

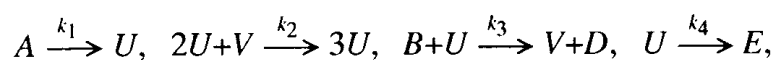
АБСОЛЮТНАЯ И КОНВЕКТИВНАЯ НЕУСТОЙЧИВОСТЬ И ОБРАЗОВАНИЕ СТРУКТУР В МОДЕЛЬНОЙ СИСТЕМЕ ТИПА РЕАКЦИЯ – ДИФФУЗИЯ С ПОТОКОМ*

С.П. Кузнецов

Для одномерной модели химической системы реакция – диффузия, в которой смесь реагентов поступает на вход реактора и движется вдоль него с постоянной скоростью, рассматривается переход от конвективной неустойчивости к абсолютной в зависимости от скорости потока, обсуждается связь между характером неустойчивости Хопфа и Тьюринга и процессами образования структур. Обсуждается возможность реализации «химического эффекта Черенкова» – возбуждения стоячей структуры при поступлении на вход реактора неравновесных концентраций, а также поведение системы вблизи порога возникновения абсолютной неустойчивости при наличии случайных флуктуаций концентраций на входе («индуцированная шумом абсолютная неустойчивость»).

В программе школы–конференции по электронике и радиофизике присутствие лекции о неустойчивости и образовании структур в химической системе типа реакция – диффузия можно оправдать намерением продемонстрировать применение к системам такого рода привычного и хорошо разработанного инструментария теории волн. Оказывается, что опыт и интуиция, накопленные при анализе электронных устройств, плазменно–пучковых неустойчивостей, других колебательно–волновых феноменов, очень помогают в изучении динамики химических систем. Как отмечал в свое время Л.И.Мандельштам, такого рода междисциплинарные контакты – «колебательная взаимопомощь» различных научных дисциплин – могут быть чрезвычайно плодотворными, способствовать как прогрессу в конкретных областях, так и разработке обобщающих представлений и концепций.

Как известно, приблизительно в 1950 году Б.П. Белоусовым была обнаружена периодически действующая химическая реакция [1]. Общее понимание и признание значения этой работы пришло значительно позднее. В середине 60–х годов И.Р. Пригожин с сотрудниками предложил простую теоретическую модель периодической химической реакции, названную брюсселятором [2,3]. Эта модель основана на следующей системе реакций:



где буквы A, B, D, E, U, V обозначают химические реагенты, числовые коэффициенты показывают количество молекул, участвующих в элементарном акте реакции, а коэффициенты k_i характеризуют скорость протекания реакций.

* Статья написана по материалам лекции, прочитанной на XI Международной школе по электронике СВЧ и радиофизике. Саратов, 2–6 марта 1999 г.

Обычно считается, что компоненты A и B присутствуют в избытке, так что изменением их концентраций за обозримый интервал времени можно пренебречь. Компоненты D и E фигурируют только как конечный продукт реакций. Основным интересом представляет, следовательно, динамика во времени концентраций компонентов U и V . Соответствующая система уравнений составляется на основании схемы реакций по простым правилам. Для каждого реагента скорость изменения концентрации определяется балансом его производства и расхода. Скорость реакции пропорциональна произведению соответствующего коэффициента k_i и концентраций, взятых с определенными показателями степени, по количеству молекул, участвующих в элементарном акте реакции. Обозначая далее концентрации теми же буквами, что и соответствующие реагенты, получаем

$$dU/dt = k_1A + k_2U^2V - k_3BU - k_4U, \quad dV/dt = -k_2U^2V + k_3BU.$$

Заменой переменных эти уравнения приводятся к безразмерному виду

$$dU/dt = A + U^2V - BU - U, \quad dV/dt = -U^2V + BU. \quad (1)$$

Величины U и V играют роль динамических переменных, а концентрации исходных реагентов, A и B , рассматриваются как параметры задачи.

Система уравнений (1) допускает решение в виде состояния равновесия, которое отвечает обращению в нуль правых частей,

$$U = A, \quad V = B/A. \quad (2)$$

Это состояние оказывается устойчивым при малых B и неустойчивым при достаточно больших [4–9]. Порог потери устойчивости

$$B_H = 1 + A^2 \quad (3)$$

ассоциируется с моментом бифуркации Андронова – Хопфа (в литературе по химической кинетике ее чаще называют просто бифуркацией Хопфа). Эта бифуркация иллюстрируется рис. 1. При $B < B_H$ имеем состояние равновесия типа устойчивого фокуса, а при $B > B_H$ появляется устойчивый предельный цикл, то есть возникает режим химических автоколебаний.

Представим себе теперь, что концентрации U и V зависят не только от времени t , но и от пространственной координаты x . Предполагается, что при наличии пространственной неоднородности имеет место диффузия, притом с разными для обоих компонентов коэффициентами, $D_U < D_V$. Модификация уравнений (1) для описания пространственно–временной динамики состоит в том, что производная по времени заменяется частной производной, и в оба уравнения

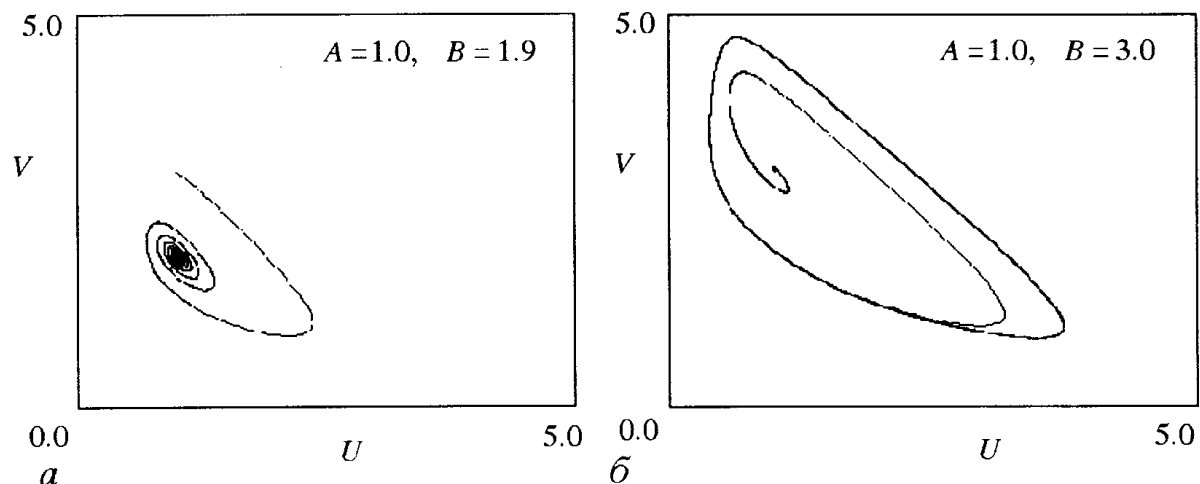


Рис. 1. Фазовый портрет системы (1) на плоскости (U, V) до (а) и после (б) бифуркации Андронова – Хопфа

добавляются члены, учитывающие диффузию, – вторые производные по пространственной координате

$$U_t = A + U^2V - BU - U + \sigma U_{xx}, \quad V_t = -U^2V + BU + V_{xx}. \quad (4)$$

Здесь $\sigma = D_U/D_V$, а индексами t и x отмечены соответствующие частные производные.

В 1952 году А.Тьюринг обосновал возможность возникновения пространственных структур из-за развития неустойчивости, связанной с разной скоростью диффузии реагентов [10]. В распределенной системе (4) могут реализоваться оба типа неустойчивости, Хопфа и Тьюринга. Условие неустойчивости Тьюринга, то есть условие потери устойчивости пространственно однородного состояния равновесия (2) относительно неоднородных возмущений, имеет вид [4–9]

$$B > B_T = (1 + A\sigma^{1/2})^2. \quad (5)$$

На рис. 2 приведены результаты численного решения системы уравнений в частных производных конечно-разностным методом для участка среды конечной длины; граничные условия заданы таким образом, что на краях концентрации U и V поддерживаются равновесными. Неустойчивость Хопфа проявляется в возникновении колебаний во времени, при этом пространственное распределение близко к однородному, за исключением краевых областей системы. Неустойчивость Тьюринга, напротив, характеризуется развитием структуры с пространственными осцилляциями и очень медленным изменением амплитуды во времени.

Модифицируем теперь рассматриваемую модель и будем считать, что реагенты непрерывно поступают в протяженное пространство взаимодействия на левом крае, как показано на рис. 3 [9]. Смесь, в которой происходит реакция, движется с постоянной скоростью и удаляется на правом крае реактора. Такая схема представляется весьма реалистичной и интересной с точки зрения практического использования и экспериментальных исследований. Уравнения, описывающие пространственно-временную динамику концентраций реагентов U и

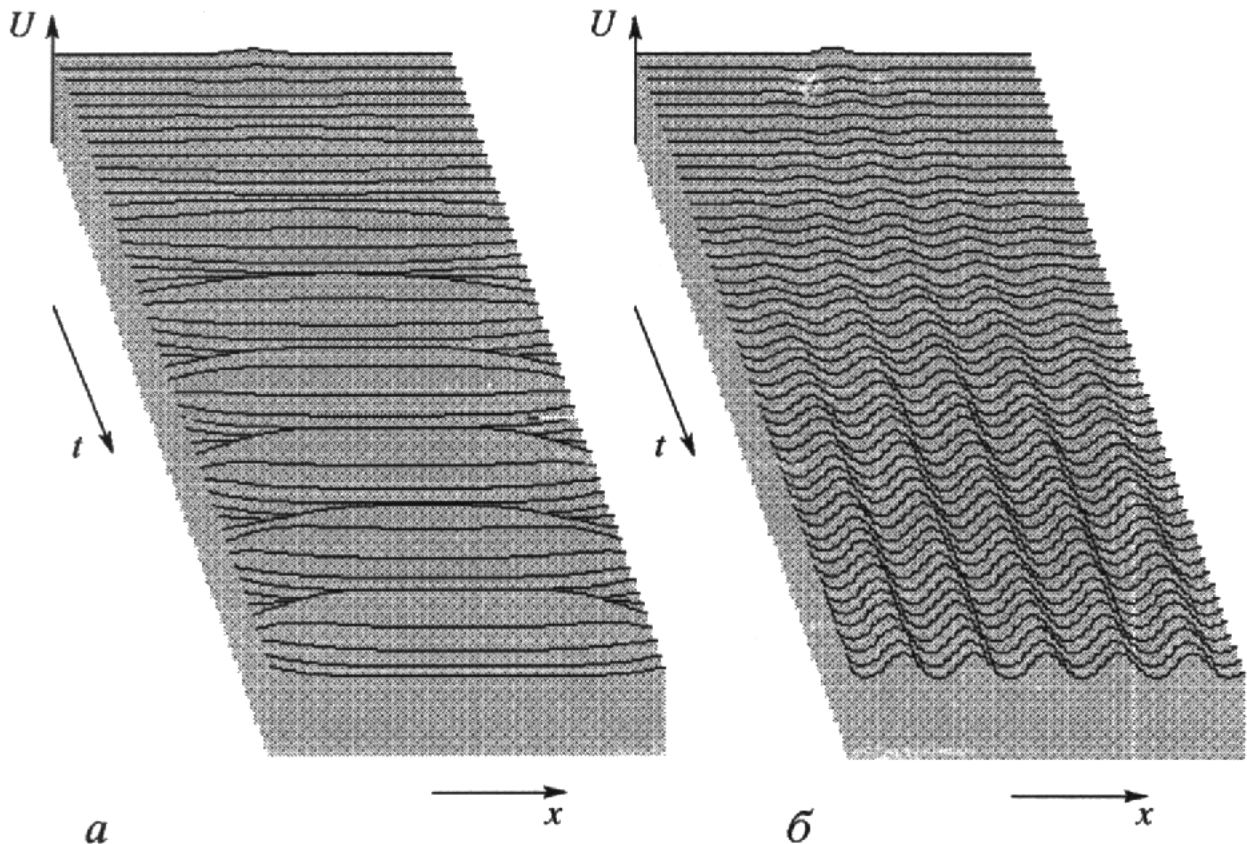


Рис. 2. Пространственно-временная эволюция возмущений в распределенной системе реакция – диффузия, описываемой системой уравнений в частных производных (4). Отношение коэффициентов диффузии $\sigma = 0.25$: а – $A = 1.0, B = 2.343$; б – $A = 1.0, B = 3.213$

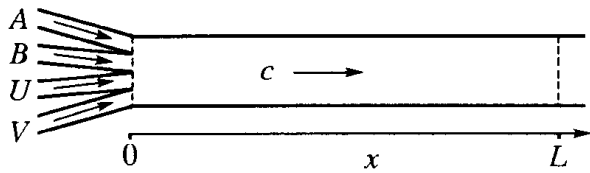


Рис. 3. Исследуемая система типа реакция – диффузия с потоком. Реагенты A (в избытке), B (в избытке), U (активатор), V (ингибитор) поступают на левом крае реактора, а их смесь движется равномерно вдоль пространства взаимодействия и удаляется на его правом крае

V , получаются из (4) добавлением членов, ответственных за перенос [9],

$$U_t + cU_x = A + U^2V - BU - U + \sigma U_{xx}, \quad V_t + cV_x = -U^2V + BU + V_{xx}, \quad (6)$$

где c – безразмерная скорость движения потока. Как мы увидим, пространственно–временная динамика и процессы образования структур в такой системе определяются тем, какой характер носит неустойчивость Хопфа и Тьюринга – абсолютный или конвективный.

Как известно, неустойчивость называется абсолютной, если в распределенной системе первоначально локализованное малое возмущение развивается таким образом, что неподвижный наблюдатель регистрирует неограниченное нарастание амплитуды в (произвольной) точке наблюдения (рис. 4, а). Неустойчивость называется конвективной, если нарастающее возмущение достаточно быстро сносится, и при наблюдении в фиксированной точке амплитуда в конце концов обращается в нуль (рис. 4, б). Анализ волновых систем на характер неустойчивости хорошо разработан и широко используется в гидродинамике, физике плазмы, электронике [11–15], однако мало применяется, хотя и известен, в контексте систем типа реакция – диффузия (см. обзор [16]).

В ситуации, которая нас интересует, граничное условие на левом крае реактора предполагает поступление компонентов U и V с постоянной скоростью

$$U|_x = U_0, \quad V|_x = V_0, \quad (7)$$

где величины U_0 и V_0 задают входные концентрации реагентов. Если не оговорено специально, они будут, как правило, считаться совпадающими с равновесными концентрациями, то есть $U_0=A$, $V_0=B/A$.

Предположим сначала, что система безгранична в пространстве, и зададимся вопросом: как будет зависеть от параметров задачи A , B , c , σ характер эволюции локализованного малого возмущения стационарного пространственно однородного состояния? Подставим в уравнения $U=A+u(x,t)$, $V=B/A+v(x,t)$ и, полагая $|u|, |v| \ll 1$, в линейном приближении получим

$$u_t + cu_x = (B-1)u + A^2v + \sigma u_{xx}, \quad v_t + cv_x = -Bu - A^2v + v_{xx}. \quad (8)$$

Пусть начальное возмущение имеет вид

$$u(x,0) = f(x), \quad v(x,0) = g(x), \quad (9)$$

где $f(x)$ и $g(x)$ предполагаются достаточно быстро убывающими при $x \rightarrow \pm\infty$.

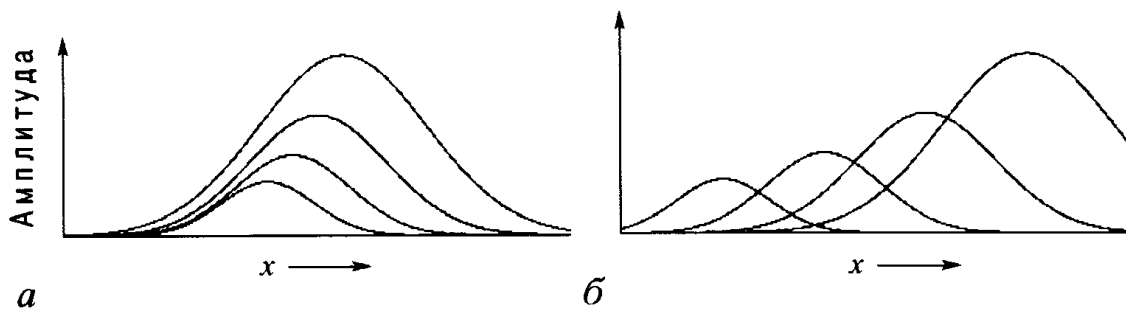


Рис. 4. Развитие локализованного возмущения пространственно однородного состояния в одномерной распределенной системе в случае абсолютной (а) и конвективной (б) неустойчивости

Следуя стандартному подходу, выполним в уравнениях (8) преобразование Лапласа по обеим независимым переменным x и t . По t используем обычное, по x – двустороннее преобразование Лапласа. Прямое и обратное преобразование имеет вид, соответственно,

$$U_{sq} = \int_0^{\infty} e^{-st} dt \int_{-\infty}^{\infty} u(x,t) e^{-qx} dx \quad \text{и} \quad u(x,t) = -1/(4\pi^2) \int_{\beta-i\infty}^{\beta+i\infty} e^{st} ds \int_{-i\infty}^{i\infty} U_{sq} e^{qx} dq, \quad (10)$$

где s и q – комплексные переменные. Во втором соотношении контур интегрирования в q -плоскости проходит по мнимой оси. В s -плоскости контур проходит параллельно мнимой оси так, чтобы все особые точки подынтегрального выражения располагались левее него. В результате преобразования уравнения принимают вид

$$(s+cq-B+1-\sigma q^2)U_{sq}-A^2V_{sq}=F(q), \quad BU_{sq}+(s+cq+A^2-q^2)V_{sq}=G(q), \quad (11)$$

где F и G – лапласовские образы функций $f(x)$ и $g(x)$. Для выяснения факта неустойчивости и ее характера достаточно рассмотреть динамику какого-либо одного компонента, например U . Разрешая уравнения (11) относительно U_{sq} и V_{sq} и производя обратное преобразование, получаем формальное решение в следующем виде:

$$u(x,t) = -1/(4\pi^2) \int_{\beta-i\infty}^{\beta+i\infty} e^{st} ds \int_{-i\infty}^{i\infty} [(s+cq+A^2-q^2)F(q)+A^2G(q)]/D(s,q) e^{qx} dq, \quad (12)$$

где

$$D(s,q) = (s+cq-B+1-\sigma q^2)(s+cq+A^2-q^2) + A^2B. \quad (13)$$

При взятии внешнего интеграла переменная q пробегает по мнимой оси. Интеграл будет содержать нарастающие во времени составляющие в том случае, если существуют такие чисто мнимые q , для которых дисперсионное уравнение

$$(s+cq-B+1-\sigma q^2)(s+cq+A^2-q^2) + A^2B = 0 \quad (14)$$

имеет корень s с положительной действительной частью. Это и есть условие неустойчивости. Из квадратного уравнения (14) находим корни

$$s_{1,2} = -cq - 1/2[1-B+A^2-\sigma q^2 - q^2 \pm [(1-B-A^2-\sigma q^2+q^2)^2-4A^2B]^{1/2}]. \quad (15)$$

Подставляя $q=ik$, можно видеть, что независимо от скорости потока c неустойчивость в области волновых чисел вблизи $k=0$ появляется при $B > B_H = 1+A^2$ и вблизи $k = \pm A^{1/2}\sigma^{-1/4}$ при $B > B_T = (1+A\sigma^{1/2})^2$, что совпадает с приведенными выше соотношениями (3) и (5).

Первый тип неустойчивости ассоциируется с бифуркацией Хопфа в уравнениях, описывающих динамику пространственно однородного решения. Как видно из (15), он проявляется в возникновении колебаний на частоте $\Omega = \text{Im}s = A$. Второй тип соответствует неустойчивости Тьюринга, которая в отсутствие потока ($c=0$) возникает на нулевой частоте. При $c \neq 0$ частота в момент возникновения неустойчивости отличается от 0 и равна $\Omega = \text{Im}s = kc$. Это можно трактовать как доплеровский сдвиг: структура Тьюринга, имеющая волновое число k , перемещается относительно наблюдателя со скоростью c , что и дает частоту $\Omega = kc$.

Чтобы ответить на вопрос, является ли неустойчивость Хопфа и Тьюринга абсолютной или конвективной, необходимо аккуратно оценить асимптотику поведения решения $u(x,t)$ при $t \rightarrow \infty$ и $x = \text{const}$.

Следуя Берсу и Бриггсу [14], внешний интеграл по s можно вычислить, смещая контур интегрирования влево насколько это возможно, так чтобы он не пересек особых точек подынтегральной функции в s -плоскости. В ситуации, когда система устойчива, s -контур удастся полностью переместить в левую полуплоскость и получить оценку $|u(x,t)| < \text{const} \cdot e^{-\beta_0 t}$, где β_0 определяется

действительной частью сингулярности, ближайшей к действительной оси в s -плоскости.

При наличии неустойчивости такой трюк также может быть успешным, если функция под знаком внешнего интеграла допускает аналитическое продолжение в s -плоскости вплоть до мнимой оси и дальше. Процедуре аналитического продолжения соответствует такая деформация q -контура во внутреннем интеграле, чтобы сохранялись неизменными правила обхода полюсов – нулей знаменателя $D(s, q)$. Если при соблюдении этих условий удастся сместить s -контур в область $s < 0$, то при наблюдении в фиксированной точке пространства будет опять-таки наблюдаться затухание возмущения во времени. Следовательно, неустойчивость может быть только конвективной. На рис. 5, а показана характерная для этого случая конфигурация контуров интегрирования в q - и s -плоскости. Пунктирные линии на левой диаграмме изображают траектории полюсов подынтегрального выражения в q -плоскости, когда величина s пробегает по контуру интегрирования в s -плоскости.

Может случиться, однако, что по мере смещения s -контура влево q -контур окажется зажатым между двумя сингулярностями, которые приходят с противоположных сторон и в некоторый момент сливаются друг с другом (рис. 5, б). Этому отвечает наличие точки ветвления функции $q(s)$ или, что то же самое, кратного корня дисперсионного уравнения относительно q . Алгебраические условия такой ситуации имеют вид

$$\begin{cases} D(s, q) = 0, \\ s'(q) = 0. \end{cases} \quad (16)$$

Если даваемый этой системой уравнений корень – точка ветвления $s = s_b = s(q_b)$ – лежит в правой полуплоскости, то, по критерию Берса и Бриггса, это

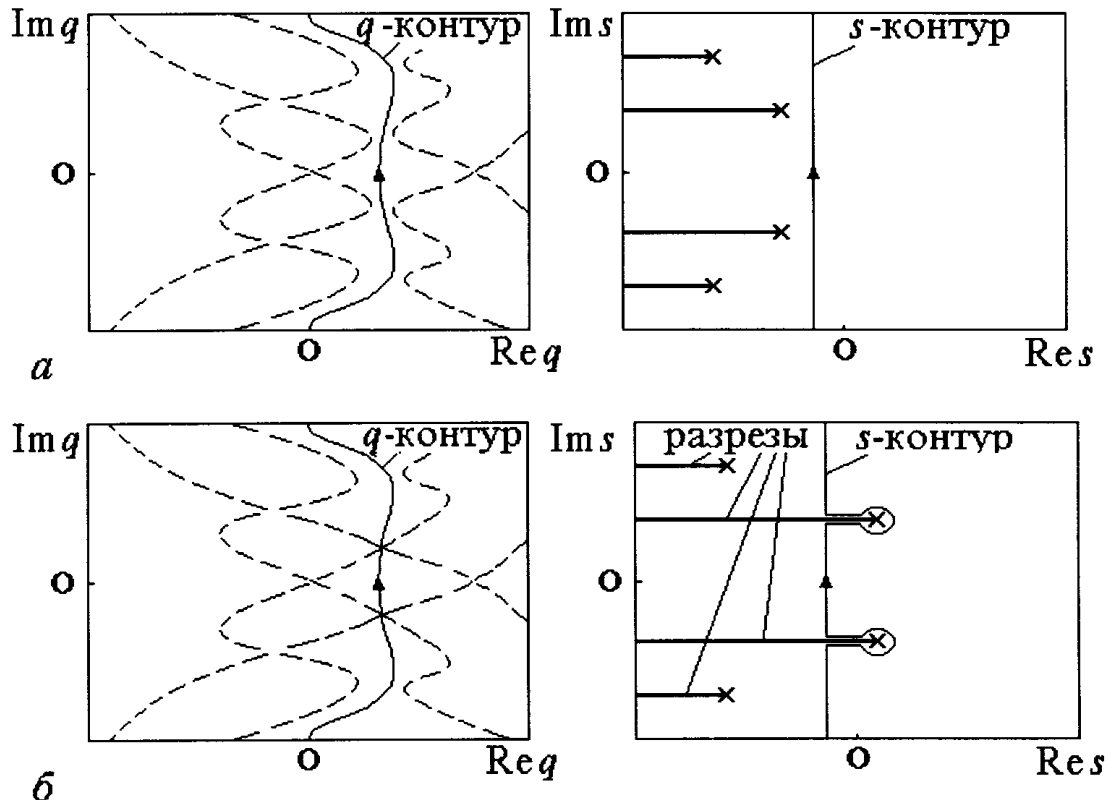


Рис. 5. Конфигурация контуров в комплексной плоскости q и s в случае отсутствия (а) и при наличии (б) абсолютной неустойчивости. Пунктирные линии в q -плоскости изображают траектории полюсов подынтегрального выражения $q(s)$, когда переменная s пробегает по соответствующему контуру интегрирования в s -плоскости. Точки ветвления показаны крестиками, а разрезы – жирными линиями

означает наличие абсолютной неустойчивости. В этом случае, смещая s -контур влево, приходится сохранить прежнее правило обхода точки ветвления s_b , как показано на правой диаграмме рис. 5, б, и часть контура, проходящая в s -плоскости вдоль берегов разреза, дает нарастающий во времени вклад в интеграл

$$u(x,t) \cong t^{-1/2} \exp(s_b t + q_b x). \quad (17)$$

Следует подчеркнуть, что за появление абсолютной неустойчивости могут отвечать не все точки ветвления, находимые из (16), а только те, которые соответствуют слиянию корней дисперсионного уравнения, приходящих при уменьшении $\text{Re } s$ с противоположных сторон от контура интегрирования в q -плоскости.

Зафиксируем σ и A и будем исследовать зависимость характера неустойчивости от двух оставшихся параметров, B и c . Следуя идее [15], мы сначала находим линии на плоскости параметров, подозреваемые в качестве границ изменения характера неустойчивости. После этого достаточно выяснить характер неустойчивости в одной представительной точке каждой из областей разбиения. Границами возникновения абсолютной неустойчивости могут служить такие линии на плоскости (B, c) , которым отвечает переход точки s_b из правой в левую полуплоскость, то есть такие ситуации, когда

$$\text{Re } s(q_b) = 0. \quad (18)$$

При $c=0$ система уравнений (16) легко решается аналитически, что позволяет найти точки ветвления, ответственные за неустойчивость Хопфа и Тьюринга

$$q_H = 0, \quad s_H = -1 + B - A^2 \pm i[4A^2 - (1 - B + A^2)^2]^{1/2} \quad (19)$$

и

$$q_T = \pm i[1 - B - A^2 + A(1 + 1/\sigma)(\sigma B)^{1/2}]/(1 - \sigma), \quad s_T = [-1 + B + \sigma A^2 - 2A(\sigma B)^{1/2}]/(1 - \sigma). \quad (20)$$

На плоскости параметров (c, B) точки $(0, B_H)$ и $(0, B_T)$ дают начало линиям Н и Т, которым отвечает наличие точки ветвления с нулевым инкрементом $\text{Re } s_b$. На рис. 6 показаны эти линии, найденные из численного решения системы уравнений (16) и (18) для $\sigma=0.25$ и нескольких значений параметра A . Буква К обозначает

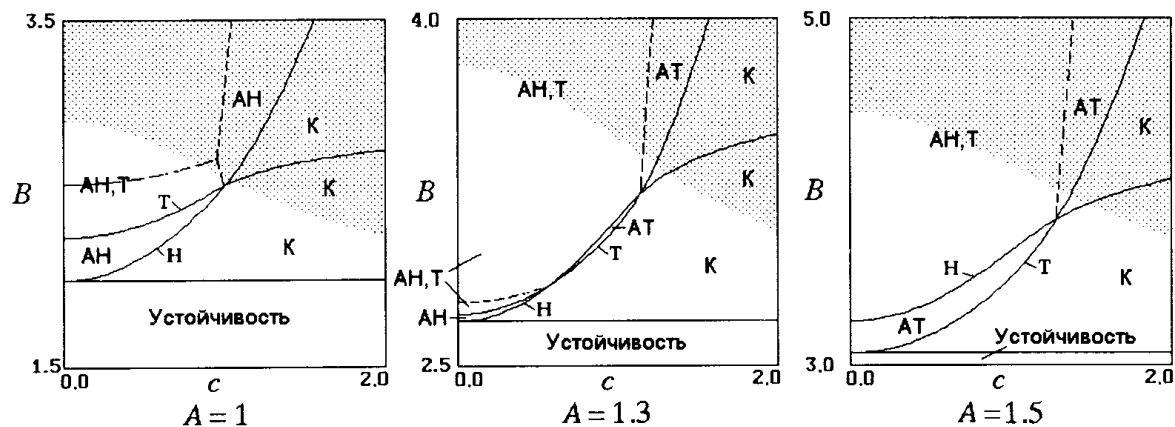


Рис. 6. Области на плоскости параметров, отвечающие различному характеру поведения малых возмущений пространственно однородного стационарного состояния системы (6) при $\sigma=0.25$ и различных значениях A). Линии Н и Т отвечают переходу точки ветвления, ассоциирующей с неустойчивостью Хопфа или Тьюринга, через мнимую ось в s -плоскости. Буквой К обозначены области конвективной неустойчивости, буквами АН и АТ – области, где абсолютной является неустойчивость, соответственно, Хопфа и Тьюринга. Пунктирная линия отвечает равенству инкрементов в точках ветвления Хопфа и Тьюринга. Штриховкой отмечена область конвективной неустойчивости на нулевой частоте, граница которой определяется условием (24)

конвективную неустойчивость, буквы АН и АТ – абсолютную неустойчивость, соответственно, Хопфа и Тьюринга. Пунктиром показаны линии, на которых неустойчивости Хопфа и Тьюринга характеризуются одинаковым по величине инкрементом Res_b . Следует отметить, что в зависимости от параметра A могут реализоваться несколько качественно различных ситуаций взаимного расположения пограничных линий. В одних случаях при увеличении параметра B раньше возникает неустойчивость Хопфа, в других – Тьюринга, при этом порядок появления обеих неустойчивостей может меняться в зависимости от скорости потока.

Интересно теперь вернуться к полной системе нелинейных уравнений в частных производных (6), описывающих пространственно–временную динамику системы брасселятор с потоком, и посмотреть, как коррелируют наблюдаемые феномены формирования и эволюции структур с результатами линейного анализа на абсолютную и конвективную неустойчивость.

Для численного решения уравнений (6) использовался неявный разностный метод второго порядка точности по временному шагу Δt и пространственному шагу Δx . Типичная величина шага порядка 0.1. Граничные условия на левом конце системы имели вид (7), причем в качестве U_0 и V_0 задавались равновесные концентрации A и B/A . При достаточно большой длине системы L и наличии потока с конечной скоростью $c > 0$ конкретный выбор условия на правом крае $x=L$ оказывается несущественным. В качестве начальных условий задавались равновесные значения концентраций U и V с малыми возмущениями

$$U(m\Delta x, 0) = A + \xi_m, \quad V(m\Delta x, 0) = B/A + \eta_m, \quad (21)$$

где ξ_m и η_m – случайные величины с нулевым средним и дисперсией порядка 0.1. На рис. 7 показаны примеры пространственно–временной динамики, наблюдаемые в различных областях пространства параметров, выявленных при анализе характера неустойчивости.

Рис. 8 показывает, как проявляется в наблюдаемом поведении системы смена характера неустойчивости с конвективного на абсолютный. В области параметров, где неустойчивость присутствует, но не является абсолютной, нарастающие по амплитуде возмущения сносятся вниз по потоку, так что через некоторое время система оказывается в равновесном пространственно однородном состоянии. Процесс выглядит как перемещение слева направо с некоторой скоростью фронта, разделяющего пространственные области наличия и отсутствия колебаний концентрации. При уменьшении скорости потока распространение фронта замедляется. Нулевая скорость фронта соответствует порогу абсолютной неустойчивости. При переходе через эту границу скорость распространения фронта меняет знак. Если теперь в начальном состоянии возмущения концентрации присутствовали вблизи правого края системы, то фронт перемещается справа налево, так что в конце концов вся система вовлекается в колебательно–волновой процесс. В зависимости от параметров системы, возникающая абсолютная неустойчивость может иметь тип Хопфа или Тьюринга, которые визуально легко различимы (сравни рис.(а) и (б)).

Отметим своеобразный характер смены режима при переходе через границу возникновения абсолютной неустойчивости в распределенной системе. Если длина системы велика, то переход от равновесного состояния к колебательному при изменении параметра сопровождается возникновением сразу конечной амплитуды колебаний. Однако переход обратим и не сопровождается гистерезисом: при обратном медленном движении по параметру колебания исчезают скачком, поскольку «бифуркация» состоит в изменении направления распространения фронта, разделяющего возмущенные и невозмущенные области среды. Основной же объем среды либо вовлечен, либо не вовлечен в колебательный процесс в зависимости от направления распространения фронта. На рис. 9 сравнивается характер зависимости амплитуды колебаний от параметра при обычной мягкой или

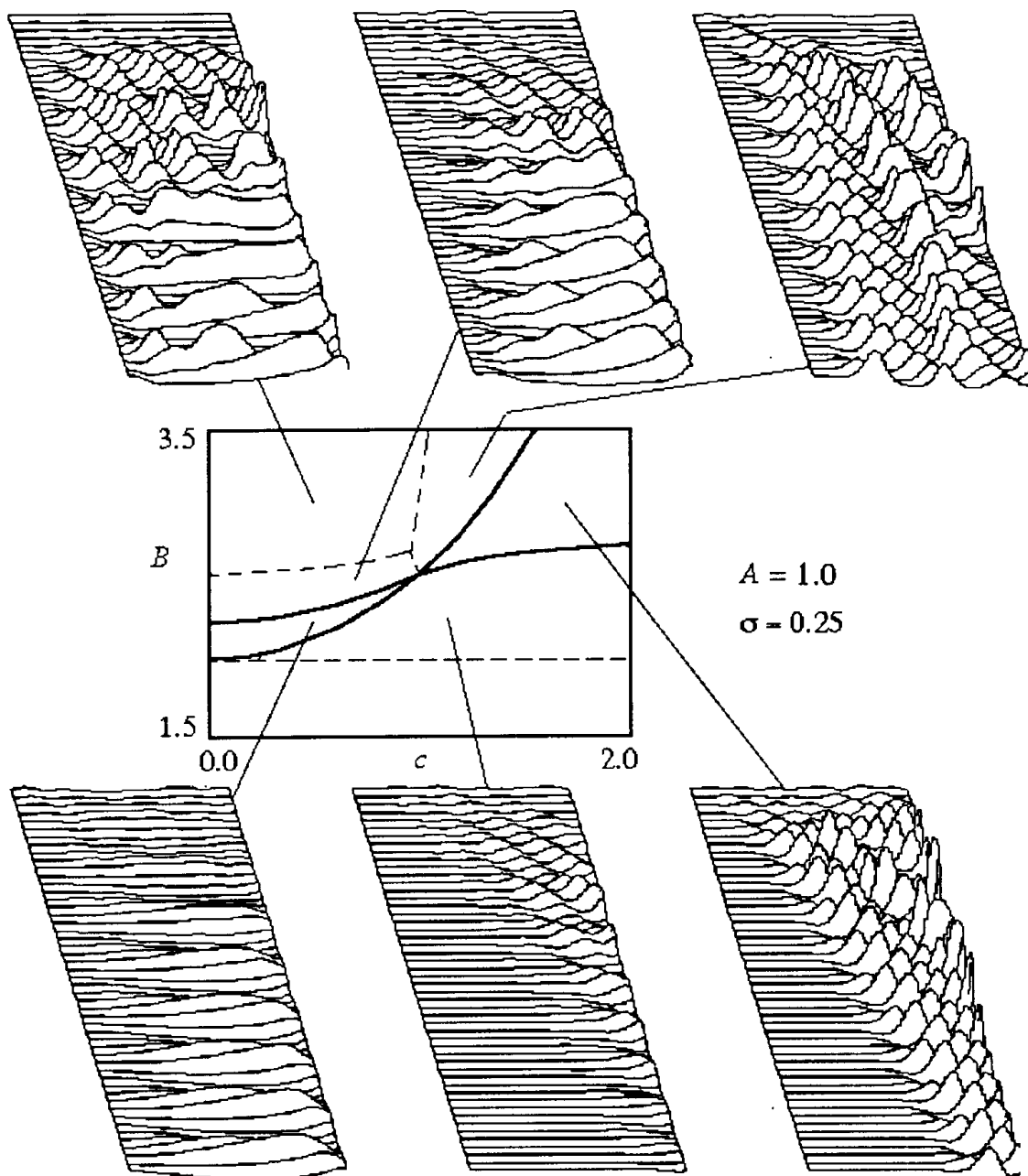


Рис. 7. Результаты численного моделирования динамики брюсселятора с потоком в случае равновесных концентраций активатора и ингибитора на входе в реактор; $\sigma=0.25$, $A=1$. Пространственно-временные диаграммы показывают динамику концентрации реагента U в различных точках на плоскости параметров (c, B) . В качестве начальных условий задавалось стационарное пространственно однородное состояние с малыми случайными возмущениями. Длина системы $L=20$

жесткой бифуркации и при обсуждаемом здесь переходе в распределенной системе.

Обратимся теперь к ситуации, когда в системе с граничным условием (7) поступающие на вход концентрации U_0 и V_0 постоянны во времени, но отличаются от равновесных значений. В этом случае может возникнуть (если оно окажется устойчивым) стационарное распределение концентраций, описываемое уравнениями (6) с исключенными временными производными

$$-\sigma d^2 U/dx^2 + cdU/dx = A + U^2V - BU - U, \quad -d^2 V/dx^2 + cdV/dx = -U^2V + BU. \quad (22)$$

В линейном приближении мы можем проанализировать поведение решения, рассматривая дисперсионное уравнение (13) при $s=0$

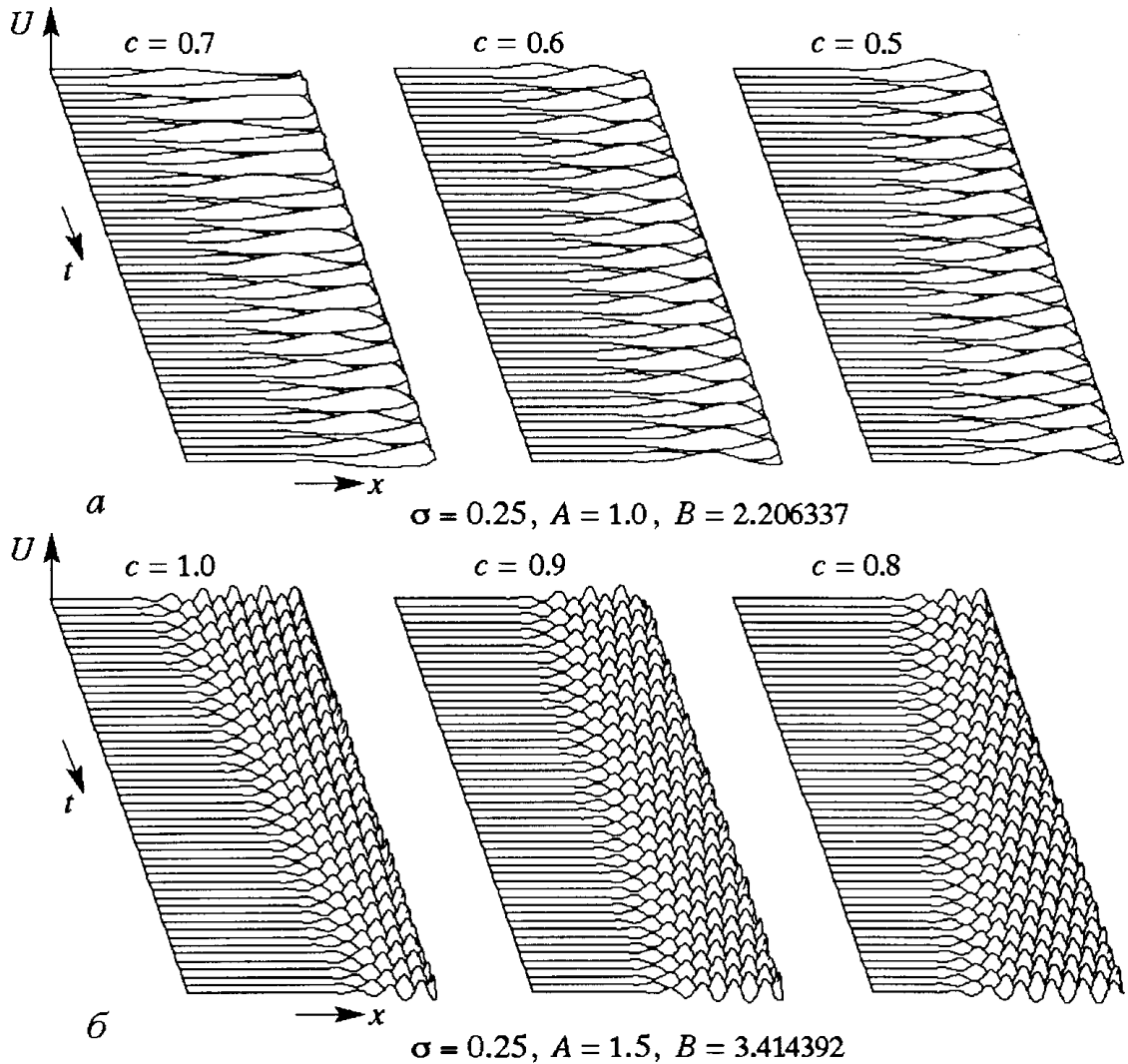


Рис. 8. Иллюстрация изменения характера динамики структур в зависимости от скорости потока вблизи порога возникновения абсолютной неустойчивости Хопфа (а) и Тьюринга (б). Пространственно-временные диаграммы иллюстрируют динамику концентрации U . При скорости больше критической неустойчивость абсолютная, фронт раздела между активной и невозбужденной областями среды смещается с течением времени вниз по потоку. При скорости меньше критической неустойчивость абсолютная, фронт раздела распространяется налево, против потока

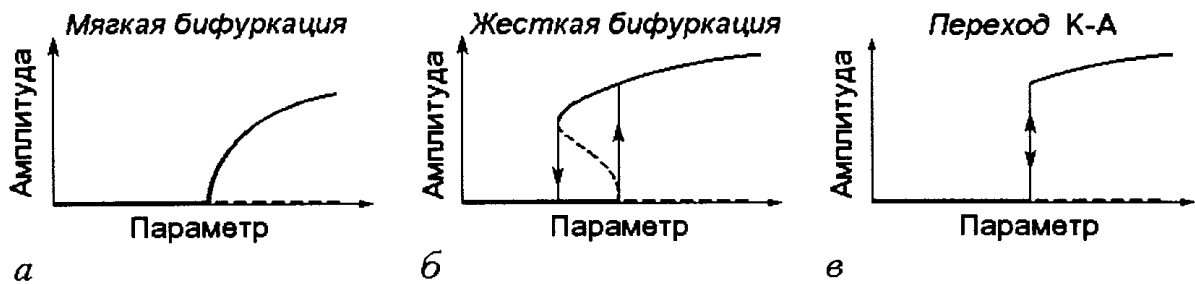


Рис. 9. Сравнение зависимости амплитуды от параметра при мягкой (а) и жесткой (б) бифуркациях в маломерных системах, и при возникновении абсолютной неустойчивости в распределенной системе в ситуации, ассоциирующей с изменением направления распространения фронта (в)

$$(cq - B + 1 - \sigma q^2)(cq + A^2 - q^2) + A^2B = 0. \quad (23)$$

При $c=0$ имеем квадратное уравнение относительно k , и легко находим все корни, два из которых имеют отрицательную и два положительную мнимую часть.

В безграничной системе с локальным стационарным возмущением первые два корня будут описывать затухающее в пространстве решение при $x > 0$, а два других – тоже затухающее, но при $x < 0$.

Будем теперь увеличивать скорость потока c . Тогда может случиться, что один из корней, ответственных за область $x > 0$, пересечет мнимую ось и перейдет в правую полуплоскость. Это будет отвечать возникновению пространственного усиления возмущений (конвективной неустойчивости) на нулевой частоте. Чтобы найти соответствующее условие критичности, подставим $q = ik$, где k действительное, и отделим в уравнении (13) действительную и мнимую часть. Из второго уравнения находим k и подставляем в первое, что дает искомое условие

$$c^2 = (1 - B + \sigma A^2)/(1 + \sigma) + A^2(1 + \sigma)/(B - 1 - A^2). \quad (24)$$

Это соотношение определяет линию на плоскости параметров (c, B) , выше которой пространственная волна концентрации становится незатухающей. На рис. 6 соответствующие этому области обозначены штриховкой.

На рис. 10 приводятся результаты численного моделирования динамики нелинейной системы при неравновесных значениях входных концентраций U и V . Ниже границы, даваемой условием (24), динамика остается в общем такой же, как при равновесных входных концентрациях; разница состоит только в том, что у левого края реактора распределение концентраций приобретает стационарный во времени и затухающий в пространстве осциллирующий хвост. При приближении к границе (24) хвост становится все более и более протяженным (декремент пространственного затухания уменьшается), и в конце концов его влияние распространяется на все пространство взаимодействия. Если значения параметров

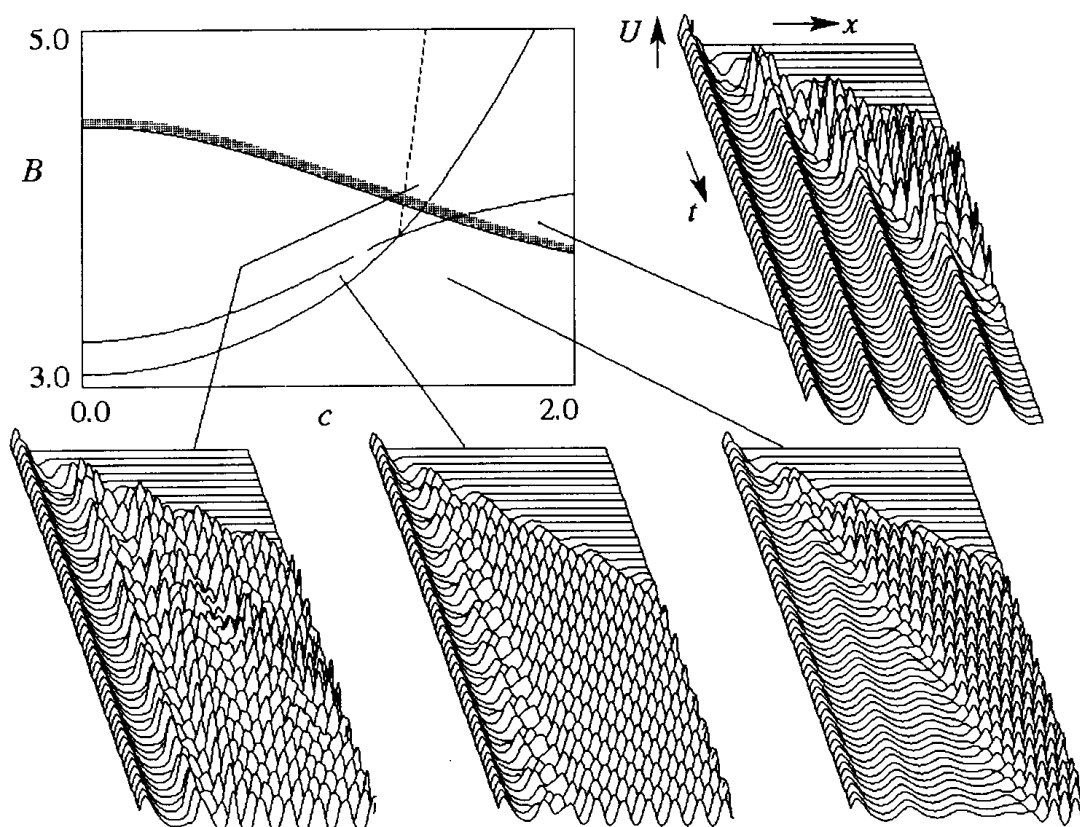


Рис. 10. Динамика брюсселятора с потоком при неравновесной входной концентрации активатора: $U|_{x=0} = A + 0.4$. Для $\sigma = 0.25$, $A = 1.5$ на плоскости параметров (c, B) воспроизведены линии смены характера неустойчивости (см. рис. 6, в) и граница области конвективной неустойчивости на нулевой частоте (24) (отмечена штриховкой). Пространственно–временные диаграммы иллюстрируют динамику концентрации активатора в нескольких точках на плоскости параметров (c, B) . Начальные условия нулевые. Длина системы $L = 40$

системы находятся за пределами области абсолютной неустойчивости, то наблюдается формирование стоячей пространственно–периодической структуры. Развитие неустойчивости, если она имеет место при данных значениях параметров, происходит теперь на фоне этой стоячей структуры. По–видимому, наличие стоячей структуры влияет на расположение границ областей неустойчивости, но это влияние трудно зафиксировать в численных экспериментах.

В системе отсчета, движущейся с потоком, феномен можно интерпретировать как «эффект Черенкова»: условием излучения волны от движущейся неоднородности является равенство фазовой скорости волны и скорости источника. Заметим, что только неустойчивость типа Хопфа приводит к такому эффекту. Действительно, стационарное в лабораторной системе отсчета волнообразное пространственное распределение концентраций будет восприниматься движущимся с потоком наблюдателем как колебания во времени на некоторой частоте. Для неустойчивости Тьюринга эта частота должна была бы равняться нулю.

Как отмечалось выше, на границе возникновения абсолютной неустойчивости в распределенной системе с потоком имеет место своеобразный переход, сочетающий свойства мягких и жестких бифуркаций (см. рис. 9). Имея такой специфический тип бифуркации, интересно задаться вопросом, как вблизи точки перехода от конвективной к абсолютной неустойчивости система будет реагировать на воздействие внешнего шума?*

Возьмем для примера набор параметров: $A=1.5$, $B=3.414392$, $\sigma=0.25$, которому отвечает критическое значение скорости потока $c=0.9$, когда неустойчивость Тьюринга превращается из конвективной в абсолютную. При $c<0.9$ фронт, разделяющий области наличия и отсутствия колебаний в потоке, движется влево, а при $c>0.9$ – направо. При критической скорости $c=0.9$ имеет место своего рода нейтральная устойчивость: фронт может пребывать в середине пространства взаимодействия в течение долгого времени, оставаясь практически неподвижным. В активной области среды, справа от фронта, имеют место колебания с периодом $T\approx 4.2$, что отвечает прохождению последовательных горбов структуры Тьюринга через точку наблюдения. Чтобы аккуратно отслеживать динамику фронта, можно использовать следующую процедуру. Выполняя численное интегрирование уравнений за каждый полный временной период T , определяем максимальную величину $U(x,t)$ для каждой пространственной точки и получаем огибающую

$$W_k(x) = \max U(x,t), \quad t \in [kT, (k+1)T]. \quad (25)$$

Теперь можно следить за положением фронта в зависимости от дискретного времени k . Его координата x_k определяется из условия $W_k(x_k)=W_0$, где W_0 – фиксированное число между нулем и максимальной амплитудой.

Введем шумовое воздействие на входе в реактор. В контексте нашего рассмотрения его конкретная природа не очень существенна. Простейший способ состоит в том, чтобы давать на каждом шаге интегрирования случайные некоррелированные добавки к входной величине U в интервале от $-\varepsilon/2$ до $\varepsilon/2$, где ε – интенсивность шума. Рис. 11 демонстрирует пространственно–временную динамику огибающей для разных значений скорости потока в присутствии шума. Тона серого цвета обозначают уровень функции W , причем активная часть среды отвечает более светлым тонам. Как и следовало ожидать, для конечного уровня шума ε в удаленной от входа части потока развиваются колебания; это имеет место для скоростей как меньших, так и больших критической.

* Вопрос о влиянии шума на динамические системы вблизи бифуркаций имеет длинную историю. В первую очередь нужно отметить классическую работу Андронова, Витта и Понтрягина [17], опубликованную в 1933 году. К настоящему времени этот предмет превратился в обширную научную дисциплину [18], хотя о воздействии шума на распределенные системы известно сравнительно немного, см. недавний обзор Кросса и Хохенберга [16].

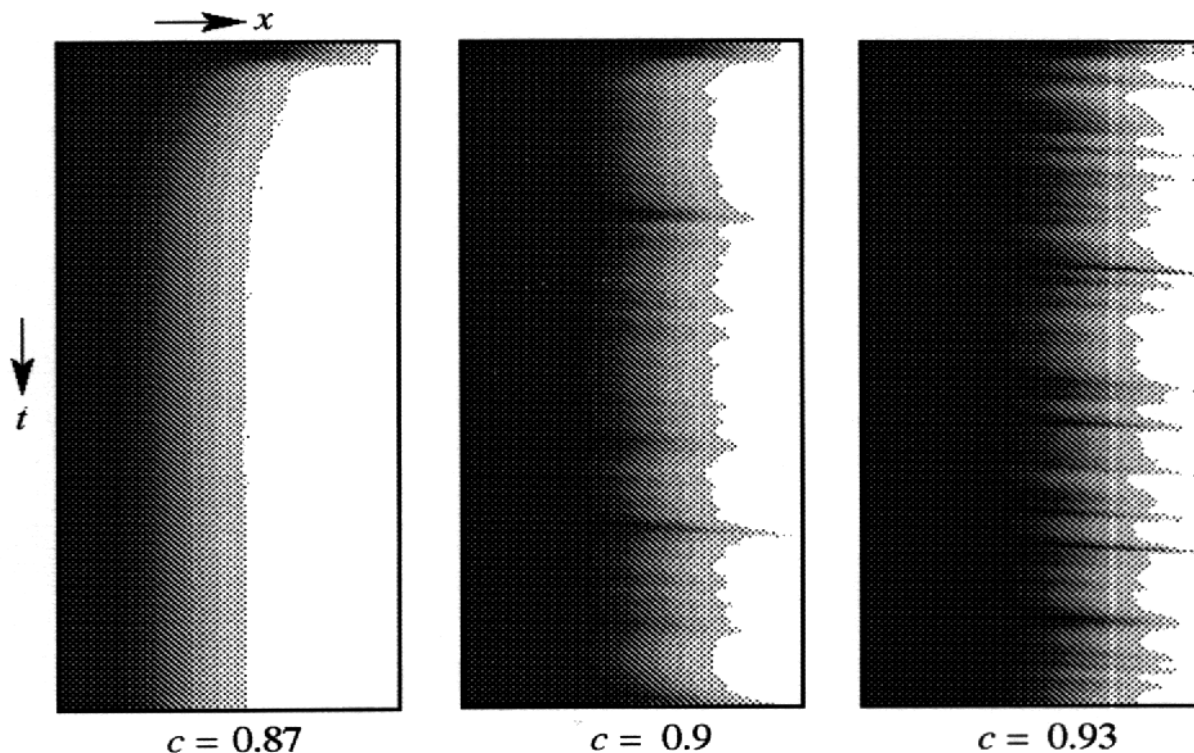


Рис. 11. Пространственно–временные диаграммы, иллюстрирующие динамику фронта в модели брюсселятора с потоком при наличии входного шума. Тона серого цвета отвечают различным значениям огибающей, определенной соотношением (25), причем светлая область отвечает активному участку среды. Значения параметров: $A=1.5$, $B=3.414392$, $\sigma=0.25$, $L=40$. Критическое значение скорости потока, отвечающее переходу к абсолютной неустойчивости в отсутствие шума, $c=0.9$

На этом этапе рассмотрения, однако, еще не ясна природа колебаний в области конвективной неустойчивости – связаны ли они просто с усилением шума или должны рассматриваться как результат некоторого индуцированного шумом перехода. Чтобы прояснить вопрос, был проведен специальный численный эксперимент. Предположим сначала, что скорость потока точно соответствует порогу абсолютной неустойчивости, и фронт располагается где-то в середине реактора. Проинтегрировав численно уравнения за один полный временной период колебаний, мы можем определить новое положение фронта и его смещение Δx_k . Далее, сдвинем все распределение концентраций U, V на расстояние Δx_k так, чтобы восстановить исходное положение фронта. Повторяя эту процедуру для последовательных временных периодов, определим «виртуальную координату фронта» как накопленный к моменту n суммарный сдвиг $X_n = \sum_{k=1}^n \Delta x_k$. В рамках такой искусственной процедуры обеспечено, что действующие на фронт флуктуации отвечают стационарному случайному процессу.

Как будет эволюционировать во времени координата X , если скорость потока точно равна критической? Можно было бы ожидать, что в силу нейтрального характера устойчивости положения фронта будет наблюдаться случайное блуждание без предпочтительного направления. Оказывается, однако, что это не так. Численные расчеты указывают на присутствие направленного движения фронта к источнику шума, то есть вверх по потоку. На рис. 12 показана зависимость виртуальной координаты фронта от времени для разных уровней шума. Более тщательное рассмотрение показывает, что скорость вызванного шумом смещения фронта пропорциональна $\epsilon^{1/2}$.

Если скорость потока немного больше критической, то неустойчивость в системе без шума конвективная, фронт движется вправо и в конце концов покинул бы пространство взаимодействия. Описанный выше численный эксперимент

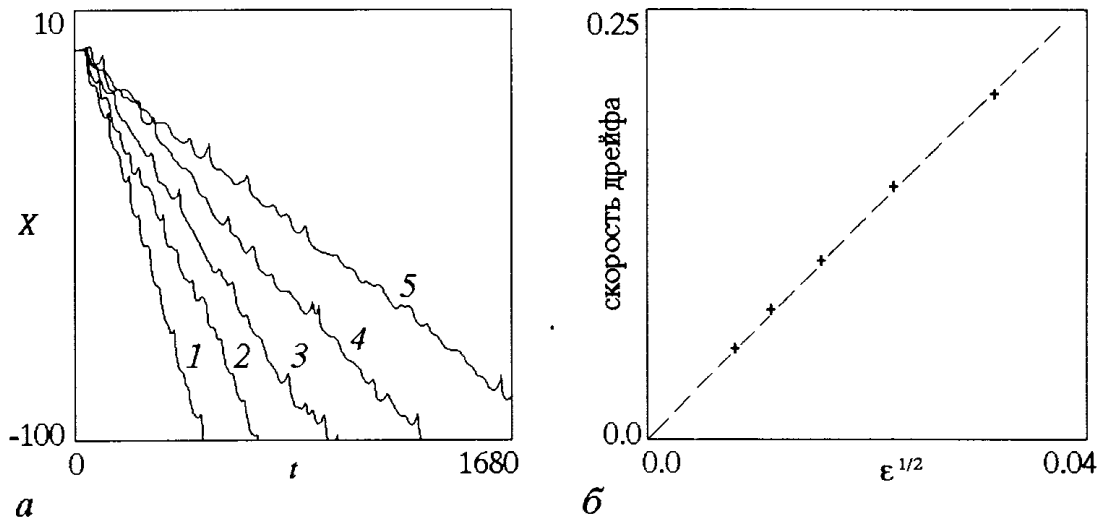


Рис. 12. Индуцированный шум дрейф фронта на пороге возникновения абсолютной неустойчивости в условиях специального численного эксперимента, описанного в тексте (а), и демонстрация линейной зависимости скорости дрейфа от $\epsilon^{1/2}$ (б)

показывает, что ситуацию распространения фронта влево, против потока, можно восстановить, если ввести на входе шум достаточной амплитуды. В этом случае реализуется пространственно-временная структура, характерная для ситуации с абсолютной неустойчивостью, так что эффект можно трактовать как *индуцированную шумом абсолютную неустойчивость* [19].

Обсудим более детально качественную картину явления. Прежде всего, отметим, что из-за присутствия неустойчивости малые флуктуации на фоне равновесного состояния усиливаются вниз по потоку. Поэтому действие шума на динамику фронта будет возрастать с увеличением расстояния от источника до фронта, и такая зависимость действительно наблюдается. Далее, на рис. 13 показана частотная зависимость коэффициента усиления малых возмущений в потоке, найденная из линейной теории при $c=0.93$ для расстояния от источника шума до точки наблюдения $L=10$. Можно видеть, что у порога абсолютной

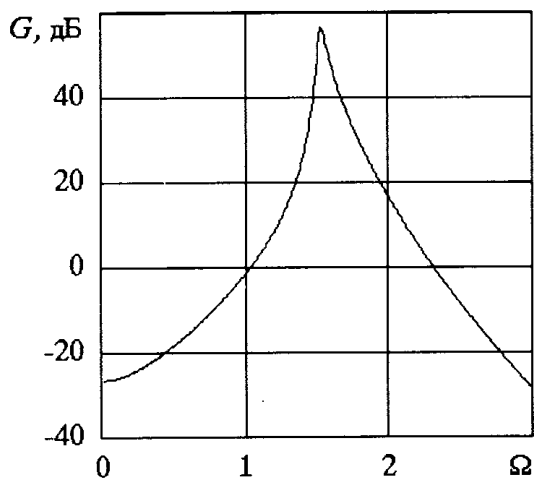


Рис. 13. Коэффициент усиления $G=20\lg(u_{вх}/u_{вых})$ в зависимости от частоты внешнего сигнала в линейной системе (8) вблизи порога возникновения абсолютной неустойчивости, $c=0.93$, остальные параметры те же, что на рис. 11. Резкий пик на графике отвечает частоте Ω_0 , на которой должна возникнуть абсолютная неустойчивость

неустойчивости усиление в потоке весьма селективно: имеется высокий пик на частоте Ω_0 (той самой, где собирается возникнуть абсолютная неустойчивость). Отсюда следует, что вдали от входа системы шум, воздействующий на фронт, имеет узкий спектр, а его корреляционная функция характеризуется наличием медленно затухающего осциллирующего хвоста.

Прежде чем обсуждать воздействие на фронт узкополосного шумового сигнала, предположим сначала, что на вход подано регулярное возмущение в виде волнового пакета с центральной частотой Ω_0 . Когда передний край пакета достигнет фронта, последний может претерпеть сдвиг вперед или назад в зависимости от фазового соотношения между волновым пакетом и собственными колебаниями среды в активной области. Далее, по мере наползания пакета, обе фазы будут подстраиваться

благодаря эффекту синхронизации и тому обстоятельству, что прибывающие возмущения служат затравкой для раскачивающихся вниз по потоку колебаний в области за фронтом. После завершения подстройки фаз воздействие волнового пакета будет способствовать смещению фронта навстречу потоку, так что для пакета достаточно большой временной протяженности итогом воздействия будет сдвиг фронта именно в этом направлении.

Вернемся теперь к ситуации с шумом. При расположении фронта достаточно далеко от края приходящие к нему флуктуации будут узкополосными вследствие селективного усиления в потоке. Их можно, следовательно, рассматривать как случайную суперпозицию волновых пакетов с узким спектром, то есть протяженных во временной области. Из предыдущего рассуждения следует, что результатом такого воздействия на фронт будет дрейф в направлении источника шума. По мере приближения к источнику интенсивность воздействующих на фронт флуктуаций будет уменьшаться также как и их время корреляции. Следовательно, средняя скорость направленного дрейфа будет уменьшаться тоже. В конце концов фронт стабилизируется, и его положение будет претерпевать лишь случайные флуктуации, как это и наблюдается на рис.11.

Следует отметить, что подобный описанному феномен индуцированного шумом перехода может встречаться и в других распределенных системах. В этой связи можно указать недавнюю работу П.С.Ланда, предложившей рассматривать возникновение гидродинамической турбулентности в системах с потоком как индуцированный шумом переход [20,21]. Представленный здесь анализ показывает, что для присутствия такого перехода существенным может быть пребывание системы вблизи порога возникновения абсолютной неустойчивости.

В заключение хочется еще раз подчеркнуть продуктивность использования теоретических методов, развитых в радиофизике и электронике, для анализа систем совершенно иной физической природы. Для модельной одномерной системы типа реакция – диффузия было показано, что присутствие потока – направленного переноса смеси реагентов – приводит к возникновению целого ряда интересных явлений. Неустойчивости типа Хопфа и Тьюринга в такой системе могут носить абсолютный или конвективный характер в зависимости от параметров задачи. В динамике нелинейной распределенной системы переход к абсолютной неустойчивости проявляется в смене направления движения фронта, разделяющего в пространстве области наличия и отсутствия колебательно-волновых возбуждений. Переход, наблюдаемый на границе абсолютной неустойчивости, обладает свойствами, не характерными для бифуркаций конечномерных систем: он жесткий (сопровождается скачком), но обратимый (не сопровождается гистерезисом). Воздействие шума на систему вблизи точки возникновения абсолютной неустойчивости приводит к очень своеобразному индуцированному шумом переходу, который может встретиться лишь в распределенных системах. Еще один характерный для распределенной системы с потоком эффект состоит в том, что при определенном соотношении параметров влияние границы может распространяться на весь объем системы. Присущие системе неустойчивости разыгрываются в этом случае на фоне структуры, сформированной за счет влияния границы. Представляется, что рассмотренная ситуация очень реалистична с точки зрения осуществления в экспериментах с системами реакция – диффузия. Можно ожидать, что специально поставленные эксперименты позволят наблюдать описанные здесь особенности динамики.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 97-02-16414) и Министерства образования Российской Федерации (грант № 97-0-8.3-88). Часть работы проделана во время пребывания автора в Датском техническом университете, и я пользуюсь случаем выразить благодарность за приглашение, помощь, поддержку профессору Эрику Мосекилде.

Библиографический список

1. Белоусов Б.П. Периодически действующая реакция и ее механизм // Автоволновые процессы в системах с диффузией. Горький: Изд. ИПФ АН СССР, 1981. С. 176.
2. Николис Г., Пригожин И.Р. Самоорганизация в неравновесных системах. М.: Мир, 1979. 512 с.
3. Трубецков Д.И. Колебания и волны для гуманитариев. Саратов: Изд-во ГосУНЦ Колледж, 1997. Глава 9.
4. Колебания и бегущие волны в химических системах / Ред. Р.Филд и М.Бургер. М.: Мир, 1988.
5. Jensen O., Pannbacker V.O., Dewel G., Borckmans P. Subcritical transitions to Turing structures // Phys.Lett. A179. 1993. P. 91.
6. Pannbacker V.O., Jensen O., Dewel G., Borckmans P., Mosekilde E. Localized structures in the chlorine dioxide-iodide-malonic acid system // Spatio-Temporal patterns / Eds P.E.Cladis and P.Palfy-Muhoray. SFI Studies in the Sciences of Complexity. Addison-Wesley. 1995. P. 469.
7. S.Ponce Dawson, Lawniczak A., Kapral R. Interaction of Turing and flow-induced chemical instabilities // J.Chem.Phys. 1994. Vol. 100, № 7. P. 5211.
8. Zimmermann W., Ogawa A., Kai S., Kawasaki K., Kawakatsu T. Wavelength Competition in Convective Systems // Europhysics Lett. 1993. Vol. 24, № 3. P. 217.
9. Kuznetsov S.P., Mosekilde E., Dewel G., Borckmans P. Absolute and convective instability in a one-dimensional Brusselator flow model // J.Chem.Phys. 1997. Vol. 106, № 18. P. 7609.
10. Turing A.M. The chemical basis of morphogenesis // Philos.Trans.Roy.Soc. 1952. Vol. 237, № 641. P. 37.
11. Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П. Физическая кинетика. М.: Наука, 1979. глава 6.
12. Рабинович М.И., Трубецков Д.И. Введение в теорию колебаний и волн. М.: Наука, 1984. Глава 7.
13. Федорченко А.М., Коцаренко Н.Я. Абсолютная и конвективная неустойчивость в плазме и твердых телах. М.: Наука, 1981. 176 с.
14. Bers A. Space-time evolution of plasma instabilities – absolute and convective // Handbook of Plasma Physics, vol.1: Basic Plasma Physics / Eds A.A.Galeev and R.N.Sudan. North-Holland Publ.Company, 1983. P. 451.
15. Кузнецов А.П. Смена характера неустойчивости в системе двух слабо связанных волн // Письма в ЖТФ. 1982. Vol. 8, № 15. С. 941.
16. Cross M.C., Hohenberg P.C. Pattern formation outside of equilibrium // Rev.Mod.Phys. 1993. Vol. 65, № 3. P. 851.
17. Понтрягин Л.С., Андронов А.А., Витт А.А. О статистическом рассмотрении динамических систем // ЖЭТФ. 1933. Vol. 3, №3. С. 165.
18. Хорстхемке В., Лефевр Р. Индуцированные шумом переходы. М.: Мир, 1987.
19. Kuznetsov S.P., Mosekilde E. Noise-induced absolute instability (To be published).
20. Landa P.S. Turbulence in nonclosed fluid flows as a noise-induced phase transition // Europhys.Lett. 1996. Vol. 36 (6). P. 401.
21. Landa P.S. Noise-induced phase transitions and turbulence // Nonlinear dynamics and Chaos (ICND-96). Book of abstracts. Saratov, 1996. P.108.

Саратовское отделение Института
радиотехники и электроники РАН,
Саратовский государственный
университет

Поступила в редакцию 28.06.99

ABSOLUTE AND CONVECTIVE INSTABILITIES AND PATTERN FORMATION IN A MODEL OF DISTRIBUTED REACTION – DIFFUSION SYSTEM WITH FLOW

S.P. Kuznetsov

One-dimensional model of chemical reaction–diffusion system is considered with a uniform flow of the mixture of the reaction components. Transitions from convective to absolute instability of Hopf and Turing type are studied, which take place under a change of the flow rate. Connection between character of the instabilities and process of pattern formation is discussed. A possibility of «chemical Cherenkov effect» is noted, that is excitation of standing wave structure while non–equilibrium constant concentrations are pumped at the input of the reactor. Behavior of the system near threshold of the absolute instability under influence of fluctuations and possibility of noise–induced absolute instability is shortly discussed.



Кузнецов Сергей Петрович родился в 1951 году. Доктор физико–математических наук, ведущий научный сотрудник Саратовского филиала Института радиотехники и электроники РАН, профессор Саратовского государственного университета. Специалист по нелинейной динамике, теории динамического хаоса и теории критических явлений при переходе к хаосу. Занимается также исследованиями в области квантового хаоса. Опубликовал свыше 100 работ в отечественной и зарубежной научной печати. Соавтор двух монографий и одной популярной книги. Автор нескольких оригинальных учебных курсов, прочитанных им в разные годы на кафедрах электроники и радиофизики СГУ и в Колледже прикладных наук СГУ. Соросовский доцент (1998). Член американского физического общества. E–mail: kuz@spkuz.saratov.su.