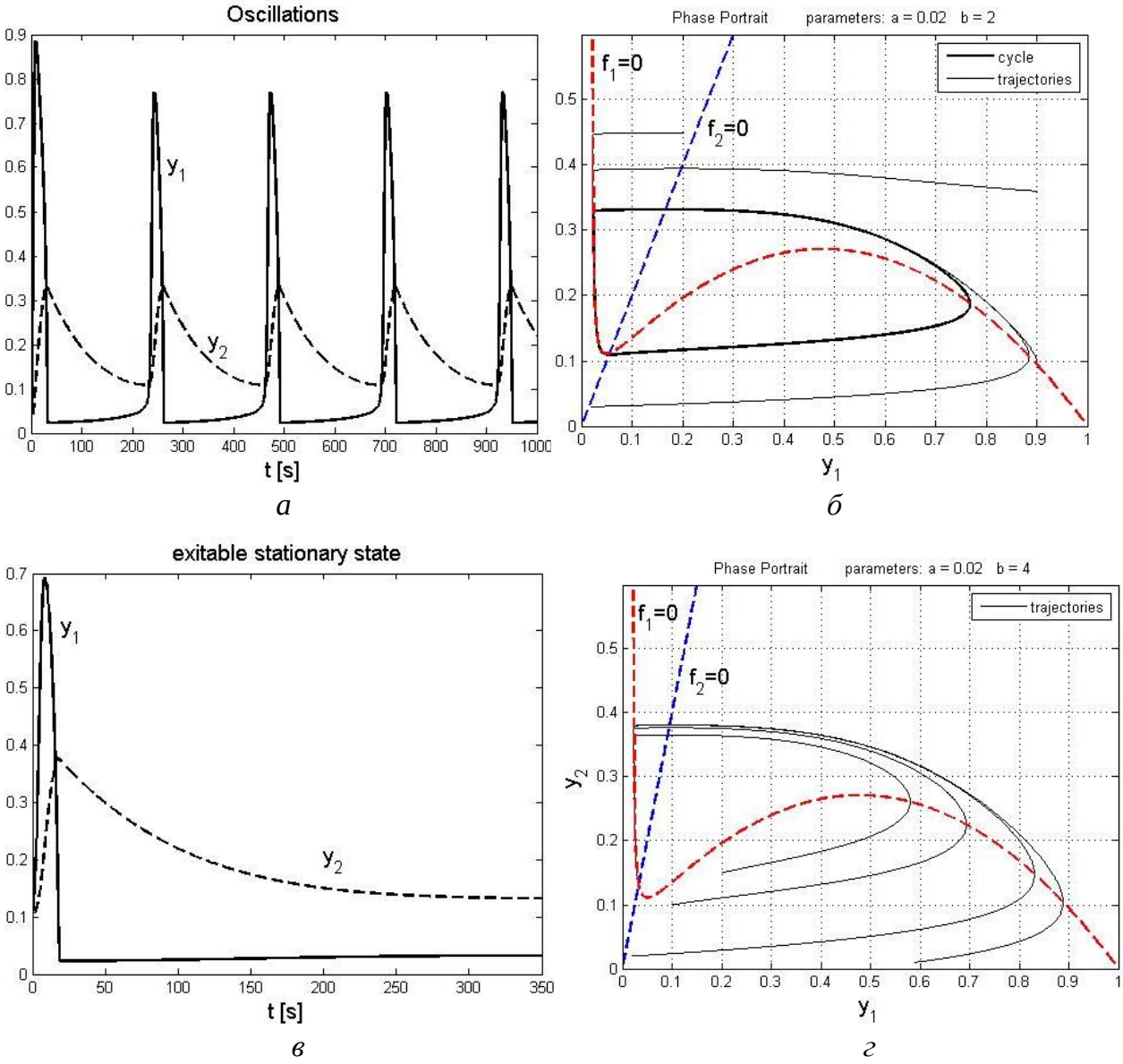



Рис. 3. Динамика модели в области колебаний (*а, б*) и возбудимой среде (*в, г*):
*а, в* – зависимости концентраций веществ от времени; *б, г* – фазовые портреты модели

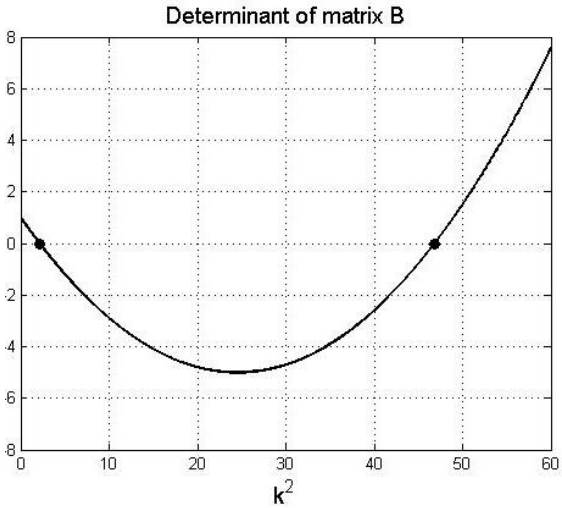
## П.2.2 ПРОГРАММЫ К РАЗДЕЛУ 3. Построение структур Тьюринга

**Программа № 4.** Рассматривается модель брюселлятора. В начале задаются параметры модели, коэффициенты диффузии и длина отрезка. Вычисляются элементы матрицы Якоби A на стационаре. По формулам рассчитывается определитель матрицы B системы с диффузией и находятся собственные значения

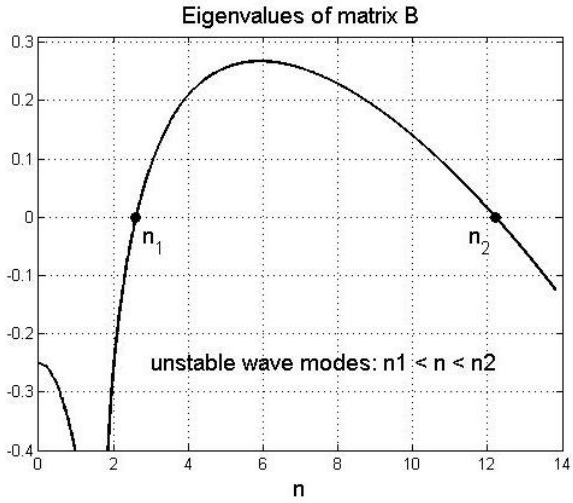
матрицы B. Строятся графики зависимости определителя B от волнового числа $k^2$ (рис. 4, *а*) и собственных значений B от номера гармоники *n* (рис. 4, *б*). Находится интервал неустойчивых гармоник. Далее задается сетка и по встроенной стандартной программе вычисляется решение системы с диффузией. Профили решения записываются в некоторые моменты времени и после окончания расчета воспроизводятся в режиме реального времени, так что можно наблюдать формирование стационарной структуры на рис. 5, *а*. На рис. 5, *а–г* показаны профили некоторых установившихся структур.

```
function bruss_new
global a b D1 D2 a0 n L
% задание параметров модели
a = 1;
b = 1.5;
D1 = 0.01;
D2 = 1;
a0 = 0.1;
L = 10; % 0<x<L
% вычисление матриц A и B(k^2)
a11 = b-1;
a12 = a^2;
a21 = -b;
a22 = -a^2;
S_A = b-1-a^2;
delta_A = a^2;
% Δ_B = Δ_A–(a_11*D_2+a_22*D_1)*h +D_1*D_2*h^2,
h=k^2,  k=pi*n/L;   % S_B = S_A–h*(D_1+D_2)
h=[0.0:0.01:60];
nh = max(size(h));
  for i = 1:nh
    nn(i)=sqrt(h(i)*L/pi);
 S_B(i) = S_A-h(i)*(D1+D2);
 delta_B(i) = delta_A-(a11*D2+a22*D1)*h(i)
+D1*D2*h(i)^2;
gam1(i)=0.5*(S_B(i)+sqrt(S_B(i)^2-4*
delta_B(i)));
gam2(i)=0.5*(S_B(i)+sqrt(S_B(i)^2-4*
delta_B(i)));
    end
 Dis = (a11*D2+a22*D1)^2 -
4*delta_A*D1*D2;
 h1 = 0.5*((a11*D2+a22*D1)
+sqrt(Dis))/(D1*D2);
 h2 = 0.5*((a11*D2+a22*D1)-sqrt(Dis))
/(D1*D2);
      nn1 = sqrt(h1*L/pi);
      nn2=sqrt(h2*L/pi);
      figure;
plot(h(1:nh),delta_B(1:nh),'k', 'LineWidth', 2);
    hold on
plot(h1,0,'o','MarkerFaceColor','k','MarkerEdge
Color','k','MarkerSize',6);
    hold on
plot(h2,0,'o','MarkerFaceColor','k','Marker
EdgeColor','k','MarkerSize',6);
    hold on
 title('Determinant of matrix B','FontSize',14)
xlabel('k^2','FontSize',14); ylabel('delta B',
'FontSize',14);
axis([0.0 60.0 -8.0 8.0]); grid on;
      figure;
plot(nn(1:nh),gam2(1:nh),'k', 'LineWidth', 2);
    hold on
plot(nn(1:nh),gam1(1:nh),'k', 'LineWidth', 2);
    hold on
plot(nn1,0,'o','MarkerFaceColor','k','Marker
EdgeColor','k','MarkerSize',6);
    hold on
plot(nn2,0,'o','MarkerFaceColor','k','Marker
EdgeColor','k','MarkerSize',6);
    hold on
   title('Eigenvalues of matrix B','FontSize',14)
xlabel('n','FontSize',14); ylabel('gamma',
'FontSize',14);
axis([0.0 14.0 -0.4 0.31]); grid on;
text (2.8, -0.04,'n_1 ','FontSize',14);
text (11.5, -0.04,'n_2 ','FontSize',14);  %,
num2str(nn1)]);
text(3,-0.25,'unstable wave modes: n1 < n < n2',
'FontSize',14);
% численное интегрирование системы
 типа реакция-диффузия
n = 7; %  номер гармоники  n1 < n < n2
m = 0;
x = linspace(0,L,400);
t = linspace(0,150,100);
Nx = max(size(x));
Nt = max(size(t));
sol = pdepe(m,@pdex4pde,@pdex4ic,
@pdex4bc,x,t);
     tet1 = sol(:,:,1);
```

```
    tet2 = sol(:,:,2);
figure;
for i=1:Nt
   subplot(2,1,1);
   plot(x,tet1(i,:),'k','LineWidth',2);
    title('Distribution of y_1','FontSize',14);
   xlabel('x','FontSize',14);
   axis([0.0 L 0.0 7]); grid on;
   subplot(2,1,2);
   plot(x,tet2(i,:),'b','LineWidth',2);
   text(0.5,1.7,['t=',num2str(t(i)),' s']);
   title('Distribution of y_2','FontSize',14);
   xlabel('x','FontSize',14);
   axis([0.0 L 0.0 2]); grid on;
    pause(0.5);
end;
hold off;
   figure;
plot(x,tet1(Nt,:),'k','LineWidth',2);
hold on;
plot(x,tet2(Nt,:),'k:','LineWidth',2);
hold on;
title('Profile of the stable structure',
'FontSize',14)
xlabel('x','FontSize',14)
legend('y1(x)','y2(x)','Location','NorthEast');
      function [c,f,s] = pdex4pde(x,t,u,DuDx)
global a b D1 D2 a0 n L
c = [1; 1];
f = [D1; D2] .* DuDx;
s = [a-(b+1)*u(1)+u(1)^2*u(2); b*u(1) –
u(1)^2*u(2)];
      function u0 = pdex4ic(x);
global a b D1 D2 a0 n L
u0 = [a + a0*cos(n*x*pi/L); b/a];
     function [pl,ql,pr,qr] = pdex4bc(xl,ul,xr,ur,t)
pl = [0; 0];
ql = [1; 1];
pr = [0; 0];
qr = [1; 1];
```




*а*

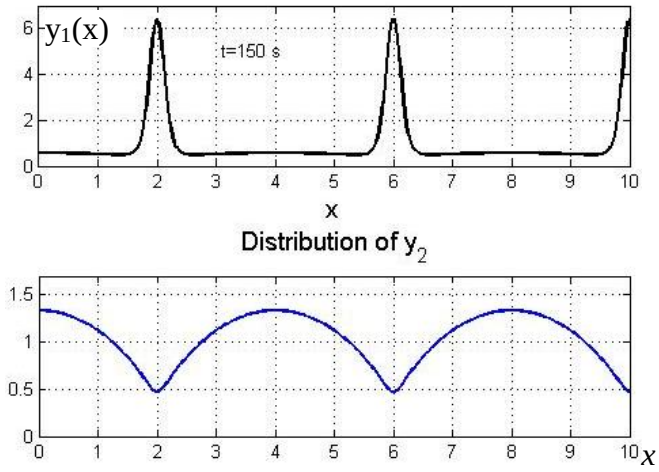



*б*

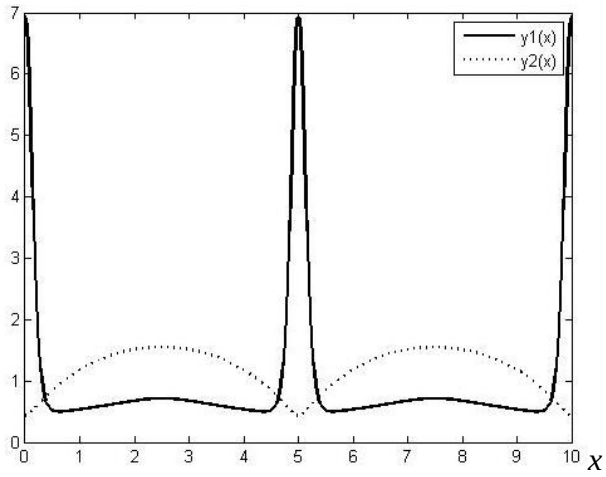
Рис. 4. Спектральный анализ матрицы **B**:

*а* – зависимость определителя матрицы **B** от волнового числа;

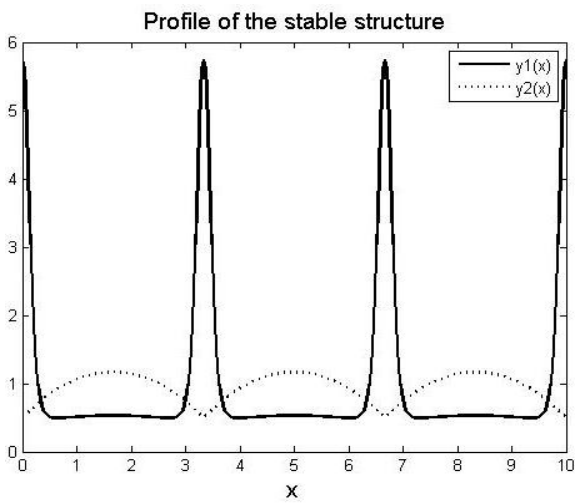
*б* – зависимость собственных значений матрицы **B** от номера гармоники *n*



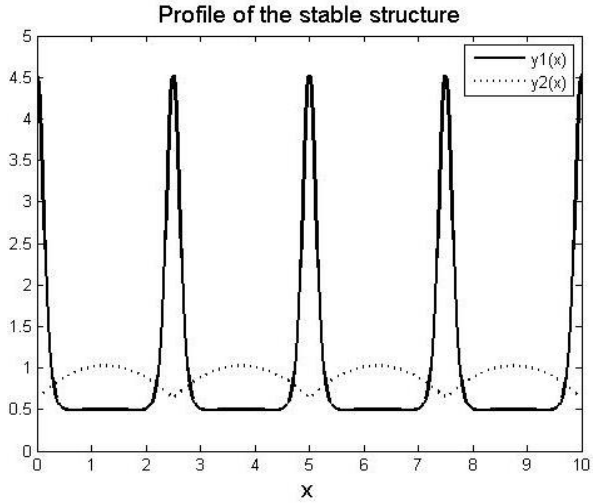

*а*




*б*




*в*




*г*

Рис. 5. Вид некоторых установившихся стационарных структур, соответствующих гармоникам с номерами *n*:
*а* – структура с *n*=5; *б* – структура с *n*=4; *в* – структура с *n*=6; *г* – структура с *n*=8

**Программа № 5.** Эта программа состоит из двух частей. В первой части, как и в программе 1 с помощью методов продолжения по параметру исследуется зависимость стационарных решений системы ОДУ от параметра; производится двухпараметрический и однопараметрический анализ. На плоскости двух параметров строится параметрический портрет (см. рис. 1, *б*) и находится область колебаний. При однопараметрическом исследовании разрез плоскости производится, так чтобы линия разреза пересекала бы область колебаний. Ищутся интервалы значения параметра, где диагональные элементы матрицы А имеют разные знаки (рис. 6. *б*). Задаются коэффициенты диффузии и находятся точки бифуркации Тьюринга (рис. 6, *а*).

Далее, как в программе 4. Сначала выбираются параметры и вычисляется зависимость определителя матрицы В и ее собственных значений от волнового числа, рисуются графики (рис. 7, *а*, *б*). На плоскости (*n*, параметр), *n* – волновое число, строится граница области неустойчивости Тьюринга (рис. 8, *а*). Далее решается система с диффузией и методом на установление находятся структуры Тьюринга. (рис. 8, *б–г*).

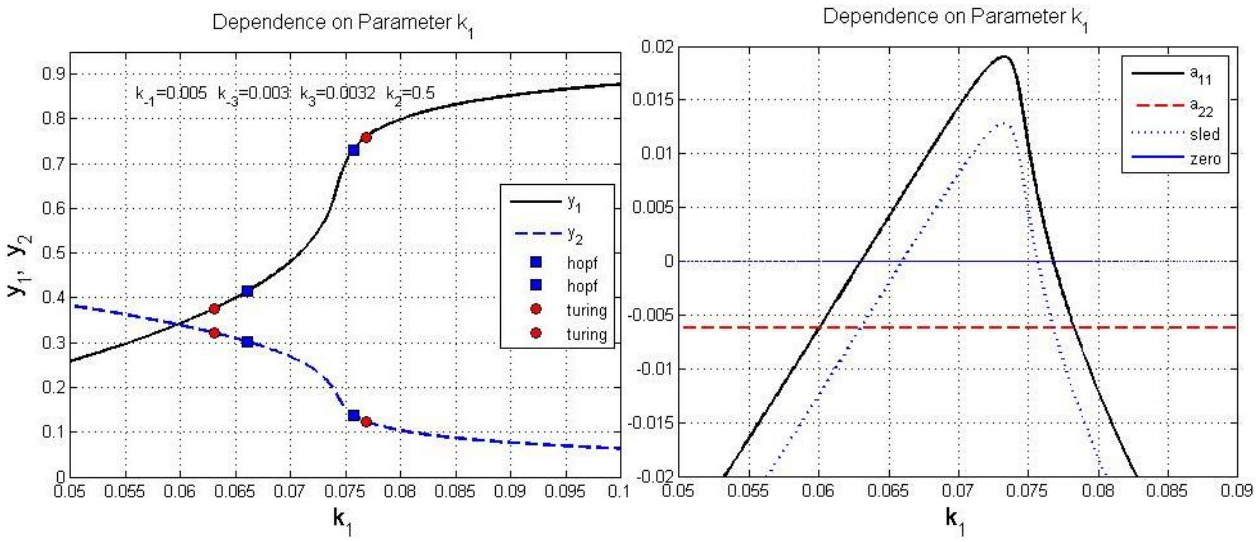
```
function mod3_struc
global D1 D2 k1i k1m k2i k3 k3m;
global ys0 xs0 a0 nw L
% двухпараметрический анализ от k1, k2
k1m =0.005;
k3m = 0.003
k3 = 0.0032
alk = k3m/(k3m + k3);
      x=[0.001:0.001:0.987];
n = max(size(x))
% построение линии нейтральности
for i = 1:n
y(i) = (1-x(i))*(1-alk);
z(i) = (1-y(i)-x(i));
k2(i) = (k1m*(1-y(i))/z(i)+k3m+k3)/(z(i)*
(x(i)-z(i)));
k1(i) = (k1m*x(i)+k2(i)*x(i)*z(i)^2)/z(i);
a11 = -k1(i)-k1m-k2(i)*z(i)^2+2*k2(i)*
x(i)*z(i);
a12 = -k1(i)+2*k2(i)*x(i)*z(i);
a21 = -k3;
a22 = -k3-k3m;
sp(i)= a11+a22;
del(i)=a11*a22-a12*a21;
if del(i) <= 0
   k2(i) =-1;
end
end
% построение линии кратности
for i = 1:n
y(i) = (1-x(i))*(1-alk);
z(i) = (1-y(i)-x(i));
```

```
K2(i) = k1m*(alk*x(i)+z(i))/(z(i)^2*(x(i)*
alk-z(i)));
K1(i) = (k1m*x(i)+K2(i)*x(i)*(1-x(i)-y(i))^2)/
(1-x(i)-y(i));
a11 = -K1(i)-k1m-K2(i)*z(i)^2+2*K2(i)
*x(i)*z(i);
a12 = -K1(i)+2*K2(i)*x(i)*z(i);
a21 = -k3;
a22 = -k3-k3m;
Sp(i)= a11+a22;
Del(i)=a11*a22-a12*a21;
end
      figure;
   plot(k1(1:n),k2(1:n),'k', 'LineWidth', 2);
hold on
 plot(K1(1:n),K2(1:n),'b.','MarkerSize', 6);
 hold on
  title('Parametric Portrait','FontSize',14)
xlabel('k_1','FontSize',14); ylabel('k_2',
'FontSize',14);
axis([0.0 0.25 0.0 2.5]); grid on;
legend('hopf line','saddle-node line',
'Location','SouthEast');
text(0.07,1.17,' I','FontSize',18);
text(0.058,0.43,' \leftarrow II - oscillation
region','FontSize',18);
text(0.22,2.25,'III','FontSize',18);
text(0.145,1.2,' \leftarrow IV','FontSize',18);

k2i = 0.5;
x=[0.001:0.001:0.9];
n = max(size(x))
j1 = 0;
j2 = 0;
j3 = 0;
      i = 1;
y(i) = (1-x(i))*(1-alk);
z(i) = (1-y(i)-x(i));
k1(i) = (k1m*x(i)+k2i*x(i)*z(i)^2)/z(i);
a11(i) = -k1(i)-k1m-k2i*z(i)^2+2*k2i
*x(i)*z(i);
a12 = -k1(i)+2*k2i*x(i)*z(i);
a21 = -k3;
a22(i) = -k3-k3m;
sp(i)= a11(i)+a22(i);
del(i)=a11(i)*a22(i)-a12*a21;
DI(i) = sp(i)^2-4*del(i);
     for i = 2:n
y(i) = (1-x(i))*(1-alk);
z(i) = (1-y(i)-x(i));
k1(i) = (k1m*x(i)+k2i*x(i)*z(i)^2)/z(i);
a11(i) = -k1(i)-k1m-k2i*z(i)^2+2*k2i*x(i)*z(i);
a12 = -k1(i)+2*k2i*x(i)*z(i);
a21 = -k3;
a22(i) = -k3-k3m;
sp(i)= a11(i)+a22(i);
del(i)=a11(i)*a22(i)-a12*a21;
DI(i) = sp(i)^2-4*del(i);
      if sp(i)*sp(i-1)<= 0
    j1 = j1+1;
    yh(j1) = y(i);
    xh(j1) = x(i);
    k1h(j1) = k1(i);
end
if a11(i)*a11(i-1)<= 0
    j2 = j2+1;
    ys1(j2) = y(i);
    xs1(j2) = x(i);
    k1s1(j2) = k1(i);
   end
if a22(i)*a22(i-1)<= 0
    j3 = j3+1;
    ys2(j3) = y(i);
    xs2(j3) = x(i);
    k1s2(j3) = k1(i);
    end
end
mh = j1
ms1 = j2
ms2 = j3
     figure;
plot(k1(1:n),x(1:n),'black', 'LineWidth', 2);
    hold on
plot(k1(1:n),y(1:n),'b--', 'LineWidth', 2);
   hold on
plot(k1h(1:mh),yh(1:mh),'s','MarkerFaceColor',
'b','MarkerEdgeColor','k','MarkerSize',6);
     hold on
plot(k1h(1:mh),xh(1:mh),'s','MarkerFaceColor',
'b','MarkerEdgeColor','k','MarkerSize',6);
   hold on
   if j2>0
plot(k1s1(1:ms1),ys1(1:ms1),'o','MarkerFace
Color','r','MarkerEdgeColor','k','MarkerSize',6);
   hold on
plot(k1s1(1:ms1),xs1(1:ms1),'o','MarkerFace
Color','r','MarkerEdgeColor','k','MarkerSize',6);
   hold on
   end
   if j3>0
plot(k1s2(1:ms2),ys2(1:ms2),'d','MarkerFace
Color','k','MarkerEdgeColor','k','MarkerSize',6);
```

```
   hold on
plot(k1s2(1:ms2),xs2(1:ms2),'d','MarkerFace
Color','k','MarkerEdgeColor','k','MarkerSize',6);
   hold on
   end
title('Dependence on Parameter k_1',
'FontSize',12);
text(0.055,0.85, ['  k_{-1}=',num2str(k1m),...
    '  k_{-3}=',num2str(k3m),'  k_3=',
num2str(k3),'  k_2=',num2str(k2i)]);
xlabel('k_1','FontSize',14); ylabel('y_1,
y_2', 'FontSize',14);
axis([0.05 0.1 0.0 0.95]); grid on;
legend('y_1','y_2','hopf','hopf','turing',
'turing','Location','East');
    figure
   plot(k1(1:n),a11(1:n),'k', 'LineWidth', 2);
hold on
     plot(k1(1:n),a22(1:n),'r--', 'LineWidth', 2);
hold on
plot(k1(1:n),sp(1:n),'b:', 'LineWidth', 2);
hold on
 plot(k1(1:n),0,'b', 'LineWidth', 2);
hold on
 title('Dependence on Parameter k_1',
'FontSize',12);
 xlabel('k_1','FontSize',14); %ylabel('a_{11}
 or a_{22} ', 'FontSize',14);
 axis([0.05 0.09 -0.02 0.02]); grid on
 legend('a_{11}','a_{22}', 'sled','zero',
'Location','NorthEast');
      k1s = 0.065;
D1 = 0.01;
D2 = 1;
DD = 2*D1*D2;
L = 50; % 0<x<L
x=[0.001:0.0005:0.9];
n = max(size(x));
is=0;
j4=0;
       i=1;
y(i) = (1-x(i))*(1-alk);
z(i) = (1-y(i)-x(i));
k1(i) = (k1m*x(i)+k2i*x(i)*z(i)^2)/z(i);
A11 = -k1(i)-k1m-k2i*z(i)^2+2*k2i*x(i)*z(i);
A12 = -k1(i)+2*k2i*x(i)*z(i);
A21 = -k3;
A22 = -k3-k3m;
sp(i)= A11+A22;
del(i)=A11*A22-A12*A21;
B(i) = D1*A22 + D2*A11;
disc(i)=B(i)^2-4*D1*D2*del(i);
dks(i)=k1(i)-k1s;
        if disc(i) >=0
   is=is+1;
h1(is)=(B(i)+sqrt(disc(i)))/DD;
h2(is)=(B(i)-sqrt(disc(i)))/DD;
nn1(is) = sqrt(h1(is))*L/pi;
nn2(is)=sqrt(h2(is))*L/pi;
k1(is)=k1(i);
end
        for i = 2:n
y(i) = (1-x(i))*(1-alk);
z(i) = (1-y(i)-x(i));
k1(i) = (k1m*x(i)+k2i*x(i)*z(i)^2)/z(i);
A11 = -k1(i)-k1m-k2i*z(i)^2+2*k2i*x(i)*z(i);
A12 = -k1(i)+2*k2i*x(i)*z(i);
A21 = -k3;
A22 = -k3-k3m;
sp(i)= A11+A22;
del(i)=A11*A22-A12*A21;
B(i) = D1*A22 + D2*A11;
disc(i)=B(i)^2-4*D1*D2*del(i);
dks(i)=k1(i)-k1s;
            if disc(i) >=0
   is=is+1;
h1(is)=(B(i)+sqrt(disc(i)))/DD;
h2(is)=(B(i)-sqrt(disc(i)))/DD;
nn1(is) = sqrt(h1(is))*L/pi;
nn2(is)=sqrt(h2(is))*L/pi;
k1(is)=k1(i);
end
           if dks(i)*dks(i-1)<= 0
   j4 = j4+1
   K1S(j4)=k1(i);
   yS(j4) = y(i);
   xS(j4) = x(i);
   a11S(j4)=A11;
   a22S(j4)=A22;
   spS(j4)=sp(i);
   delS(j4)=del(i);
     end
end
          ist =is;
    figure;
plot(nn1(1:ist),k1(1:ist),'k.','MarkerSize', 6);
hold on
plot(nn2(1:ist),k1(1:ist),'b.','MarkerSize', 6);
hold on
title('Turing Bifurcation','FontSize',12);
xlabel('n','FontSize',14); ylabel('k_1',
'FontSize',14);
```

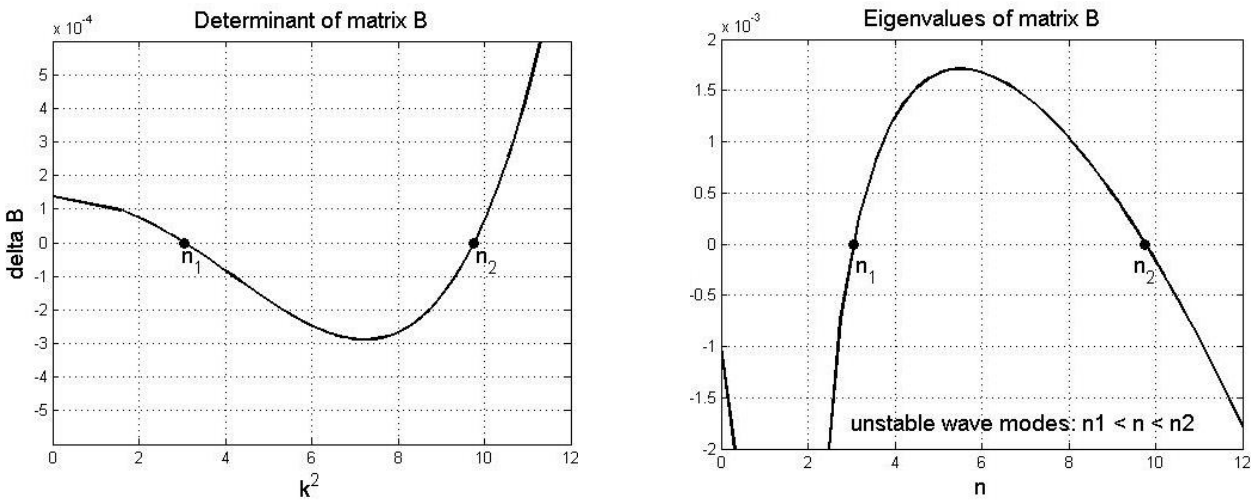
```
axis([0.0 25 0.06 0.08]); grid on
% параметры
j4 = 1;
k1i=K1S(j4);
%   Матрица Якоби
A11 = a11S(j4)
A22 = a22S(j4)
S_A = spS(j4)
delta_A = delS(j4)
%   delta_B = delta_A-(a11*D2+a22*D1)*h
+D1*D2*h^2,   h=k^2,  k=pi*nn/L
%    S_B = S_A-h*(D1+D2)
h=[0.0:0.01:60];
nh = max(size(h));
    for i = 1:nh
    nn(i)=sqrt(h(i))*L/pi;
 S_B(i) = S_A-h(i)*(D1+D2);
 delta_B(i) = delta_A-(A11*D2+A22*D1)
*h(i)+D1*D2*h(i)^2;
gam1(i)=0.5*(S_B(i)+sqrt(S_B(i)^2-4
*delta_B(i)));
gam2(i)=0.5*(S_B(i)+sqrt(S_B(i)^2-4
*delta_B(i)));
       end
 Dis = (A11*D2+A22*D1)^2 – 4
*delta_A*D1*D2;
 h1 = ((A11*D2+A22*D1)+sqrt(Dis))/DD;
 h2 = ((A11*D2+A22*D1)-sqrt(Dis))/DD;
 nh1 = sqrt(h1)*L/pi
 nh2 = sqrt(h2)*L/pi
      figure;
plot(nn(1:nh),delta_B(1:nh),'k', 'LineWidth', 2);
hold on
plot(nh1,0,'o','MarkerFaceColor','k','Marker
EdgeColor','k','MarkerSize',6);
hold on
plot(nh2,0,'o','MarkerFaceColor','k','Marker
EdgeColor','k','MarkerSize',6);
hold on
 title('Determinant of matrix B','FontSize',14)
xlabel('k^2','FontSize',14); ylabel('delta B',
 'FontSize',14);
axis([0.0 12.0 -6.e-4 6.e-4]); grid on;
text (3.0, -0.5e-4,'n_1 ','FontSize',14);
text (9.8, -0.5e-4,'n_2 ','FontSize',14);
       figure;
   plot(nn(1:nh),gam2(1:nh),'k', 'LineWidth', 2);
hold on
 plot(nn(1:nh),gam1(1:nh),'k', 'LineWidth', 2);
hold on
plot(nh1,0,'o','MarkerFaceColor','k',
'MarkerEdgeColor','k','MarkerSize',6);
hold on
plot(nh2,0,'o','MarkerFaceColor','k',
'MarkerEdgeColor','k','MarkerSize',6);
hold on
   title('Eigenvalues of matrix B','FontSize',14)
xlabel('n','FontSize',14); ylabel
('gamma', 'FontSize',14);
axis([0.0 12.0 -0.002 0.002]); grid on;
text (3.1, -0.25e-3,'n_1 ','FontSize',14);
text (9.5, -0.25e-3,'n_2 ','FontSize',14);
text(3,-1.75e-3,'unstable wave modes:
n1 < n < n2','FontSize',14);
% численное интегрирование системы
типа реакция-диффузия с помощью
стандартной программы     pdepe
k1i=K1S(j4)
k2i = 0.5
ys0=yS(j4)
xs0=xS(j4)
a0=0.1;
nw = 6; %  номер гармоники  n1 < n < n2
m = 0;
x = linspace(0,L,500);
t = linspace(0,1000,200);
Nx = max(size(x));
Nt = max(size(t));
sol = pdepe(m,@pdex4pde,@pdex4ic,
@pdex4bc,x,t);
tet1 = sol(:,:,1);
tet2 = sol(:,:,2);
        figure;
for i=1:Nt
   subplot(2,1,1);
   plot(x,tet1(i,:),'k','LineWidth',2);
   text(5.1,0.5,['t=',num2str(t(i)),' s']);
   title('Distribution of y_1','FontSize',14);
   xlabel('x','FontSize',14);
   axis([0.0 L 0.2 0.7]); grid on;
           subplot(2,1,2);
   plot(x,tet2(i,:),'b','LineWidth',2);
   title('Distribution of y_2','FontSize',14);
   xlabel('x','FontSize',14);
   axis([0.0 L 0.28 0.32]); grid on;
    pause(0.3);
end;
hold off;
           figure;
plot(x,tet1(Nt,:),'k','LineWidth',2);
hold on;
plot(x,tet2(Nt,:),'k:','LineWidth',2);
```

```
hold on;

title('Profile of the stable structure','FontSize',14)
xlabel('x','FontSize',14)
legend('y1(x)','y2(x)','Location','NorthEast');

function [c,f,s] = pdex4pde(x,t,u,DuDx)
global D1 D2 k1i k1m k2i k3 k3m;
c = [1; 1];
f = [D1; D2] .* DuDx;
s = [k1i*(1-u(1)-u(2))-k1m*u(1)-k2i*u(1)*
(1-u(1)-u(2))^2; k3*(1-u(1)-u(2))-k3m*u(2)];

    function u0 = pdex4ic(x);
global ys0 xs0 a0 nw L
u0 = [xs0 + a0*cos(nw*x*pi/L); ys0];

function [pl,ql,pr,qr] = pdex4bc(xl,ul,xr,ur,t)
pl = [0; 0];     ql = [1; 1];
pr = [0; 0];     qr = [1; 1];
```



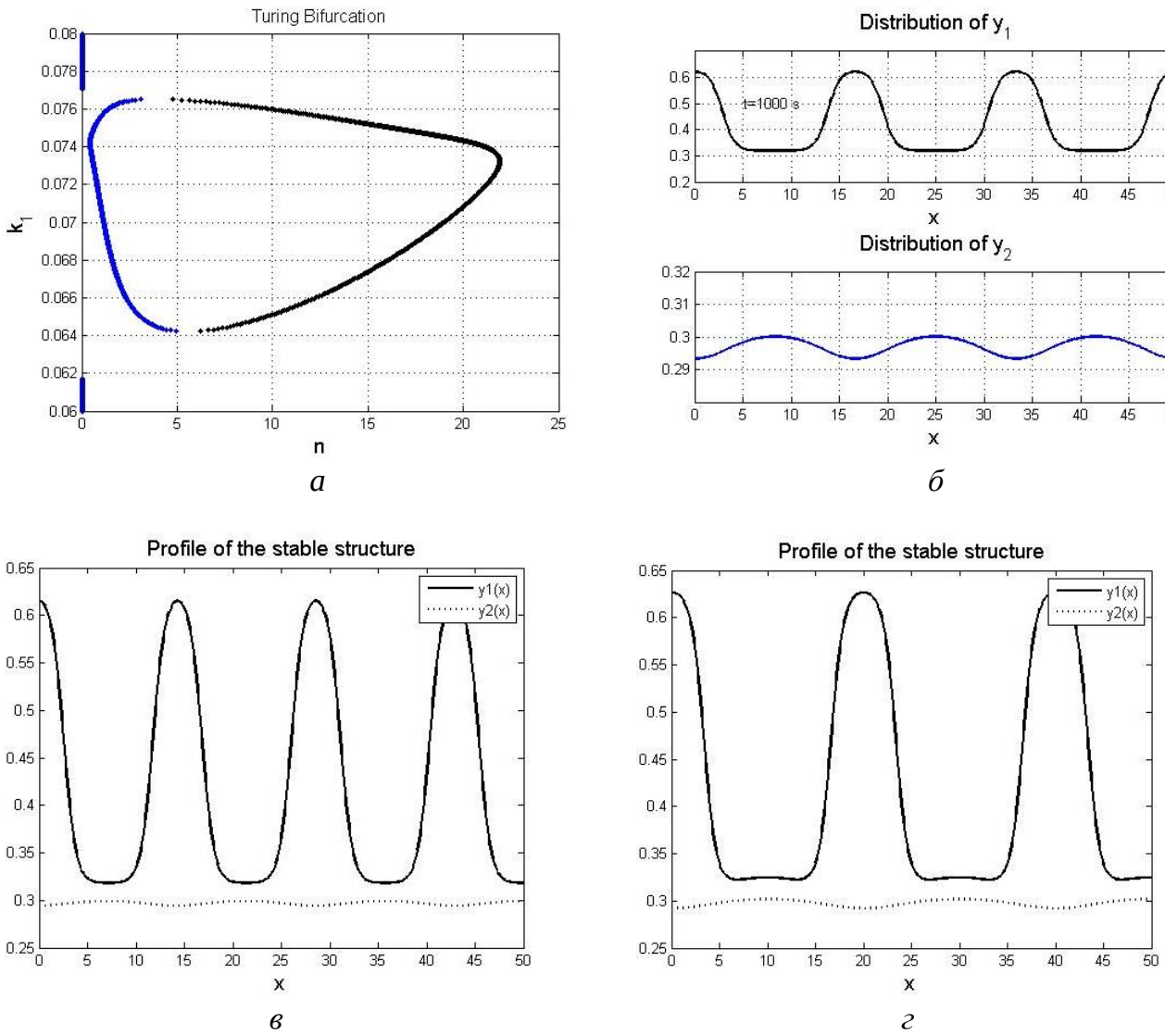

*а* *б*

Рис. 6. Зависимость от параметра $k_1$:
*а* – зависимость стационарных состояний от параметра;
*б* – зависимость элементов матрицы **A** от параметра




*а* *б*

Рис. 7. Спектральный анализ матрицы **B**:
*а* – зависимость от волнового числа *k* определителя матрицы **B**;
*б* – зависимость собственных значений матрицы **B** от номера гармоники *n*




*а* *б* *в* *г*

Рис. 8. Область существования структур:
*а* – область неустойчивости Тьюринга; *б,в,г* − вид некоторых установившихся стационарных структур, соответствующих гармоникам с номерами *n*: *б* – *n*=6; *в* − *n*=7; *г* – *n*=5

## П.2.3 ПРОГРАММЫ К РАЗДЕЛУ 4. Поиск и построение волн переключения

**Программа № 6.** Здесь рассчитывается волна переключения, которая возникает в бистабильной среде и описывается решением уравнения типа реакция–диффузия. «Реакция» задается полиномом третьей степени, имеющим три корня, два из которых устойчивые (бистабильная среда). В этом случае направление переключения известно (см. раздел 4.1). Задается коэффициент диффузии, длина отрезка, время и сетки по времени и по пространству. Определяется также начальное распределение концентрации вещества по пространству. Оно имеет вид ступеньки. Решение находится с помощью стандартной подпрограммы в Matlab pdepe(m,@pdex1pde,@pdex1ic,@pdex1bc,x,t). Можно наблюдать формирование бегущей волны в виде фронта (см. раздел 4.1).

```
function front1
global a D a1 a2 a3
global Nx
a = 16;
D = 36;
a1 = 0.1;
a2 = 0.4;
a3 = 0.9;
L = 500;
m = 0;
x = linspace(0,L,500);
t = linspace(0,100,100);
Nx = max(size(x));
Nt = max(size(t));
      sol = pdepe(m,@pdex1pde,@pdex1ic,
@pdex1bc,x,t);
u = sol(:,:,1);
    figure
surf(x,t,u)
title('u(x,t)')
xlabel('Distance x')
ylabel('Time t')
    figure
plot(x,u(1,:));
hold on;
plot(x,u(20,:),'green','LineWidth',2);
hold on;
plot(x,u(40,:),'r','LineWidth',2');
hold on;
plot(x,u(60,:),'blue','LineWidth',2);
hold on;
plot(x,u(80,:),'black','LineWidth',2);
hold on;
plot(x,u(90,:),'green','LineWidth',2);
hold on;
plot(x,u(end,:),'r','LineWidth',2);
hold on;
title('Profiles of front')
xlabel('Distance x')
ylabel('u(x)')
      function [c,f,s] = pdex1pde(x,t,u,DuDx)
global a D a1 a2 a3
global Nx
c = 1;
f = D*DuDx;
F = a*(u - a1)*(u - a2)*(u - a3);
s = -F;
    function u0 = pdex1ic(x);
global a D a1 a2 a3
global Nx
u0 = a1;
   function [pl,ql,pr,qr] = pdex1bc(xl,ul,xr,ur,t)
global a D a1 a2 a3
global Nx
 pl = ul - a3;
ql = 0;
pr = ur - a1;
qr = 0;
```

**Программа № 7.** Эта программа рассчитывает волну переключения в системе с частными производными типа реакция-диффузия. Однако, предварительно необходимо произвести поиск параметров, при которых возможно возникновение волн переключения. Для этого можно воспользоваться программой 1. С помощью программы 1 находится область множественности стационарных состояний. Из области множественности выбираются параметры и задаются в программе 7. В начале работы этой программы два раза интегрируется соответствующая система ОДУ с разными начальными данными и находятся значения двух устойчивых стационаров методом на установление. Рисуются графики выхода решений системы ОДУ на стационары (рис. 9). Далее производится вычисление определенного интеграла методом трапеций, по знаку которого определяется направление переключения. Рисуется фазовый портрет системы, проводятся изоклины и отмечаются устойчивые стационарные точки, печатается значение интеграла (рис. 10).

После этого в программе вычисляется решение, описывающее волну переключения, системы с диффузией. Для этого задаются коэффициенты диффузии, параметры сетки и начальные данные в виде ступеньки, уровни которой соответствуют стационарам. Профили решения записываются в некоторые моменты времени и после окончания расчета воспроизводятся в режиме реального времени.

Можно наблюдать формирование и движение фронта. На рис. 11 показан установившийся профиль волны переключения.

```
function front2
global a b D1 D2 b0 k0 L e1
global Nx yend_ode1 yend_ode2

a = 0.02;
b = 0.25;
D1 = 1;
D2 = 1;
e1 = 0.1;
b0 = 0.15;
k0 = 0.1;
L = 60;
Nx=240;
Tmax=12;
     global xmin_pde xmax_pde xnum_pde
 yend_ode1 yend_ode2
global n_iniPDE x_pde
% решение системы ОДУ
tmin_ode = 0.0;
tmax_ode = 150.0;
tspan    = [tmin_ode tmax_ode];
 options = odeset('RelTol',1e-8,'AbsTol',
1e-9,'Refine',5);
       y0_ode        = [ 0.5; 0.13];
[t_ode,y_ode] = ode15s(@f_ODE,tspan,
y0_ode,options);
n_ode         = max(size(t_ode))
   yend_ode1     = [ y_ode(end,1); y_ode(end,2)]
        subplot (2,1,1); plot(t_ode,y_ode,
'LineWidth',2); grid on;
v = axis; axis([v(1) v(2) 0.0 0.8]);
xlabel('time [s]'); ylabel('concentrations');
title('Relaxation to stable state,
 first stable state');
legend('y_1','y_2','Location','East');
        y0_ode        = [ 0.2; 0.3];
[t_ode,y_ode] = ode15s(@f_ODE,tspan,
y0_ode,options);
       n_ode  = max(size(t_ode))
yend_ode2  = [ y_ode(end,1); y_ode(end,2)]
subplot (2,1,2); plot(t_ode,y_ode,'LineWidth',2);
grid on;
     v = axis; axis([v(1) v(2) 0.0 0.4]);
xlabel('time [s]'); ylabel('concentrations');
title('Relaxation to stable state, second
stable state');
legend('y_1','y_2','Location','East');
 hold off;
tmin_pde = 0.0;
tmax_pde = Tmax;
tnum_pde = 100;
options  = odeset('RelTol',1e-5,'AbsTol',1e-6);
% направление переключения
y1min=yend_ode2(1);
y1max=yend_ode1(1);
hy=0.001;
yy1 = [y1min:hy:y1max];
nn = max(size(yy1));

Sumf=0;
        for i = 1:nn
    yy2(i) = b*yy1(i)+b0;
f1(i) = yy1(i)*(1-yy1(i))-yy2(i)*
(yy1(i)-a)/(yy1(i)+a);
Sumf=Sumf+f1(i);
      end
Sumf=(Sumf-0.5*(f1(1)+f1(nn)))*hy
% если Sumf<0, то направление:
 y1max --> y1min;   если Sumf>0, тонаправ:
 y1max <-- y1min;  если Sumf=0, то фронт
 стоит на месте
 % фазовый портрет системы ОДУ
r = [0.021:0.001:1];
n = max(size(r))
     for i = 1:n
uf1(i) = r(i)*(1-r(i))*(r(i) + a)/(r(i) - a);
vf2(i) = b*r(i)+b0;
      end
     figure;
plot(r,vf2,'b--','LineWidth',2);
     hold on
plot(r,uf1,'black','LineWidth',2);
     hold on
plot(st_p1,st_p2,'blacko');
title(['Phase Portrait.     ','Integral:  I =   ',
num2str(Sumf)]);
xlabel('y_1'); ylabel('y_2');
axis([0.0 0.9 0.05 0.35]); grid on;
legend('f2=0','f1=0','stable
points','Location','South');
% решение системы с частными
производными типа реакция-диффузия
 m = 0;   % slab symmetry
xmin_pde = 0;
xmax_pde = L;
xnum_pde = Nx;
```

```
x_pde = linspace(xmin_pde,xmax_pde,
xnum_pde);
t_pde =
linspace(tmin_pde,tmax_pde,tnum_pde);
sol =
pdepe(m,@pde1,@pde_ic,@pde_bc,x_pde,
t_pde,options);
tet1 = sol(:,:,1);
tet2 = sol(:,:,2);
    n_t_pde = max(size(sol(:,1,1)));
      figure;
for i=1:n_t_pde
   name = int2str(i);
      k=fopen(name,'wt');
   for j=1:xnum_pde
      kk=fprintf(k,'%d %d %d %d\n',x_pde(j),
tet1(i,j),tet2(i,j));
end;
fclose(k);
      subplot(2,1,1);
plot(x_pde,tet1(i,:),'b','LineWidth',2);
text(1.3,1.3,['t=',num2str(t_pde(i)),' s']);
title('Distribution of y_1');
xlabel('distance [cell]'); ylabel('y_1');
axis([xmin_pde xmax_pde 0.0 0.5]); grid on;
           subplot(2,1,2);
plot(x_pde,tet2(i,:),'g','LineWidth',2);
title('Distribution of y_2');
xlabel('distance [cell]'); ylabel('y_2');
axis([xmin_pde xmax_pde 0.0 0.3]); grid on;
pause(1);
end;
hold off;
         function dydt = f_ODE(t,y) % ODE
global a b e1 b0;
dydt = [y(1)*(1-y(1))-y(2)*(y(1)-a)/(y(1)+a)
         e1*(b*y(1)-y(2)+b0)];
      function [c,f,s] = pde1(x,t,u,DuDx) % PDE
global a b D1 D2 b0 k0 L e1
 c = [e1; 1];
f = [D1; D2] .* DuDx;
s = [u(1)*(1-u(1))-u(2)*(u(1)-a)/(u(1)+a);
b*u(1)-u(2)+ b0];
    function u0 = pde_ic(x) % initial conditions
global a b D1 D2 b0 k0 L e1
global Nx yend_ode1 yend_ode2
   u0 = [yend_ode1(1) yend_ode1(2)];
 if x >=0 & x <= 0.04*L
    u0 = [yend_ode2(1); yend_ode2(2)];
    end
    function [pl,ql,pr,qr] = pde_bc(xl,ul,xr,ur,t)
global Nx yend_ode1 yend_ode2
 pl = [ul(1)-yend_ode2(1); ul(2)-yend_ode2(2)];
ql = [0; 0];
pr = [ur(1)-yend_ode1(1); ur(2)-yend_ode1(2)];
qr = [0; 0];
```

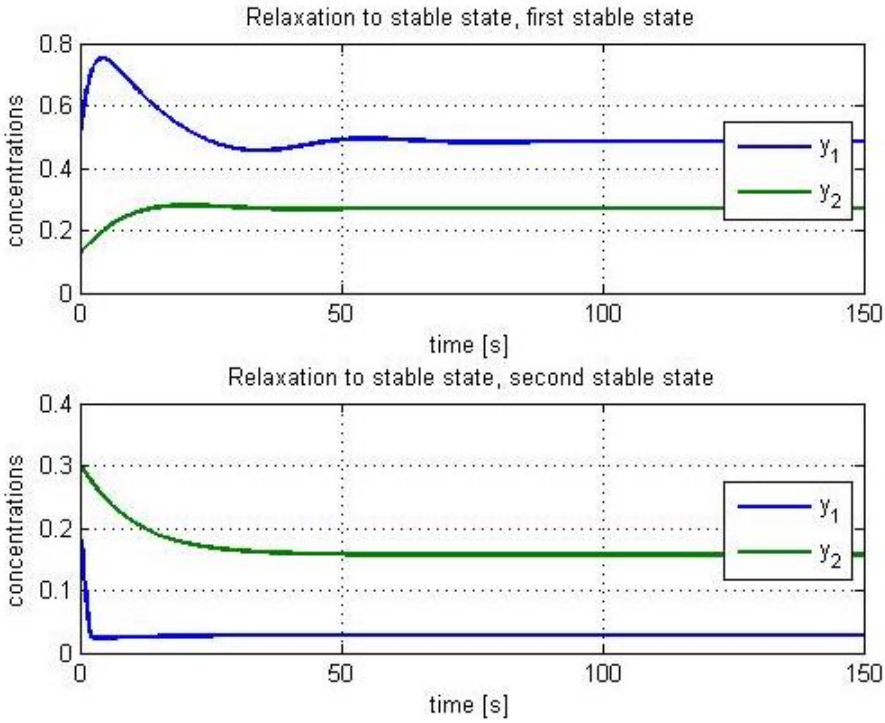



Рис. 9. Выход решений системы ОДУ на первый устойчивый стационар (вверху) и второй устойчивый стационар (внизу)

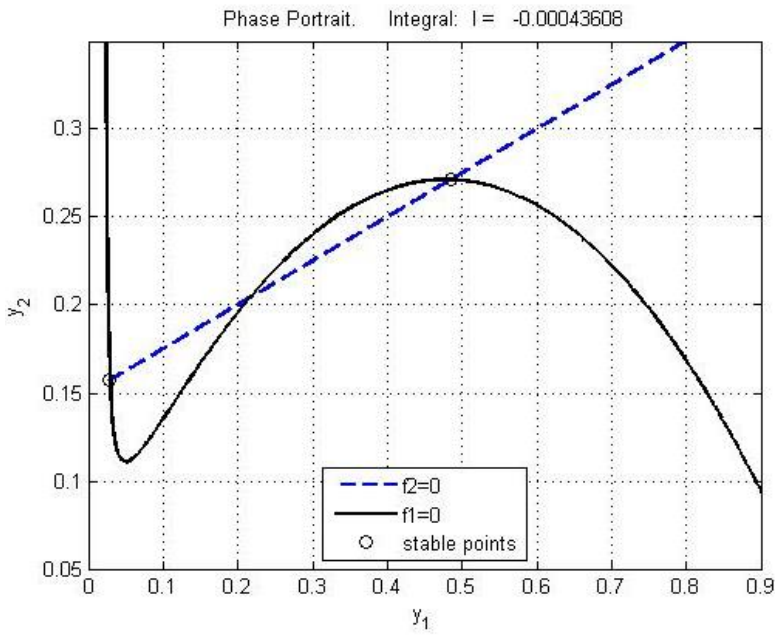



Рис. 10 Фазовый портрет системы ОДУ

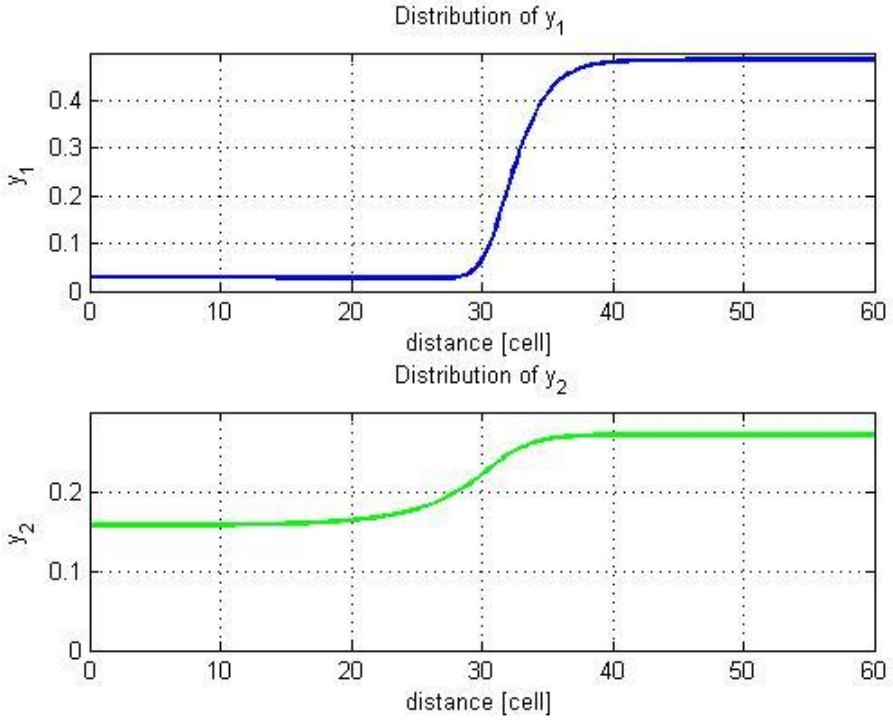



Рис. 11. Профиль сформировавшейся волны переключения

## П.2.4 ПРОГРАММА К РАЗДЕЛУ 5.
## Построение уединенного бегущего импульса

**Программа № 8.** Эта программа находит решение системы с частными производными типа реакция-диффузия, описывающее уединенный бегущий импульс в возбудимой среде. Однако, предварительно необходимо найти параметры, при которых в системе ОДУ существует устойчивый возбудимый стационар. Это можно сделать, проведя аналитические исследования и воспользовавшись программой 3.

Выбранные параметры задаются в программе 8. В начале работы этой программы находится решение системы ОДУ, и на фазовой плоскости проводятся изоклины, рисуется траектория и отмечается устойчивая стационарная точка (рис.12). Фазовый портрет системы демонстрирует, что стационар имеет возбудимый характер.

После этого в программе вычисляется решение системы с диффузией, описывающее бегущий импульс. Для этого задаются коэффициенты диффузии, параметры сетки и начальные данные, которые имеют вид ступеньки. Один уровень ступеньки соответствует стационару, а другой значению на траектории в системе ОДУ в точке, максимально удаленной от стационара. Профили решения записываются в некоторые моменты времени и после окончания расчета воспроизводятся в режиме реального времени. Можно наблюдать формирование и движение импульса. На рис. 13 показан образ импульса в фазовом пространстве системы, а на рис. 14 представлен установившийся профиль импульса.

```
function puls
global a b D1 D2 b0 k0 L e1
global Nx yend_ode1 yend_ode2

a = 0.02;
b = 0.46;
D1 = 1;
D2 = 1;
e1 = 0.1;
b0 = 0.11;
k0 = 0.1;
L = 60;
Nx=240;
Tmax=7;

global xmin_pde xmax_pde xnum_pde
yend_ode1 yend_ode2 n_iniPDE x_pde
 % интегрирование системы ОДУ
tmin_ode = 0.0;
tmax_ode = 100.0;
tspan    = [tmin_ode tmax_ode];
options = odeset('RelTol',1e-8,'AbsTol',1e-9,
'Refine',5);
y0_ode       = [ 0.1; 0.12];
[t_ode1,y_ode1] = ode15s(@f_ODE,
tspan,y0_ode,options);
n_ode1         = max(size(t_ode1))
yend_ode1     = [ y_ode1(end,1);
y_ode1(end,2)]

subplot (2,1,1); plot(t_ode1,y_ode1,
'LineWidth',2); grid on;
v = axis; axis([v(1) v(2) 0.0 0.8]);
xlabel('time [s]'); ylabel('concentrations');
title('Relaxation to stable state');
legend('y_1','y_2','Location','East');
y0_ode       = [ 0.01; 0.01];
[t_ode2,y_ode2] = ode15s(@f_ODE,tspan,
y0_ode,options);
          n_ode2         = max(size(t_ode2))
yend_ode2     = [ y_ode2(end,1);
y_ode2(end,2)]
      st_p1=[yend_ode1(1); yend_ode2(1)];
      st_p2=[yend_ode1(2); yend_ode2(2)];
        subplot (2,1,2); plot(t_ode2,y_ode2,
'LineWidth',2); grid on;
v = axis; axis([v(1) v(2) 0.0 0.8]);
xlabel('time [s]'); ylabel('concentrations');
title('Relaxation to stable state');
legend('y_1','y_2','Location','East');
    hold off;
% построение фазового портрета
r = [0.021:0.001:1];
n = max(size(r))
     for i = 1:n
     uf1(i) = r(i)*(1-r(i))*(r(i) + a)/(r(i) - a);
     vf2(i) = b*r(i)+b0;
     end
  figure;
plot(r,vf2,'b--','LineWidth',2);
hold on
plot(r,uf1,'r:','LineWidth',2);
hold on
plot(y_ode1(:,1),y_ode1(:,2),'black',
'LineWidth',2);
hold on
plot(st_p1,st_p2,'blacko');
title('Phase Portrait');
xlabel('y_1'); ylabel('y_2');
axis([0.0 0.9 0.05 0.35]); grid on;
legend('f2=0','f1=0','trajectory','stable point',
'Location','South');
```

```
% решение системы с частными
производными типа реакция-диффузия
m = 0;   % slab symmetry
xmin_pde = 0;
xmax_pde = L;
xnum_pde = Nx;
 tmin_pde = 0.0;
tmax_pde = Tmax;
tnum_pde = 100;
options  = odeset('RelTol',1e-5,'AbsTol',1e-6);
x_pde = linspace(xmin_pde,xmax_pde,
xnum_pde);
t_pde = linspace(tmin_pde,tmax_pde,
tnum_pde);
      sol = pdepe(m,@pde1,@pde_ic,@pde_bc,
x_pde,t_pde,options);
tet1 = sol(:,:,1);
tet2 = sol(:,:,2);
n_t_pde = max(size(sol(:,1,1)));

          figure;
    for i=1:n_t_pde
   subplot(2,1,1);
   plot(x_pde,tet1(i,:),'b','LineWidth',2);
   text(1.3,1.3,['t=',num2str(t_pde(i)),' s']);
   title('Distribution of y_1');
   xlabel('distance [cell]'); ylabel('y_1');
   axis([xmin_pde xmax_pde 0.0 0.7]); grid on;
          subplot(2,1,2);
   plot(x_pde,tet2(i,:),'g','LineWidth',2);
   title('Distribution of y_2');
   xlabel('distance [cell]'); ylabel('y_2');
   axis([xmin_pde xmax_pde 0.05 0.4]); grid on;
        pause(1);
end;
hold off;
figure;
plot(r,vf2,'b--','LineWidth',2);
hold on
plot(r,uf1,'r:','LineWidth',2);
hold on
plot(tet1(100,:),tet2(100,:),'black','LineWidth',2);
hold on
plot(st_p1,st_p2,'blacko');
title('Phase Portrait');
xlabel('y_1'); ylabel('y_2');
axis([0.0 0.9 0.05 0.35]); grid on;
legend('f2=0','f1=0','trajectory puls','stable
point','Location','South');
       function dydt = f_ODE(t,y) % ODE
global a b e1 b0;
dydt = [y(1)*(1-y(1))-y(2)*(y(1)-a)/(y(1)+a)
          e1*(b*y(1)-y(2)+b0)];
     function [c,f,s] = pde1(x,t,u,DuDx) % PDE
global a b D1 D2 b0 k0 L e1
c = [e1; 1];
f = [D1; D2] .* DuDx;
s = [u(1)*(1-u(1))-u(2)*(u(1)-a)/(u(1)+a);
b*u(1)-u(2)+ b0];
     function u0 = pde_ic(x) % initial conditions
global a b D1 D2 b0 k0 L e1
global Nx yend_ode1 yend_ode2
  u0 = [yend_ode1(1) yend_ode1(2)];
 if x >=0 & x <= 0.04*L
    u0 = [0.7; 0.2];
  end;
     function [pl,ql,pr,qr] = pde_bc(xl,ul,xr,ur,t)
global Nx yend_ode1 yend_ode2
 pl = [0; 0];
ql = [1; 1];
pr = [0; 0];
qr = [1; 1];
```

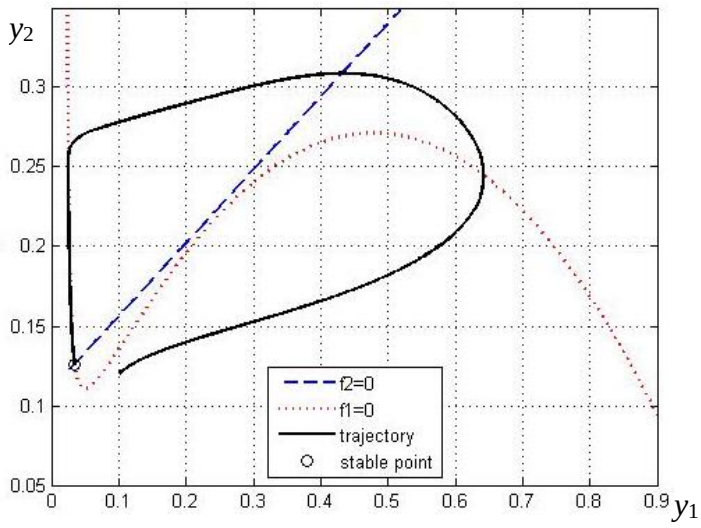



Рис. 12. Фазовый портрет системы ОДУ в возбудимой среде

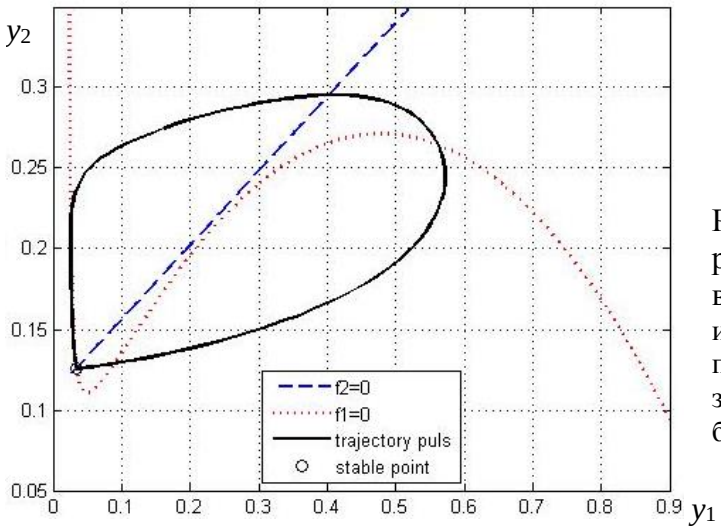



Рис. 12. Фазовый портрет распределенной системы в возбудимой среде;
изоклины системы отмечены пуктирными линиями;
замкнутая траектория описывает бегущий импульс

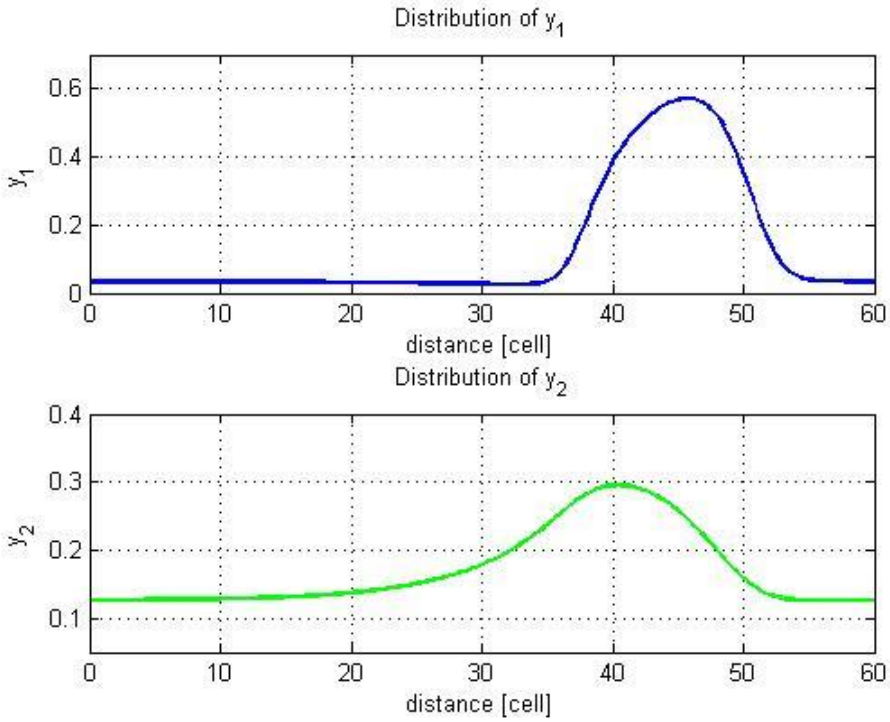



Рис. 14. Профиль сформировавшегося бегущего импульса

## Библиографический список


1. Куркина Е. С. Автоколебания, структуры и волны в химических системах. Методы математического моделирования. – М.: РХТУ им. Д. И. Менделеева, 2012. 220 с.
2. Кольцова Э. М., Гордеев Л. С. Методы синергетики в химии и химической технологии. М.: Химия, 1999. 256 с.
3. Быков В. И., Цебенова С. Б. Нелинейные модели химической кинетики. М.: КомКнига, 2010. 350 с.
4. Быков В. И. Моделирование критических явлений в химической кинетике. М.: КомКнига, 2007. 328 с.
5. Васильев В. А., Романовский Ю. М., Яхно В. Г. Автоволновые процессы. М.: Наука, 1987. 240 с.
6. Гленсдорф П., Пригожин И. Термодинамическая теория структуры, устойчивости и флуктуаций. М.: Мир, 1973. 432 с.
7. Кудрявцев И. К. Химические нестабильности. М.: Изд-во МГУ, 1987. 254 с.
8. Лоскутов А. Ю., Михайлов А. С. Введение в синергетику. М.: Наука, 1990. 270 с.
9. Малинецкий Г. Г. Математические основы синергетики. Хаос, структуры, вычислительный эксперимент. 4-е изд. М.: КомКнига, 2005. 312 с.
10. Николис Г., Пригожин И. Самоорганизация в неравновесных системах. М.: Мир, 1979. 273 с.
11. Полак Л. С., Михайлов А. С. Самоорганизация в неравновесных физико-химических системах. М.: Наука, 1983. 286 с.
12. Самарский А. А., Слинько М. Г. Математическое моделирование гетерогенных каталитических реакций и процессов //Известия РАН. Сер. химич. 1998. №10. С. 1985–1994.
13. Слинько М. Г. Некоторые тенденции развития теории химической технологии // Хим. промышленность. 2000. № 2. С. 69–74.
14. Слинько М. Г. Основы и принципы математического моделирования каталитических процессов: Сб. статей. Новосибирск: Изд-во института катализа им. Г.К. Борескова, 2004.
15. Хакен Г. Синергетика. М.: Мир, 1980. 404 с.
16. Эбелинг В. Образование структур при необратимых процессах. М.: Мир, 1979.
17. Яблонский Г. С., Быков В. И., Елохин В. И. Кинетика модельных реакций гетерогенного катализа. Новосибирск: Наука, 1984. 224 с.

## Оглавление

Введение……..……..…...3

I. АВТОКОЛЕБАНИЯ И СТАЦИОНАРНЫЕ РЕШЕНИЯ

1. Построение параметрического портрета системы. Автоколебания и множественность стационарных решений……..……..…5

1.1 Технология проведения параметрического анализа....……...5

1.2 Автокаталитический триггер……..……13

1.3 Реакция окисления CO, механизм Лэнгмюра–Хиншельвуда……..……16

1.4 Автокаталитический осциллятор с буферной стадией……..……..18

1.5 Термокинетические автоколебания..……..……22

1.6 Автоколебания, вызванные процессами окисления и восстановления поверхности катализатора в ходе реакции……..……..26

2. Релаксационные колебания, бистабильная и возбудимая динамика..……29

2.1 Описание динамики……..……..……....29

2.2 Модель типа ФитцХью–Нагумо……..…..…….…....32

2.3 Модель STM..……..…….……34

2.4 Модель реакции Филда–Кереша–Нойеса.……...……34

II. ПРОСТРАНСТВЕННО-ВРЕМЕННЫЕ СТРУКТУРЫ

3. Структуры Тьюринга...…….....35

3.1 Стационарные диссипативные структуры…..…….…….…35

3.2 Методика поиска областей существования структур Тьюринга...……..39

3.3 Структуры Тьюринга в модели «Брюселлятор»…..……...……....41

3.4 Структуры Тьюринга в двухкомпонентной модели гетерогенной каталитической реакции……...……45

4. Волны переключения…….....49

4.1 Волны переключения в однокомпонентной модели КПП..……49

4.2 Волны переключения в двухкомпонентной модели реакции Филда–Кереша–Нойеса…...…….……53

4.3 Волны переключения в модели STM.…….....…….……55

5. Уединенные бегущие импульсы..……59

5.1 Механизм формирования импульса.……..……59

5.2 Уединенные бегущие импульсы в модели ФитцХью–Нагумо…..…..……62

5.3 Уединенные импульсы в модели Филда–Кереша–Нойеса.……....63

ПРИЛОЖЕНИЕ 1. Курсовые задачи……...65

П.1.1 Задачи к разделу 1…….……..……65

П.1.2 Задачи к разделу 2…….……..……69

П.1.3 Задачи к разделу 3…….……..……70

П.1.4 Задачи к разделу 4…….……..……72

П.1.5 Задачи к разделу 5……..……73

ПРИЛОЖЕНИЕ 2. Программы……75
П.2.1 Программы к разделу 1 и 2……..……..75
П.2.2 Программы к разделу 3…..……..……..80
П.2.3 Программы к разделу 4…..……..……..88
П.2.4 Программы к разделу 5…..……..……..92

Библиографический список…….....96

Оглавление……97

Учебное издание

КУРКИНА Елена Сергеевна

# КУРСОВЫЕ ЗАДАЧИ ПО СИНЕРГЕТИКЕ

## МЕТОДЫ ПОИСКА ПРОСТРАНСТВЕННО-ВРЕМЕННЫХ СТРУКТУР

Редактор: Р. Г. Чиркова

Рисунок на обложке. Параметрический портрет гетерогенной автокаталитической реакции с буферной стадией

Подписано в печать. 10.10.2014 г. Формат 60×84 1/16

Усл. печ. л. 5.81. Уч.-изд. л. 7.38. Тираж 150 экз.

Заказ

Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева

Издательский центр

Адрес университета и издательского центра:

125047, Москва, Миусская пл., 9.