Неустойчивость Тьюринга

1. Линейный анализ для системы двух уравнений реакция-диффузия. Сравнение с линейным анализом для системы двух ОДУ. Бифуркационные диаграммы.

Рассмотрим распределенную систему, в которой имеется два вещества, т.е. две кинетические переменные *x* и *y*, которые претерпевают химические превращения и кроме того могут диффундировать в реакционном объеме. В случае одномерного реактора такая система может быть описана системой уравнений:

$$\frac{\partial x}{\partial t} = P(x, y, r) + D_x \frac{\partial^2 x}{\partial r^2}$$

$$\frac{\partial y}{\partial t} = Q(x, y, r) + D_y \frac{\partial^2 y}{\partial r^2}$$

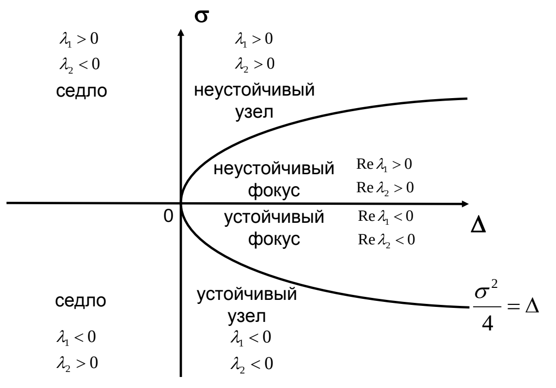
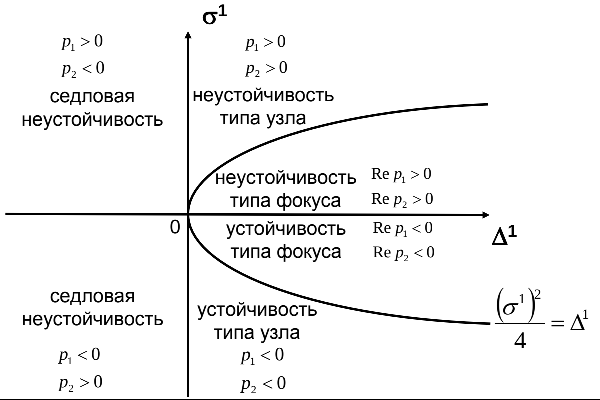
Здесь *r* – пространственная переменная. Пусть краевыми условиями являются условия непроницаемости торцов одномерного реактора:

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

Как и в случае точечных моделей, первым необходимым этапом изучения модели распределенной системы является исследование устойчивости ее однородного стационарного состояния.
Исследование на устойчивость будем проводить аналогично тому, как проводилось исследование на устойчивость в случае системы обыкновенных дифференциальных уравнений (точечной системы).

<table>
<tr><td>Точечная система</td><td>Распределенная система</td></tr>
<tr><td>$$\frac{\partial x}{\partial t} = P(x, y)$$
$$\frac{\partial y}{\partial t} = Q(x, y)$$</td><td>$$\frac{\partial x}{\partial t} = P(x, y) + D_x \frac{\partial^2 x}{\partial r^2}$$
$$\frac{\partial y}{\partial t} = Q(x, y) + D_y \frac{\partial^2 y}{\partial r^2}$$</td></tr>
<tr><td>Стационарное состояние:
$x = \bar{x}$, $y = \bar{y}$</td><td>Рассмотрим пространственно однородное решение системы, такое что:
$x = \bar{x}$, $y = \bar{y}$</td></tr>
<tr><td colspan="2">где $\bar{x}$ и $\bar{y}$ являются корнями алгебраической системы уравнений:
$P(x,y) = 0$, $Q(x,y) = 0$
Гомогенное стационарное состояние устойчиво, если малые возмущения сил (в том числе и распределенных в пространстве), действующих на систему, вызывают малые возмущения ее решений. Предполагается, что эти возмущения остаются малыми при любом $t \to \infty$.</td></tr>
<tr><td>Пусть $\xi(t)$ и $\eta(t)$ – малые отклонения от стационарных решений $\bar{x}$ и $\bar{y}$.

Тогда для ξ и η можно записать линеаризованную систему:
$$\frac{\partial \xi}{\partial t} = a\xi + b\eta, \qquad (5)$$
$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = c\xi + d\eta$$</td><td>Пусть $\xi(t, r)$ и $\eta(t, r)$ – малые отклонения от пространственно однородных решений $\bar{x}$ и $\bar{y}$.
Тогда для ξ и η можно записать распределенную линеаризованную систему:
$$\frac{\partial \xi}{\partial t} = a\xi + b\eta + D_\xi \frac{\partial^2 \xi}{\partial r^2}, \ D_x = D_\xi,$$
$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = c\xi + d\eta + D_\eta \frac{\partial^2 \eta}{\partial r^2}, \ D_y = D_\eta$$</td></tr>
<tr><td colspan="2">$a = \frac{\partial P(\bar{x}, \bar{y})}{\partial x}$, $b = \frac{\partial P(\bar{x}, \bar{y})}{\partial y}$, $c = \frac{\partial Q(\bar{x}, \bar{y})}{\partial x}$, $d = \frac{\partial P(\bar{x}, \bar{y})}{\partial y}$</td></tr>
<tr><td>Решение будем искать в виде:
$$\xi(t) = Ae^{\lambda t}, \qquad (7)$$
$$\eta(t) = Be^{\lambda t}$$</td><td>Решение будем искать в виде:
$$\xi(t, r) = Ae^{pt}e^{ikr},$$
$$\eta(t, r) = Be^{pt}e^{ikr}$$</td></tr>
</table>

<table>
<tr><td>Множитель $e^{\lambda t}$ характеризует поведение отклонения от стационарного состояния во времени.</td><td>Множитель e^{pt} характеризует поведение отклонения от стационарного состояния во времени.
Множитель e^{ikr} характеризует отклонение величин переменных от однородного стационарного состояния в точке с координатой r для собственных функций, соответствующих волновому числу k. Для трубки длиной l волновое число принимает дискретные значения $k = k_n = \frac{\pi n}{l}$. Для бесконечного одномерного реактора волновые числа k меняются непрерывно от 0 до ∞.</td></tr>
<tr><td>Подстановка выражений (7) в (5) после сокращения на $e^{\lambda t}$ дает:
$A\lambda = aA + bB$
$B\lambda = cA + dB$
или:
$A(\lambda - a) - bB = 0,$ (9)
$cA - (\lambda - d)B = 0$</td><td>Подстановка выражений (7) в (5) после сокращения на $e^{pt}e^{ikr}$ дает:
$Ap = aA + bB - D_\xi k^2 A$
$Bp = cA + dB - D_\eta k^2 B$
или:
$A(p - a + D_\xi k^2) - bB = 0$
$cA - (p - d + D_\eta k^2)B = 0$</td></tr>
<tr><td colspan="2">Величины А, В тождественно не равны нулю только в том случае, если определитель системы (9) равен нулю:</td></tr>
<tr><td>$(\lambda - a)(\lambda - d) - bc = 0$
Получим характеристическое уравнение:
$\lambda^2 - \sigma\lambda + \Delta = 0$
$\sigma = a + d$
$\Delta = ad - bc$</td><td>$(p - a + k^2 D_\xi)(p - d + k^2 D_\eta) - bc = 0$
Получим дисперсионное уравнение:
$p^2 - \sigma^1 p + \Delta^1 = 0$
$\sigma^1 = a + d - k^2(D_\xi + D_\eta)$
$\Delta^1 = k^4 D_\xi D_\eta - k^2(aD_\eta + dD_\xi) + ad - bc$</td></tr>
<tr><td>Бифуркационная диаграмма 1:</td><td>Бифуркационная диаграмма 2:</td></tr>
<tr><td>
</td><td>
</td></tr>
</table>

2. Неустойчивость Тьюринга. Условия, когда в изначально однородном состоянии могут возникнуть диссипативные структуры вследствие диффузионной неустойчивости.

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

Анализируя бифуркационные диаграммы 1 и 2, сформулированное выше условие запишем как:

$\left.\begin{matrix}\sigma < 0 \\ \Delta > 0\end{matrix}\right.$ (условие устойчивости в точечной системе),
$\sigma^1 > 0$ (1-е условие неустойчивости в распределенной системе)
либо
$\Delta^1 < 0$ (2-е условие неустойчивости в распределенной системе)

При $\sigma < 0$ выражение $\sigma^1 = a + d - k^2(D_x + D_y)$ всегда отрицательно (т.к. $\sigma < 0$). Следовательно, для возникновения неустойчивости в распределенной системе необходимо $\Delta^1 < 0$ (седловая неустойчивость).
Таким образом, для возникновения диффузионной неустойчивости (неустойчивости Тьюринга) необходимо одновременное выполнение следующих условий:

$$a + d < 0$$
$$ad - bc > 0$$
$$k^4 D_x D_y - k^2(aD_y + dD_x) + ad - bc < 0$$

3. Понятие активатора и ингибитора. Условия на соотношения коэффициентов диффузии.

Рассмотрим случай, когда коэффициенты диффузии равны: $D_x = D_y = D$.
Получим:
$a + d < 0$
$ad - bc > 0$
$k^4 D^2 - k^2 D(a + d) + ad - bc \quad ?$
Видим, что $k^4 D^2 - k^2 D(a + d) + ad - bc > 0$, т.е. третье условие для диффузионной неустойчивости не выполняется.

Это означает, что при равных коэффициентах диффузии диффузионная неустойчивость возникнуть не может.

Поскольку выполняются неравенства $k^4 D_x D_y > 0$ и $ad - bc > 0$, то выражение $k^4 D_x D_y - k^2(aD_y + dD_x) + ad - bc$ может быть отрицательным только за счет слагаемого $-k^2(aD_y + dD_x)$.

Отсюда делаем выводы:

1) коэффициенты a и d не могут быть оба отрицательными, один из них должен быть положительным,

2) коэффициент диффузии при положительном коэффициенте должен быть меньше чем коэффициент диффузии при отрицательном коэффициенте.

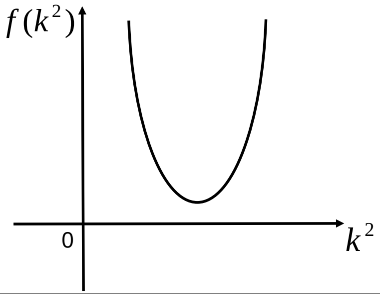
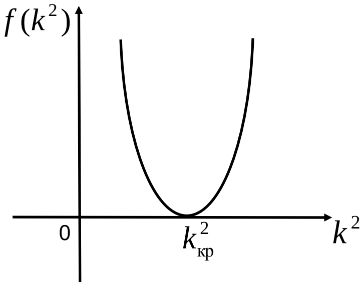
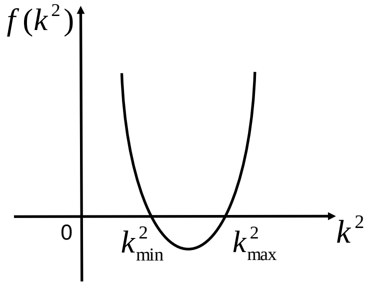
Пусть для определенности $a > 0$, а $d < 0$. Назовем вещество x – ***активатором*** (поскольку при $a > 0$ увеличение x будет приводить к увеличению воспроизводства самого себя, $a \cdot x$ является автокаталитический членом), а вещество y – ***ингибитором***.

Таким образом, необходимым (но не достаточным) условием возникновения диффузионной неустойчивости является условие, при котором коэффициент диффузии активатора меньше коэффициента диффузии ингибитора.

4. Вывод соотношений для коэффициентов диффузии и волнового числа, при которых возникают диссипативные структуры.

Выражение $f(k^2) = k^4 D_x D_y - k^2(aD_y + dD_x) + \Delta$, где $\Delta = ad - bc$, описывается параболой, ветви которой направлены вверх. Для возникновения неустойчивости необходимо, чтобы существовали значения $f(k^2) < 0$.

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

$Dis < 0$	$Dis = 0$	$Dis > 0$
		
Вся парабола лежит в положительной области. Распределенная система устойчива. Диффузионная неустойчивость не возникает.	Существует критическое (бифуркационное) значение $k^2_{кр}$, при котором возникает переход от устойчивого состояния в неустойчивое.	Часть параболы лежит в отрицательной области. Диффузионная неустойчивость возникает в интервале $k^2_{\min} < k^2 < k^2_{\max}$.
	Значение $k^2_{кр}$, при котором система теряет устойчивость, получим из выражения для вершины параболы: $k^2_{кр} = \dfrac{aD_y + dD_x}{2D_x D_y}$	$k^2_{\min}$, $k^2_{\max}$ вычисляем как корни квадратного уравнения. $k^2_{\min,\max} = \dfrac{aD_y + dD_x \pm \sqrt{(aD_y + dD_x)^2 - 4D_x D_y \Delta}}{2D_x D_y}$

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

Пусть $D_{кр} = \dfrac{D_y}{D_x}$

Перепишем уравнение в виде:

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

или

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

Корни уравнения выражаются как:

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

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

Можно показать, что для положительного $k_{кр}^2$ подходит только $D_{кр,1}$.

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

1) $a + d < 0$
$a > 0$, $d < 0$ (либо $a < 0$, $d > 0$),

2) $ad - bc > 0$,

3) отношение коэффициента диффузии ингибитора к коэффициенту диффузии активатора должно быть больше, чем $D_{кр} = \dfrac{2\Delta - ad + 2\sqrt{\Delta}\sqrt{\Delta - ad}}{a^2}$.

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

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