Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования «Уральский федеральный университет имени первого
Президента России Б.Н. Ельцина»
Институт естественных наук и математики
Кафедра теоретической и математической физики

На правах рукописи

Колиниченко Александр Павлович

Математическое моделирование и анализ процессов самоорганизации: тьюринговские структуры, стохастическая чувствительность, индуцированные шумами переходы

Специальность 1.2.2 —
Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ

Диссертация на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:
доктор физико-математических наук, профессор
Ряшко Лев Борисович

Екатеринбург — 2024

Оглавление

Стр.

Введение 4

1. Методы моделирования и анализа пространственных систем с диффузией 10

1.1 Диффузионная неустойчивость и условия генерации тьюринговских структур в моделях реакции-диффузии 10

1.2 Методы моделирования стохастических систем с диффузией . . . 15

1.2.1 Численное интегрирование систем стохастических уравнений параболического типа 15

1.2.2 Метод волновых коэффициентов 17

1.3 Метод функций стохастической чувствительности для тьюринговских структур 19

2. Тьюринговские структуры в модели брюсселятора с диффузией 25

2.1 Детерминированная модель брюсселятора с диффузией 26

2.2 Стохастические переходы в модели брюсселятора 31

2.3 Подавление автоколебаний в брюсселяторе с диффузией 37

2.4 Стохастическая генерация концентрационных пространственных волн в брюсселяторе 41

3. Тьюринговские структуры в модели популяционной динамики Левина–Сегеля 47

3.1 Детерминированная модель Левина–Сегеля 48

3.2 Стохастическая чувствительность структур Тьюринга в модели Левина–Сегеля 53

3.3 Дополнительные возможности техники стохастической чувствительности структур в модели Левина–Сегеля 59

4. Тьюринговские структуры в модели термохимической кинетики 75

4.1 Тьюринговские структуры и мультистабильность 76

4.2 Стохастическая динамика и переходы 81

Стр.

5. Комплексы программ 87

5.1 Анализ динамики распределенных моделей 87

5.2 Метод функций стохастической чувствительности тьюринговских структур в математических моделях реакции–диффузии 92

Заключение 96

Список литературы 99

Приложение А. Свидетельство о регистрации программы ЭВМ №2022614148 110

Приложение Б. Свидетельство о регистрации программы ЭВМ №2023663314 111

Приложение В. Свидетельство о регистрации программы ЭВМ №2024660528 112

Введение

Актуальность и степень разработанности темы исследования. Исследование систем со сложной нелинейной динамикой занимает важное место в современной науке [1—3]. Подобные системы часто встречаются как в теоретических, так и в прикладных исследованиях. Особый интерес к таким системам проявляют исследователи в области биологии [4, 5], химии [6], экологии [7—9], медицины [10] и других направлений исследования [11]. В таких системах часто наблюдают феномены, связанные с процессами самоорганизации и спонтанным возникновением качественно новых состояний.

Одним из таких процессов является формирование пространственных структур в моделях нелинейной динамики с диффузией. Феномен неустойчивости однородных состояний и появления неоднородных устойчивых структур был продемонстрирован Тьюрингом [12, 13]. В своей работе [12] он моделирует формирование зон неоднородности в замкнутом кольце живых клеток с идентичным метаболизмом, способных обмениваться веществами с соседями. Тьюринговские структуры (Turing patterns, тьюринговские паттерны) часто встречаются в биологических системах [14—18], где перемещение популяций в пространстве принципиально схоже с диффузионными переходами, подчиняющимися принципу концентраций, например, популяции растений, грибов, планктона или насекомых.

Системы с диффузионной неустойчивостью объединяет механизм активации-ингибиции [19, 20]. Один из компонентов ускоряет динамику системы, делая ее более интенсивной, такой компонент называют активатором. Другой компонент – ингибитор, наоборот, замедляет систему. Медленное распространение активатора и быстрый приток ингибитора формируют локализованную область с интенсивной динамикой и повышенной концентрацией компонентов системы, окруженную областями с низкой концентрацией. Примеры таких систем часто встречаются в экологических моделях взаимодействия биологического вида и его более мобильного естественного врага [21, 22].

Теория диффузионной неустойчивости Тьюринга получила подтверждение именно блягодаря исследованием в области химии. Впервые тьюринговские структуры были получены экспериментально при исследовании реакций Белоусова–Жаботинского и химических осцилляторов [23, 24]. В лабораторных условиях такие структуры удается наблюдать во время сложных реакций в гелевых пленках [25, 26]. Такие практические примеры подтверждают теоретические исследования о возможности предсказывать и управлять процессом формирования пространственных структур. В живой и неживой природе достаточно примеров упорядоченных и повторяющихся узоров [27], в частности в окраске животных [28, 29], которая формируется неоднородным распределением пигментов [30].

Из недавних результатов в исследовании тьюринговских структур в моделях с диффузией выделяется изучение подавления автоколебаний [31, 32] и появление локализованных структур [33, 34]. Динамика систем реакции-диффузии при взаимодействии бифуркации Андронова–Хопфа [35] и неустойчивости Тьюринга порождает класс состояний-химер (chimera state) [36], характеризуемых разделением пространственного домена на зоны: в одной части наблюдается устойчивая структура, в другой – гомогенные автоколебания [37—39].

Наблюдение за системами с диффузией в реальном мире часто бывает затруднительно. В одних случаях масштабы области, связанной с системой, могут быть очень велики или же наоборот крайне малы. В других случаях процессы, связанные с формированием тьюринговских структур, происходят медленно. Воспроизвести модель экспериментально может быть затратно с точки зрения ресурсов и времени, в то же время далеко не каждую систему можно воссоздать в лабораторных условиях. В нелинейной динамике часто используется аппарат математического моделирования и численных методов [40, 41].

При моделировании нелинейных процессов с непрерывным временем используют аппарат дифференциальных уравнений. При исследовании пространственной самоорганизации отправной точкой, как правило, становится некоторая локальная (точечная) модель без пространственных переменных. В таких моделях объектами исследования и наблюдения становятся фазовые траектории и аттракторы, например, точки покоя и предельные циклы. В более сложных моделях наблюдают хаос и странные аттракторы. Целью параметрического анализа таких систем является изучение устойчивости аттракторов, бифуркаций и катастроф. Для моделирования локальных систем существует множество численных методов, например методы Рунге–Кутты. Более того, готовые и оптимизированные программные реализации существуют в прикладном пакете `MatLab` и на языке `python` [42, 43].

Обладая знанием о динамике локальной системы, переходят к анализу пространственных моделей, заданных системами уравнений в частных производных, в частности, уравнениями параболического типа.

В исследованиях систем нелинейной динамики отдельное внимание уделено воздействию случайных возмущений. Принято считать, что случайный шум вносит в систему беспорядок и дестабилизирует установившийся режим [44]. Однако, шумы могут играть конструктивную и организующую роль [45, 46]. Явления, невозможные в детерминированных моделях без шума, в реальности происходят именно благодаря ему [47—49]. Феномены, связанные с формированием тьюринговских структур – не исключение. Так, влияние шумов способствует их возникновению, несмотря на то, что в детерминированных моделях их появление исключено [50]. Конструктивную роль случайных возмущений подтверждает и явление стохастического резонанса – структуры становятся более выраженными при большей интенсивности возмущений [51]. Наконец, шумы влияют на сам процесс формирования тьюринговских структур и переходов от одной структуры к другой [52]. Так, резкий процесс перехода в детерминированной системе может существенно смягчиться в соответствующей стохастической модели [53].

Математическое моделирование процессов самоорганизации в динамических системах – актуальная задача современной математики, объединяющая в себе как классические методы так и современные компьютерные науки. Разработка эффективных и точных методов описания, моделирования, анализа и прогноза моделей нелинейной стохастической динамики важна как с точки зрения математических исследований, так и для исследования возможностей ЭВМ и вычислительных алгоритмов [54].

Целью данной диссертационной работы ставится математическое моделирование и анализ стохастических феноменов в пространственных моделях с диффузией, исследование вызываемых шумами деформаций тьюринговских структур и переходов между ними.

Для достижения поставленной цели определены следующие **задачи** диссертационного исследования:

1. Разработать методы математического моделирования и стохастического анализа пространственных структур в процессах с диффузией;

2. Исследовать мультистабильность и разнообразие тьюринговских структур в моделях нелинейной динамики: модели брюсселятора, модели термохимической кинетики Уппала–Рэя и модели динамики популяций Левина–Сегеля;
3. Исследовать феномен стохастических переходов, провести анализ стохастической чувствительности тьюринговских структур с помощью статистических и аналитических методов;
4. Разработать, протестировать и применить комплексы программ для исследования стохастических феноменов в пространственных моделях с диффузией.

Методология и методы диссертационного исследования. В основе диссертационного исследования лежат методы численного моделирования нелинейных динамических систем, описанных дифференциальными уравнениями в частных производных. Для анализа стохастических феноменов использован метод функций стохастической чувствительности, разработанный для систем стохастических уравнений с частными производными. Также применены технологии хранения результатов численных экспериментов и статистические методы их обработки.

Положения, выносимые на защиту:

1. Разработаны и опробированы математические методы анализа стохастических феноменов в нелинейных динамических моделях с диффузией.
2. Развит аналитический аппарат исследования вероятностных феноменов в пространственно-распределенных моделях, основанный на методе функций стохастической чувствительности.
3. Проведено комплексное исследование стохастической динамики нелинейных моделей с диффузией, в том числе стохастического брюсселятора, модели Левина–Сегеля динамики популяций и модели Уппала–Рэя термохимической кинетики. В ходе исследований применены разработанные численные, статистические и аналитические методы.
4. Разработаны проблемно-ориентированные программные комплексы для выполнения численных экспериментов в стохастических нелинейных моделях с диффузией.

Научная новизна. Проведенный анализ моделей нелинейной динамики с диффузией позволил детально исследовать диффузионную неустойчивость, генерацию тьюринговских структур и их разнообразие. Для стохастических моделей исследованы индуцированные шумом явления – переходы между сосуществующими структурами, подавление автоколебаний и генерация структур в зоне диффузионной устойчивости. Разработан аналитический метод стохастической чувствительности тьюринговских структур. С помощью этого метода впервые проведен параметрический анализ стохастических переходов между сосуществующими пространственными структурами. Предложенные методы и алгоритмы реализованы в программных комплексах, позволяющих проводить аналитические и численные исследования стохастических явлений в нелинейных моделях с диффузией.

Теоретическая и практическая значимость. Научная ценность заключается в разработке конструктивных алгоритмов статистического анализа вызываемой шумами генерации тьюринговских структур и переходов между ними. Практическую ценность представляет применение предложенных методов в исследовании феномена диффузионной неустойчивости в стохастических моделях популяционной динамики и термохимической кинетики. Отдельную практическую ценность представляют созданные в рамках исследований программные комплексы.

Достоверность полученных результатов. Достоверность результатов исследования обусловлена строгостью используемых математических теорий и строгим соблюдением условий применения численных методов. Теоретические результаты подтверждаются прямым моделированием и данными численных экспериментов. Предложенные методы и комплексы программ были протестированы на нескольких разных математических моделях из различных предметных областей.

Личный вклад автора. Основные результаты работы, а именно исследование стохастических явлений в моделях нелинейной динамики с диффузией, программная реализация численных методов моделирования и алгоритмов анализа, тестирование программных комплексов, а также визуализация результатов проводились автором лично. Формулирование целей и выбор методики исследования, постановка задач диссертационной работы и защищаемых положений выполнены совместно с научным руководителем. В совместных работах [55—62] автору диссертации принадлежит проведение численных экспериментов, анализ и обработка результатов вычислений, а также подготовка материалов к публикации, а Ряшко Л. Б., Башкирцевой И. А. и Писарчику

А. Н. принадлежат выбор моделей и идеи возможных подходов и методов исследований.

Апробация результатов. Основные результаты работы были представлены в виде устных и стендовых докладов на 19 международных и всероссийских конференциях, в том числе: 49-ая, 50-ая, 51-ая, 52-ая, 53-ая, 54-ая, 55-ая и 56-ая Международная (Всероссийская) молодежная школа-конференция «Современные проблемы математики и ее приложений» (Екатеринбург 2018–2025), 6-ая, 7-ая, 8-ая, 9-ая и 10-ая Международная молодежная научная конференция Физика. Технологии. Инновации (Екатеринбург 2018–2023), 5-ая международная конференция-школа для молодых ученых «Динамика, бифуркации и странные аттракторы» (Нижний Новгород 2018), 25-ая, 28-ая и 30-ая Международная конференция «Математика. Компьютер. Образование» (Дубна 2018; Пущино 2021, 2023), 11-ая Всероссийская междисциплинарная молодежная научная конференция «Информационная школа молодого ученого» (Екатеринбург 2023), Международная конференция «Динамические системы: устойчивость, управление, дифференциальные игры» (Екатеринбург 2024).

Публикации. Основные результаты по теме диссертации изложены в 15 научных работах [55—69], в том числе 14 опубликованы в рецензируемых научных изданиях, входящих в международные базы цитирования Scopus и Web of Science. Зарегистрированы 3 комплекса программ для ЭВМ.

Объем и структура работы. Диссертация состоит из введения, 5 глав, заключения и 3 приложений. Полный объём диссертации составляет 112 страниц, включая 60 рисунков и 4 таблицы. Список литературы содержит 118 наименований.

Глава 1. Методы моделирования и анализа пространственных структур в системах с диффузией

В данной главе описаны теоретические основы анализа диффузионной неустойчивости в моделях реакции–диффузии. Предложены методы фиксирования процесса генерации тьюринговских структур и распознавания их особенностей. Рассмотрены численные методы и схемы интегрирования, применимые к моделированию процессов, связанных с формированием тьюринговских структур. Предложен метод оценки стохастической чувствительности и описания распределения случайных состояний вокруг пространственных структур-аттракторов.

1.1 Диффузионная неустойчивость и условия генерации тьюринговских структур в моделях реакции-диффузии

Рассмотрим пространственно распределенную двухкомпонентную модель реакции-диффузии, заданную системой уравнений в частных производных (1.1.1):

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= f(u,v) + D_u \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \\ \frac{\partial v}{\partial t} &= g(u,v) + D_v \frac{\partial^2 v}{\partial x^2}, \end{aligned} \tag{1.1.1}$$

где пространственная переменная x изменяется на отрезке $[0, L]$. В качестве граничных условий для решений $u(t,\ x)$, $v(t,\ x)$ взяты условия непроницаемости границ (1.1.2).

$$\frac{\partial u}{\partial x}(t,0) = \frac{\partial u}{\partial x}(t,L) = \frac{\partial v}{\partial x}(t,0) = \frac{\partial v}{\partial x}(t,L) = 0. \tag{1.1.2}$$

Положим, что у системы (1.1.1) при $D_u = D_v = 0$ имеется равновесие $(\bar{u}, \bar{v})$. В точечных системах нелинейной динамики такое равновесие является одним из центральных объектов исследования [70, 71], в частности, рассматривается устойчивость такого равновесия, строятся бассейны притяжения и бифуркационные диаграммы.

В пространственной системе (1.1.1), (1.1.2) при $D_u > 0$ и $D_v > 0$ аналогом точечного равновесия является пространственно однородное равновесие $\bar{u}(t,x) = \bar{u}, \bar{v}(t,x) = \bar{v}$. Как и в случае с точечным равновесием, можно рассматривать его устойчивость и неустойчивость. Для стандартного [72] анализа устойчивости однородного равновесия используется линеаризованная система (1.1.3):

$$\begin{aligned} \frac{\partial \xi}{\partial t} &= m_{11}\xi + m_{12}\eta + D_\xi \frac{\partial^2 \xi}{\partial x^2}, \\ \frac{\partial \eta}{\partial t} &= m_{21}\xi + m_{22}\eta + D_\eta \frac{\partial^2 \eta}{\partial x^2}, \end{aligned} \tag{1.1.3}$$

где

$$D_\xi = D_u,\ D_\eta = D_v,$$

$$m_{11} = \frac{\partial f}{\partial u}(\bar{u}, \bar{v}),\ m_{12} = \frac{\partial f}{\partial v}(\bar{u}, \bar{v}),\ m_{21} = \frac{\partial g}{\partial u}(\bar{u}, \bar{v}),\ m_{22} = \frac{\partial g}{\partial v}(\bar{u}, \bar{v}).$$

Уравнения системы (1.1.3) являются уравнениями параболического типа, ее решение является линейной комбинацией, формально бесконечной, собственных функций, имеющих общий вид (1.1.4):

$$\begin{aligned} \xi_\kappa(t,x) &= A_\kappa e^{\lambda_\kappa t} e^{i\kappa x}, \\ \eta_\kappa(t,x) &= B_\kappa e^{\lambda_\kappa t} e^{i\kappa x}. \end{aligned} \tag{1.1.4}$$

Здесь λ_κ - собственное значение, отвечающее за временную динамику линеаризованной системы (1.1.3). Волновое число $\kappa \neq 0$ соответствует пространственной частотности одной из собственных функций системы. Подстановка собственной функции для некоторого фиксированного κ в систему (1.1.3) дает линейную систему алгебраических уравнений (1.1.5), относительно неопределенных коэффициентов A_κ и B_κ

$$\begin{aligned} (m_{11} - \lambda_\kappa - D_u\kappa^2)A_\kappa + m_{12}B_\kappa &= 0, \\ m_{21}A_\kappa + (m_{22} - \lambda_\kappa - D_v\kappa^2)B_\kappa &= 0. \end{aligned} \tag{1.1.5}$$

Нетривиальное решение этой системы для некоторого волнового числа κ существует, если ее определитель равен нулю. Исходя из этого требования, можно составить дисперсионное уравнение относительно собственного значения λ_κ:

$$\begin{gathered}\lambda^2 - \sigma(\kappa^2)\lambda + \Delta(\kappa^2) = 0,\\ \sigma(\kappa^2) = m_{11} + m_{22} - \kappa^2(D_u + D_v),\\ \Delta(\kappa^2) = \kappa^4 D_u D_v - \kappa^2(m_{11}D_v + m_{22}D_u) + m_{11}m_{22} - m_{12}m_{21}.\end{gathered} \tag{1.1.6}$$

Первое условие для генерации тьюринговских структур – устойчивость равновесия $(\bar{u},\ \bar{v})$ системы без диффузии. Подстановка $D_u = 0$ и $D_v = 0$, в дисперсионное уравнение (1.1.6) даст характеристическое уравнение системы первого приближения (1.1.3) без диффузии. В таком случае равновесие будет устойчиво, если действительные части корней этого уравнения отрицательны. Отсюда следуют два условия (1.1.7):

$$\begin{gathered}m_{11} + m_{22} < 0,\\ m_{11}m_{22} - m_{12}m_{21} > 0.\end{gathered} \tag{1.1.7}$$

Второе условие генерации тьюринговских структур – пространственная неустойчивость однородного равновесия $\bar{u}(t, x) = \bar{u}, \bar{v}(t, x) = \bar{v}$ в системе (1.1.3), когда коэффициенты диффузии не равны нулю. Для этого требуется чтобы действительные части корней дисперсионного уравнения (1.1.6) были положительными для некоторого набора волновых чисел κ. Это возможно в двух случаях: $\sigma(\kappa^2) > 0$ либо $\Delta(\kappa^2) < 0$. Можно обратить внимание, что в силу условий (1.1.7) первый случай невозможен. Из второго случая можно получить необходимое, но не достаточное условие (1.1.8):

$$m_{11}D_v + m_{22}D_u > 0. \tag{1.1.8}$$

Наконец, для того чтобы $\Delta(\kappa^2)$ было отрицательно на некотором интервале κ, достаточно чтобы его минимальное значение было отрицательным. Дифференцируя $\Delta(\kappa^2)$ по κ^2 можно получить выражение для минимального значения Δ_{min}, из которого следует неравенство (1.1.9):

$$(D_v m_{11} + D_u m_{22})^2 - 4D_u D_v(m_{11}m_{22} - m_{12}m_{21}) > 0. \tag{1.1.9}$$

Это неравенство, при условиях (1.1.7) и (1.1.8), задает границу бифуркации Тьюринга и параметрическую зону диффузионной неустойчивости. Можно заметить, что неравенства (1.1.8) и (1.1.9) разрешаются относительно частного от коэффициентов диффузии $\dfrac{D_u}{D_v}$. Именно оно играет ключевую роль в определении параметрической зоны генерации тьюринговских структур.

Рис. 1.1 демонстрирует связь отношения коэффициентов диффузии и действительной части корней дисперсионного уравнения (1.1.6) на примере модели брюсселятора с диффузией (1.1.10), подробно рассмотренной в главе 2.

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= a - (b+1)u + u^2 v + D_u \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \\ \frac{\partial v}{\partial t} &= bu - u^2 v + D_v \frac{\partial^2 v}{\partial x^2}. \end{aligned} \tag{1.1.10}$$

На диаграмме 1.1а сплошной прямой линией обозначена граница бифуркации Андронова–Хопфа для локальной модели. Параметры локальной модели без диффузии, a и b, подобраны таким образом, что ее равновесие устойчиво. Пунктиром обозначена граница бифуркации Тьюринга. Коэффициент диффузии D_v зафиксирован, коэффициент D_u варьируется, таким образом отношение $\frac{D_u}{D_v}$ меняется.

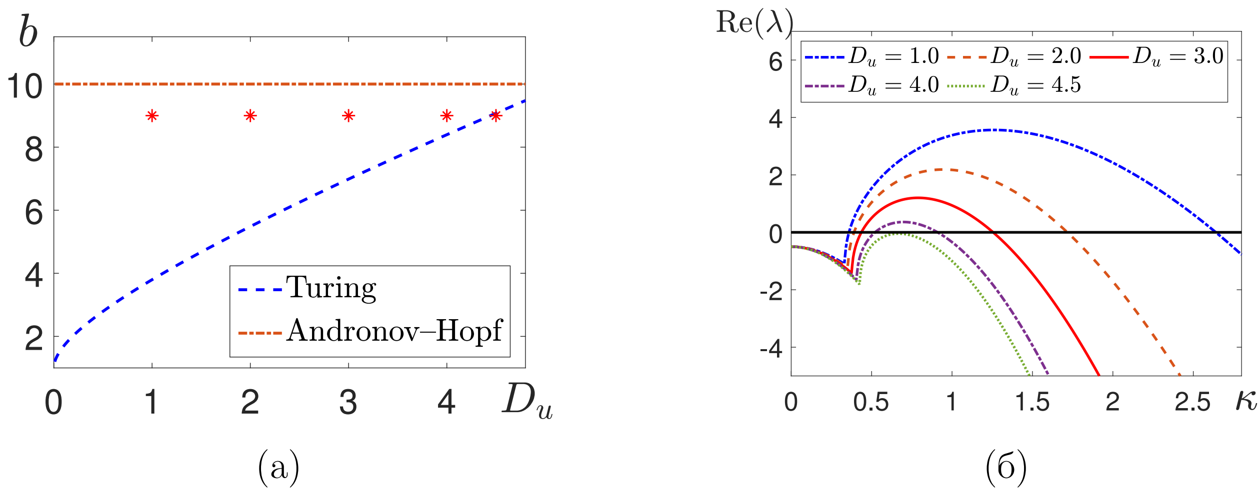


Рисунок 1.1 — Модель брюсселятора с диффузией с фиксированными параметрами $a = 3$, $D_v = 10$: а) бифуркационная диаграмма для параметров b и D_u с границами бифуркации Тьюринга и Андронова–Хопфа, б) действительная часть корней дисперсионного уравнения (1.1.6) для брюсселятора при разных значениях D_u

На диаграмме 1.1б приведены кривые действительных частей корней дисперсионного уравнения (1.1.6) в соответствие значениям, отмеченным на 1.1а. При уменьшении коэффициента D_u, диапазон волновых чисел κ, для которых $Re(\lambda_\kappa) > 0$, расширяется, что говорит о неустойчивости пространственно-однородного равновесия и возможности формирования тьюринговских структур. При увеличении D_u этот диапазон сокращается. При пересечении границы бифуркации Тьюринга $Re(\lambda_\kappa) < 0$ для любого κ, что говорит об устойчивости пространственно-однородного равновесия.

Неравенства (1.1.7), (1.1.8) и (1.1.9) выполняются в совокупности когда в паре m_{11} и m_{22} одно значение положительное, а второе отрицательное и пара m_{12} и m_{21} тоже разного знака. Это в свою очередь устанавливает отношения между m_{11}, m_{12}, m_{21} и m_{22}, характеризующие систему и вид тьюринговских структур.

Если, например, $m_{11} > 0$ и $m_{22} < 0$, то u считается активатором, а положительное значение m_{11} говорит об экспоненциальном росте переменной u близко к равновесным значениями $(\bar{u}, \bar{v})$. Переменная v является ингибитором и замедляет рост активатора. Из условий (1.1.7) и (1.1.8) следует, что интенсивность диффузии ингибитора должна быть выше чем у активатора, то есть в данном случае $D_u < D_v$. Аналогичные выводы можно провести если u и v поменять местами.

Величины m_{12} и m_{21} влияют на синхронность пространственных волн активатора и ингибитора. Так, если $m_{11} > 0$ и $m_{22} < 0$, как в предыдущем примере, то при $m_{12} < 0$ и $m_{21} > 0$ волны будут синфазными (рис. 1.2а), а в случае $m_{12} > 0$ и $m_{21} < 0$ – противофазными (рис. 1.2б).

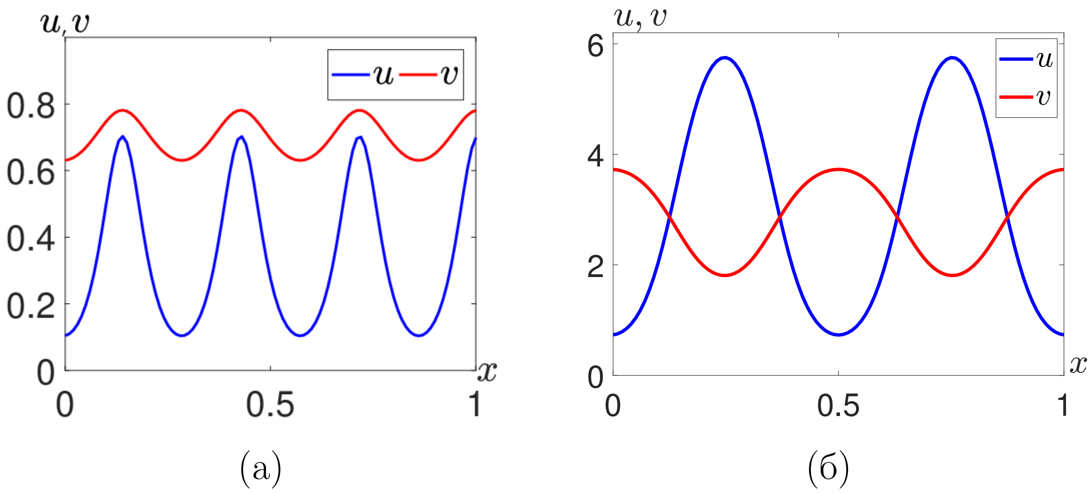


Рисунок 1.2 — Примеры тьюринговских структур в моделях с диффузией: а) структура с синфазными активатором и ингибитором, б) структура с противофазными активатором и ингибитором

1.2 Методы моделирования стохастических систем с диффузией

Важной частью исследования является выбор качественного и эффективного аппарата математического моделирования и его прикладная реализация в виде численных методов и программных комплексов. Модели нелинейной динамики заданы системами дифференциальных уравнений, чаще всего не поддающиеся аналитическим методам решения. Как следствие, решение таких систем находят численными методами, подобранными в соответствии с требованиями исследования и спецификой изучаемой модели. Другой важной задачей является выбор метода представления данных и визуализации результатов анализа. В системах без диффузии, как правило, используют фазовые портреты или временные ряды для представления временной динамики системы. Добавление пространственной переменной усложняет задачу представления данных, возникает необходимость в поиске характеристик, детально отражающих текущий процесс.

1.2.1 Численное интегрирование систем стохастических уравнений параболического типа

Рассмотрена система дифференциальных уравнений в частных производных (1.1.1) с граничными условиями (1.1.2). Пусть задана сетка $t_j = j\tau$, $x_i = ih$, где τ – шаг по времени и h – шаг по пространственной переменной x, причем $x_0 = 0$, $x_n = L$, в то же время $L = nh$. Тогда можно задать дискретизацию решения системы $u(t,x)$, $v(t,x)$ на этой сетке следующим образом: $u_{j,i} = u(t_j, x_i)$, $v_{j,i} = v(t_j, x_i)$. В таком случае аппроксимация функций $f(u,v)$ и $g(u,v)$ выглядит так: $f_{j,i} = f(u_{j,i}, v_{j,i})$, $g_{j,i} = g(u_{j,i}, v_{j,i})$. Также можно задать аппроксимацию граничных условий (1.1.2):

$$u_{j,0} = u_{j,1},\ u_{j,n-1} = u_{j,n},\ v_{j,0} = v_{j,1},\ v_{j,n-1} = v_{j,n}. \tag{1.2.1}$$

Начальное состояние системы может быть задано как случайно так и по правилам, сформулированным согласно требованиям задачи.

Для численного интегрирования системы (1.1.1), (1.1.2) использован следующий вариант численной схемы Кранка–Николсон [73, 74] (1.2.2):

$$\begin{gathered} u_{j+1,i} = u_{j,i} + \tau f_{j,i} + \frac{\tau D_u}{2h^2}\left(\Delta u_{j,i} + \Delta u_{j+1,i}\right), \\ v_{j+1,i} = v_{j,i} + \tau g_{j,i} + \frac{\tau D_v}{2h^2}\left(\Delta v_{j,i} + \Delta v_{j+1,i}\right), \\ \Delta\varphi_{j,i} = \varphi_{j,i-1} - 2\varphi_{j,i} + \varphi_{j,i+1} \end{gathered} \tag{1.2.2}$$

Из схемы (1.2.2) можно получить систему линейных алгебраических уравнений относительно $u_{j+1,i}$, $v_{j+1,i}$, в которой $2(n-1)$ уравнений и $2(n+1)$ неизвестных. После добавления аппроксимированных граничных условий (1.2.1), эту систему можно решить. В отличие от явной схемы, эта схема абсолютно устойчива, что позволяет проводить моделирование с большим шагом по времени τ без потери точности. С другой стороны, на каждом шаге необходимо решить систему линейных уравнений с трехдиагональной матрицей.

Если стоит задача о поиске структур–аттракторов системы, бывает полезно задать условие остановки. Можно, например, остановиться в момент, когда изменения между шагами становятся незначительными (меньше некоторой заданной величины ψ). Для этого на каждом шаге метода вычисляется величина изменений:

$$\psi_j = \max_{0\leqslant i\leqslant N}(|u_{j,i} - u_{j-1,i}|,\ |v_{j,i} - v_{j-1,i}|). \tag{1.2.3}$$

Как только $\psi_j < \psi$, интегрирование можно остановить, записать решение в файл и отобразить его графически.

Стохастический вариант системы (1.1.1), (1.1.2) можно представить в виде системы стохастических дифференциальных уравнений в частных производных (1.2.4):

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= f(u,v) + D_u\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \varepsilon\xi(t,x) \\ \frac{\partial v}{\partial t} &= g(u,v) + D_v\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \varepsilon\eta(t,x). \end{aligned} \tag{1.2.4}$$

Здесь случайные возмущения $\xi(t,x)$ и $\eta(t,x)$ – некоррелированные гауссовы белые шумы со свойствами $E\xi(t,x) = E\eta(t,x) = 0$, $E\xi(t,x)\xi(t',x') = \delta(t'-t)\delta(x'-x)$, $E\eta(t,x)\eta(t',x') = \delta(t'-t)\delta(x'-x)$. Граничные условия (1.1.2) остаются без изменений.

Для моделирования такой системы при интенсивности шума $\varepsilon > 0$ наряду со схемой (1.2.2) применяется аналог метода Эйлера–Маруямы (1.2.5):

$$\begin{aligned} u_{j+1,i} &= \tilde{u}_{j+1,i} + \varepsilon\sqrt{\tau}\xi_{j,i}, \\ v_{j+1,i} &= \tilde{v}_{j+1,i} + \varepsilon\sqrt{\tau}\eta_{j,i}. \end{aligned} \tag{1.2.5}$$

Здесь $\tilde{u}_{j+1,i}$ и $\tilde{v}_{j+1,i}$ получены применением к $u_{j,i}$ и $v_{j,i}$ шага численного интегрирования (1.2.2). Множители $\xi_{j,i}$ и $\eta_{j,i}$ – некоррелированные дискретизированные белые гауссовы шумы со свойствами (1.2.6):

$$\begin{gathered} \mathrm{E}\xi_{j,i} = \mathrm{E}\eta_{j,i} = 0, \\ \mathrm{E}\xi_{j,i}\xi_{k,l} = \mathrm{E}\eta_{j,i}\eta_{k,l} = \delta_{j,k}\delta_{i,l}, \\ \delta_{j,k} = 1 \text{ если } j = k, \text{ иначе } \delta_{j,k} = 0. \end{gathered} \tag{1.2.6}$$

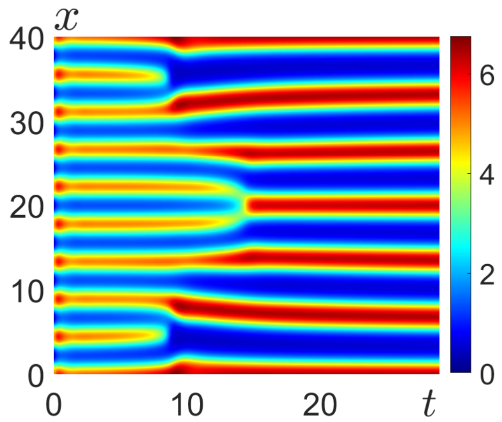
1.2.2 Метод волновых коэффициентов

Для анализа процессов генерации тьюринговских структур и других феноменов, связанных с ними, чаще всего графических данных из прямого моделирования не хватает. Графическая информация не отражает небольших изменений, которые могут сыграть ключевую роль в протекающих нелинейных процессах. Помимо этого некоторые проверки можно автоматизировать и таким образом сэкономить время и силы исследователя. Для этого нужно задать качественный и эффективный способ представления данных, с помощью которого программный код мог бы легко и быстро провести нужные проверки.

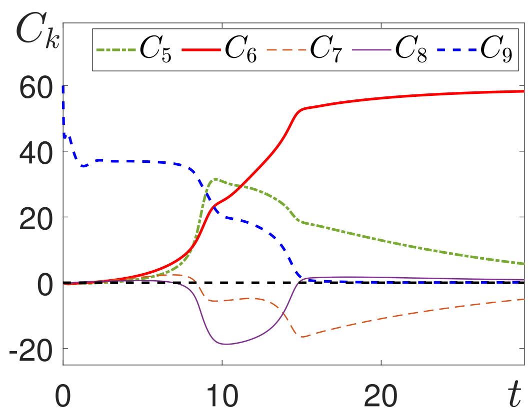
Объект исследования – волнообразная структура с определенной пространственной частотностью и фазой на левом краю пространственного интервала. При исследовании свойств периодических функций часто применяется аппарат гармонического анализа. Так, к примеру, для функции $u(t,\ x)$ можно получить набор волновых коэффициентов $C_k(t)$, который для каждой пространственной частотности k (ожидаемое количество периодов в пространственном интервале) определен по формуле (1.2.7):

$$C_k(t) = \int_0^L u(t,x) cos\left(\frac{2\pi kx}{L}\right) dx. \tag{1.2.7}$$

Аналогично волновые коэффициенты можно определить для функции $v(t, x)$. Индекс k может быть целым или полуцелым в силу граничных условий (1.1.2). Доминирующее абсолютное значение C_k в момент времени t говорит о том, что в системе в данный момент ярко выражена структура с k пиками. Пример применения этого метода к динамике брюсселятора (1.1.10) показан на рис. 1.3.



(а)



(б)

Рисунок 1.3 — Пример метода волновых коэффициентов в динамике модели брюсселятора бри $a = 3$, $b = 9$, $D_u = 2$, $D_v = 10$: а) пространственно-временная динамика функции $u(t,x)$ с изменением частотности, б) временная динамика некоторых волновых коэффициентов $C_k(t)$

Видно, что в начале процесса наблюдается волнообразная структура с девятью пиками (рис. 1.3а), чему соответствует большое абсолютное значение C_9, а остальные коэффициенты находятся около нуля (рис. 1.3б). Затем начинается череда переходов: пиков постепенно становится меньше, а дойдя до шести пиков переходы заканчиваются. На рис. 1.3б коэффициент C_9 постепенно приближается к нулю, другие C_k во время переходов удаляются от нуля. В конце этого процесса C_6 имеет наибольшее абсолютное значение, в то время как остальные C_k стремятся к нулю, в том числе и C_9. Данный пример иллюстрирует ценность этого подхода к выявлению смены модальности состояния системы, особенно при изучении стохастических переходов между структурами–аттракторами.

Получение набора C_k может быть легко включено в программный код алгоритма интегрирования. С его помощью можно задать условие остановки численного метода, зафиксировать количество, моменты и длительность стохастических переходов.

1.3 Метод функций стохастической чувствительности для тьюринговских структур

Индуцированные шумами переходы часто наблюдаются в стохастических моделях нелинейной динамики. Теория стохастической чувствительности была изначально построена для систем, моделями которых являются системы обыкновенных дифференциальных уравнений. Метод функций стохастической чувствительности [75], предложенный в работах Ряшко Л. Б. и Башкирцевой И. А., качественно описывает доверительные области для аттракторов в таких системах, а именно точек равновесия и предельных циклов [76]. Стохастические переходы от одного аттрактора к другому связаны с их бассейнами притяжения: состояние системы под воздействием шума по случайной траектории переходит из множества притяжения одного аттрактора к множеству притяжения другого.

В этом разделе предложен метод функций стохастической чувствительности для систем реакции-диффузии [60]. В зоне диффузионной неустойчивости аттрактором является тьюринговская структура. Аналогично аттракторам в системах ОДУ интерес представляет стохастическая чувствительность структуры как характеристика устойчивости к воздействию шумов и как способ описания разброса случайных состояний вокруг такого аттрактора.

Рассмотрена двухкомпонентная стохастическая модель реакции-диффузии в общем виде (1.3.1):

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= f(u,v) + D_u(x)\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \varepsilon\sigma(x)\xi(t,x), \\ \frac{\partial v}{\partial t} &= g(u,v) + D_v(x)\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \varepsilon\varphi(x)\eta(t,x), \end{aligned} \tag{1.3.1}$$

где пространственная переменная x изменяется на интервале $[0, L]$, а в качестве граничных условий взяты условия непроницаемости границ (1.1.2). Белые гауссовские шумы $\xi(t,x)$ и $\eta(t,x)$ некоррелированые и удовлетворяют условиям: $\mathrm{E}\xi(t,x) = \mathrm{E}\eta(t,x) = 0$, $\mathrm{E}\xi(t,x)\xi(t',x') = \delta(t'-t)\delta(x'-x)$, $\mathrm{E}\eta(t,x)\eta(t',x') = \delta(t'-t)\delta(x'-x)$. Помимо скалярной интенсивности шума ε заданы функции $\sigma(x)$ и $\varphi(x)$, определяющие зависимость интенсивности от значения пространственной переменной x.

Пусть у детерминированной системы (1.3.1), (1.1.2) без шума (при $\varepsilon = 0$) существует устойчивое стационарное решение $(\bar{u}(x), \bar{v}(x))$. В параметрической зоне диффузионной неустойчивости, таким решением будет неоднородная структура–аттрактор. Асимптотика отклонения случайного решения $(u^\varepsilon(t,x), v^\varepsilon(t,x))$ стохастической системы (1.3.1) при интенсивности шума $\varepsilon > 0$ может быть сформулирована следующим образом (1.3.2):

$$y(t,x) = \lim_{\varepsilon\to 0} \frac{u^\varepsilon(t,x) - \bar{u}(x)}{\varepsilon}, \quad z(t,x) = \lim_{\varepsilon\to 0} \frac{v^\varepsilon(t,x) - \bar{v}(x)}{\varepsilon}. \tag{1.3.2}$$

Динамика функций $y(t,x)$ и $z(t,x)$ определена стохастической системой первого приближения (1.3.3) с граничными условиями (1.3.4).

$$\begin{aligned} \frac{\partial y}{\partial t} &= f_1(x)y + f_2(x)z + D_u(x)\frac{\partial^2 y}{\partial x^2} + \sigma(x)\xi(t,x) \\ \frac{\partial z}{\partial t} &= g_1(x)y + g_2(x)z + D_v(x)\frac{\partial^2 z}{\partial x^2} + \varphi(x)\eta(t,x) \end{aligned} \tag{1.3.3}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial y}{\partial x}(t,0) &= \frac{\partial y}{\partial x}(t,L) = 0 \\ \frac{\partial z}{\partial x}(t,0) &= \frac{\partial z}{\partial x}(t,L) = 0 \end{aligned} \tag{1.3.4}$$

Коэффициенты при функциях приращений в системе (1.3.3) определяются через устойчивое состояние $(\bar{u}(x), \bar{v}(x))$ и частные производные:

$$\begin{aligned} f_1(x) &= \frac{\partial f}{\partial u}(\bar{u}(x),\bar{v}(x)), \quad f_2(x) = \frac{\partial f}{\partial v}(\bar{u}(x),\bar{v}(x)), \\ g_1(x) &= \frac{\partial g}{\partial u}(\bar{u}(x),\bar{v}(x)), \quad g_2(x) = \frac{\partial g}{\partial v}(\bar{u}(x),\bar{v}(x)). \end{aligned}$$

Решение краевых задач (1.3.3), (1.3.4) с неоднородными уравнениями в частных производных, как правило, подразумевает применение схем численного интегрирования на дискретной сетке. Пусть $x_0, x_1, \ldots, x_{n+1}$ – разбиение отрезка $[0, L]$, где $x_i = ih$, $h = L/(n+1)$. Дискретные аналоги функций отклонения на этом разбиении обозначены как $y_i(t) = y(t,x_i)$, $z_i(t) = z(t,x_i)$. Аппроксимация производных по пространственной переменной x на такой сетке выглядит следующим образом:

$$\begin{aligned} \frac{\partial y}{\partial x}(t,0) &\approx \frac{y_1(t) - y_0(t)}{h}, \qquad \frac{\partial y}{\partial x}(t,L) \approx \frac{y_{n+1}(t) - y_n(t)}{h}, \\ \frac{\partial z}{\partial x}(t,0) &\approx \frac{z_1(t) - z_0(t)}{h}, \qquad \frac{\partial z}{\partial x}(t,L) \approx \frac{z_{n+1}(t) - z_n(t)}{h}, \\ \frac{\partial^2 y}{\partial x^2}(t,x_i) &\approx \frac{y_{i-1}(t) - 2y_i(t) + y_{i+1}(t)}{h^2}, \quad \frac{\partial^2 z}{\partial x^2}(t,x_i) \approx \frac{z_{i-1}(t) - 2z_i(t) + z_{i+1}(t)}{h^2}. \end{aligned}$$

Такая аппроксимация в соответствии с методом прямых позволяет заменить систему уравнений (1.3.3) на аппроксимирующую систему обыкновенных стохастических дифференциальных уравнений (1.3.5).

$$\begin{aligned}
&\frac{dy_0}{dt} = f_{10}y_0 + f_{20}z_0 + \alpha_0[-y_0 + y_1] + \sigma_0\xi_0(t),\\
&\frac{dy_i}{dt} = f_{1i}y_1 + f_{2i}z_1 + \alpha_i[y_{i-1} - 2y_i + y_{i+1}] + \sigma_i\xi_i(t), \quad i = 1, \dots, n\\
&\frac{dy_{n+1}}{dt} = f_{1n+1}y_{n+1} + f_{2n+1}z_{n+1} + \alpha_{n+1}[y_n - y_{n+1}] + \sigma_{n+1}\xi_{n+1}(t),\\
&\frac{dz_0}{dt} = g_{10}y_0 + g_{20}z_0 + \beta_0[-z_0 + z_1] + \varphi_0\eta_0(t),\\
&\frac{dz_i}{dt} = g_{1i}y_1 + g_{2i}z_1 + \beta_i[z_{i-1} - 2z_i + z_{i+1}] + \varphi_i\eta_i(t), \quad i = 1, \dots, n\\
&\frac{dz_{n+1}}{dt} = g_{1n+1}y_{n+1} + g_{2n+1}z_{n+1} + \beta_{n+1}[z_n - z_{n+1}] + \varphi_{n+1}\eta_{n+1}(t)
\end{aligned} \tag{1.3.5}$$

Для аппроксимации коэффициентов при y_i, z_i, интенсивности диффузии и шумов в системе (1.3.5) приняты обозначения:

$$f_{1i} = f_1(x_i),\ f_{2i} = f_2(x_i),\ g_{1i} = g_1(x_i),\ g_{2i} = g_2(x_i),$$

$$\alpha_i = \frac{D_u(x_i)}{h^2}, \quad \beta_i = \frac{D_v(x_i)}{h^2},$$

$$\sigma_i = \sigma(x_i),\ \varphi_i = \varphi(x_i),\ \xi_i(t) = \xi(t,x_i),\ \eta_i(t) = \eta(t,x_i).$$

Систему (1.3.5) можно представить в векторном виде (1.3.6):

$$\frac{dr}{dt} = Ar + B\theta(t), \tag{1.3.6}$$

где вектор r – столбец из последовательно записанных координат y_i и z_i, вектор-функция θ – столбец из случайных величин $\xi_i(t)$, $\eta_i(t)$. Можно заметить, что первое слагаемое никак не связано с шумами, второе слагаемое зависит только от них. Матрица A – блочная матрица, заданная следующим образом:

$$A = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix},$$

$$A_{11} = \begin{bmatrix}
f_{10} - \alpha_0 & \alpha_0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0\\
\alpha_1 & f_{11} - 2\alpha_1 & \alpha_1 & 0 & \dots & 0 & 0\\
0 & \alpha_2 & f_{12} - 2\alpha_2 & \alpha_2 & \dots & 0 & 0\\
\dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots\\
0 & 0 & 0 & 0 & \dots & f_{1,n} - 2\alpha_n & \alpha_n\\
0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \alpha_{n+1} & f_{1,n+1} - \alpha_{n+1}
\end{bmatrix},$$

$$A_{22} = \begin{bmatrix} g_{10}-\beta_0 & \beta_0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \beta_1 & g_{11}-2\beta_1 & \beta_1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \beta_2 & g_{12}-2\beta_2 & \beta_2 & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & g_{1,n}-2\beta_n & \beta_n \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \beta_{n+1} & g_{1,n+1}-\beta_{n+1} \end{bmatrix},$$

$$A_{12} = \begin{bmatrix} f_{20} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & f_{21} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & f_{22} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & f_{2,n+1} \end{bmatrix}, \quad A_{21} = \begin{bmatrix} g_{20} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & g_{21} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & g_{22} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & g_{2,n+1} \end{bmatrix}.$$

Матрица B – диагональная матрица, состоящая из интенсивностей шумов σ_i и φ_i:

$$B = \begin{bmatrix} \sigma_0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \sigma_1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \sigma_{n+1} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \varphi_0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & \varphi_1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & \varphi_{n+1} \end{bmatrix}.$$

Из свойств случайных величин ξ_i и η_i, входящих в вектор $\theta(t)$ в уравнении (1.3.6), матрица вторых моментов $W(t) = \mathrm{E}r(t)r^T(t)$ определена уравнением (1.3.7)

$$\dot{W} = AW + WA^T + BB^T. \tag{1.3.7}$$

Стационарное решение этого уравнения – решение матричного уравнения Ляпунова (1.3.8)

$$AW + WA^T + G = 0, \tag{1.3.8}$$

в котором $G = BB^T$ – диагональная матрица квадратов интенсивностей шума:

$$G = \begin{bmatrix} G_1 & O \\ O & G_2 \end{bmatrix}, \quad G_1 = \begin{bmatrix} \sigma_0^2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \sigma_1^2 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \sigma_{n+1}^2 \end{bmatrix}, \quad G_2 = \begin{bmatrix} \varphi_0^2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \varphi_1^2 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \varphi_{n+1}^2 \end{bmatrix}.$$

Это уравнение имеет единственное решение тогда и только тогда, когда среди собственных значений матрицы A нет чисел с нулевой действительной частью [77]. Решением уравнения будет симметричная матрица W, которая называется матрицей стохастической чувствительности. Она характеризует степень воздействия случайного шума на структуру-аттрактор $(\bar{u}(x), \bar{v}(x))$. Ее можно записать в блочном виде:

$$W = \begin{bmatrix} W_{11} & W_{12} \\ W_{21} & W_{22} \end{bmatrix},$$

причем, как можно заметить, в силу симметричности $W_{21} = W_{12}^T$. Матричное уравнение (1.3.8) также можно записать в виде (1.3.9) в терминах блоков входящих в него матриц:

$$\begin{aligned} &A_{11}W_{11} + A_{12}W_{12}^\top + W_{11}A_{11}^\top + W_{12}A_{12} + G_1 = 0, \\ &A_{11}W_{12} + A_{12}W_{22} + W_{11}A_{21} + W_{12}A_{22}^\top = 0, \\ &A_{21}W_{12} + A_{22}W_{22} + W_{12}^\top A_{21} + W_{22}A_{22}^\top + G_2 = 0. \end{aligned} \tag{1.3.9}$$

Элементы матрицы чувствительности W позволяют аппроксимировать среднеквадратическое отклонение случайных решений $(u^\varepsilon(t,x), v^\varepsilon(t,x))$ стохастической системы уравнений (1.3.1), (1.1.2) при $\varepsilon > 0$ от стационарного решения $(\bar{u}, \bar{v})$ детерминированной системы при $\varepsilon = 0$ в точках x_i заданной сетки:

$$\begin{aligned} &\mathrm{E}\left(u^\varepsilon(t,x_i) - \bar{u}(x_i)\right)^2 \approx \varepsilon^2 \left[W_{11}\right]_{ii}, \\ &\mathrm{E}\left(u^\varepsilon(t,x_i) - \bar{u}(x_i)\right)\left(v^\varepsilon(t,x_j) - \bar{v}(x_j)\right) \approx \varepsilon^2 \left[W_{12}\right]_{ij}, \\ &\mathrm{E}\left(v^\varepsilon(t,x_i) - \bar{v}(x_i)\right)^2 \approx \varepsilon^2 \left[W_{22}\right]_{ii}, \quad i,j = 1, \dots, n. \end{aligned} \tag{1.3.10}$$

В дальнейших главах на примере моделей показано, что этот подход дает достаточно хорошую аппроксимацию. Он может быть применен не только как оценка разброса случайных состояний, но и как сравнительная характеристика чувствительности тьюринговских структур в анализе механизма выбора наиболее устойчивого из них.

Основные результаты главы

В данной главе были рассмотрены методы анализа тьюринговских структур в моделях реакции-диффузии. Описан метод нахождения параметрических зон диффузионной неустойчивости, а так же предложен метод выявления и отслеживания динамики формирования структур, опирающийся на аппарат гармонического анализа.

Основным результатом этой главы является метод функций стохастической чувствительности, опубликованный в работе [60]. Изначально метод ФСЧ разработан для аттракторов систем обыкновенных дифференциальных уравнений. Здесь предложен его аналог, адаптированный для системы уравнений в частных производных параболического типа. Функции стохастической чувствительности позволяют описать вероятностное распределение случайных состояний системы вокруг стационарного решения, которым является тьюринговская структура.

Предложенный метод функций стохастической чувствительности лежит в основе анализа качественных и количественных характеристик тьюринговских структур в условиях случайных возмущений. Эти характеристики и метрики, в свою очередь, являются полезным инструментом в исследовании стохастических феноменов в рассмотренных далее пространственных моделях нелинейной динамики с диффузией.

Глава 2. Тьюринговские структуры в модели брюсселятора с диффузией

В качестве отправной точки для исследования пространственной самоорганизации полезно иметь некоторую известную и хорошо изученную детерминированную модель, которая послужит точкой отсчета для дальнейших исследований более сложных систем. Ранее было отмечено, что теорию неустойчивости Тьюринга удалось подтвердить экспериментальным путем в реакции Белоусова–Жаботинского [26]. К этому классу реакций относится целый спектр циклических химических процессов.

Первые циклические реакции были обнаружены в начале XX века в процессе каталитического разложения перекиси водорода (H_2O_2) на водород и кислород в присутствии йода (реакция Брэя–Либхафски [78, 79]). Данный феномен не удостоился должного внимания, поскольку идея циклических процессов противоречила знаниям о термодинамике того времени. К середине века развивается новое направление в физике, а именно неравновесная термодинамика [1]. В то же время советский химик Белоусов пишет работу [80] об осцилляциях в биохимических процессах цикла Кребса [81]. Его исследования были позже продолжены Жаботинским [82], который в 1968 году выступает с докладом о химических осцилляторах на международном симпозиуме в Праге. Помимо самой возможности циклической реакции обсуждается и пространственная самоорганизация в виде концентрационных волн реагентов разнообразной геометрической структуры: кругов, колец, спиралей [83]. С этого момента начинается интенсивное исследование циклических химических процессов.

В этой главе рассматривается брюсселятор – математическая модель циклической химической реакции, предложенная Пригожиным и Лефевром в Брюсселе в 1968 году [84]. Модель хорошо изучена, достаточно проста, и имеет малое количество параметров. Несмотря на свою простоту, в ней наблюдается широкий спектр феноменов связанных с пространственной самоорганизацией [85, 86]. Благодаря обширной базе данных численных экспериментов такая модель хорошо подходит для проверки гипотез и новых теорий перед их применением в более сложных моделях. Помимо брюсселятора часто рассматривают орегонатор [87], а также модели гликолиза Хиггинса и Селькова [88]. Как и брюсселятор, эти модели достаточно хорошо известны, изучены и подходят для испытания новых гипотез и методов.

2.1 Детерминированная модель брюсселятора с диффузией

Рассмотрена следующая модель брюсселятора с диффузией, заданная системой дифференциальных уравнений в частных производных (2.1.1):

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= a - (b+1)u + u^2 v + D_u \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \\ \frac{\partial v}{\partial t} &= bu - u^2 v + D_v \frac{\partial^2 v}{\partial x^2}. \end{aligned} \tag{2.1.1}$$

Переменные системы, функции $u(t, x)$ и $v(t, x)$ – безразмерные концентрации реагентов химической реакции. Рост концентрации u ускоряет реакцию (активатор), а рост v ее замедляет (ингибитор). Параметры $a > 0$, $b > 0$ регулируют динамику реакции, коэффициенты D_u, D_v определяют интенсивность диффузионных переходов соответствующих реагирующих веществ. Пространственная переменная x меняется на отрезке $[0, 1]$. В качестве граничных условий краевой задачи приняты условия непроницаемости границ пространственного интервала:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial x}(t, 0) &= \frac{\partial u}{\partial x}(t, 1) = 0 \\ \frac{\partial v}{\partial x}(t, 0) &= \frac{\partial v}{\partial x}(t, 1) = 0. \end{aligned} \tag{2.1.2}$$

Если исключить диффузию $D_u = D_v = 0$ и рассмотреть точечную систему, то у нее есть точка равновесия $(\bar{u}, \bar{v}) = (a, \frac{b}{a})$. Это равновесие устойчиво при $b < a^2 + 1$. В противном случае в системе наблюдается устойчивый предельный цикл появляющийся вследствие бифуркации Андронова–Хопфа.

Повторение рассуждений, описанных в разделе 1.1 для системы (2.1.1), (2.1.2) позволяет сформулировать условия формирования тьюринговских структур. Однородное равновесие $u(t,x) = \bar{u}$, $v(t,x) = \bar{v}$ диффузионно неустойчиво если выполняется условие (2.1.3)

$$\frac{D_u}{D_v} < \left(\frac{\sqrt{b}-1}{a}\right)^2. \tag{2.1.3}$$

Пусть $a = 3$ и $b = 9$, тогда точечное равновесие $\bar{u} = 3$, $\bar{v} = 3$ устойчиво. Условие диффузионной неустойчивости $\frac{D_u}{D_v} < D^* = \frac{4}{9}$ получено из подстановки a и b в нераввеннство (2.1.3). Рассмотрим систему (2.1.1), (2.1.2) при значениях коэффициентов диффузии $D_u = 0.016$ и $D_v = 0.1$ ($\frac{D_u}{D_v} = 0.16 < D^*$). На рис. 2.1 показан пример формирования структуры из случайного состояния, близкого к однородному равновесию. Для простоты, показана динамика $u(t,x)$, функция $v(t,x)$ имеет аналогичную динамику.

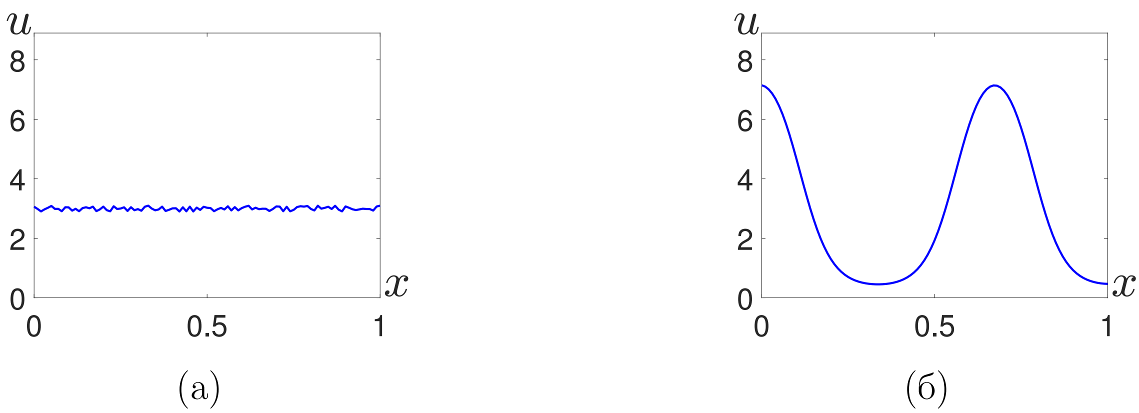


Рисунок 2.1 — Генерация тьюринговской структуры в системе (2.1.1), (2.1.2) при $a = 3$, $b = 9$, $D_u = 0.016$ и $D_v = 0.1$: а) компонент u случайного начального состояния, б) компонент u тьюринговской структуры

Временную динамику системы удобно представлять в виде цветной (тепловой) диаграммы (рис. 2.2). Пространственная переменная x меняется вдоль вертикальной оси, временная переменная t - вдоль горизонтальной. Цвет означает значение функции $u(t,\ x)$. На данном примере видно, как случайное состояние (рис. 2.1а) переходит в волнообразную структуру (рис. 2.1б).

Каждой структуре присвоен символ, состоящий из числа и направления. Число присваивается в зависимости от ее пространственной частотности или количества концентрационных волн в пространственном интервале. Направление присваивается по возрастанию или убыванию $u(t,\ x)$ вблизи левой границы интервала (при $x = 0$). В силу граничных условий (2.1.2), число волн может

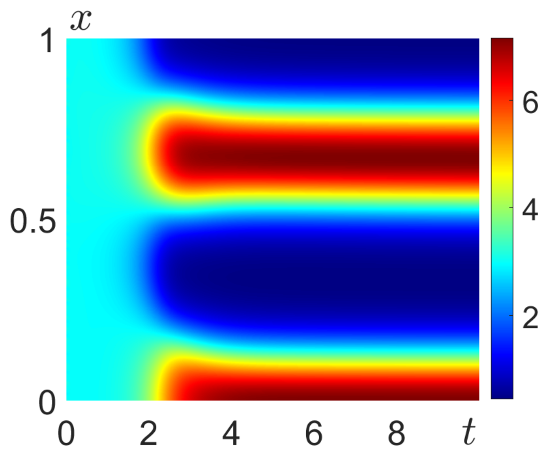


Рисунок 2.2 — Генерация тьюринговской структуры в системе (2.1.1), (2.1.2) при $a = 3$, $b = 9$, $D_u = 0.016$ и $D_v = 0.1$: пространственно-временная динамика $u(t,x)$

быть целым или полуцелым. Структуре на рис. 2.1 и 2.2, можно присвоить символ $1.5\downarrow$: в отрезок $[0, 1]$ входит одна целая волна и половина волны, а в точке $x = 0$ кривая концентрации u убывает.

Часто в подобных системах наблюдается мультистабильность: в зависимости от начального состояния, система (2.1.1), (2.1.2) генерирует одну из нескольких структур–аттракторов, сосуществующих в одной параметрической области. На рис. 2.3 приведены примеры тьюринговских структур $1.5\uparrow$ и $2\downarrow$, сосуществующих при тех же значениях параметров.

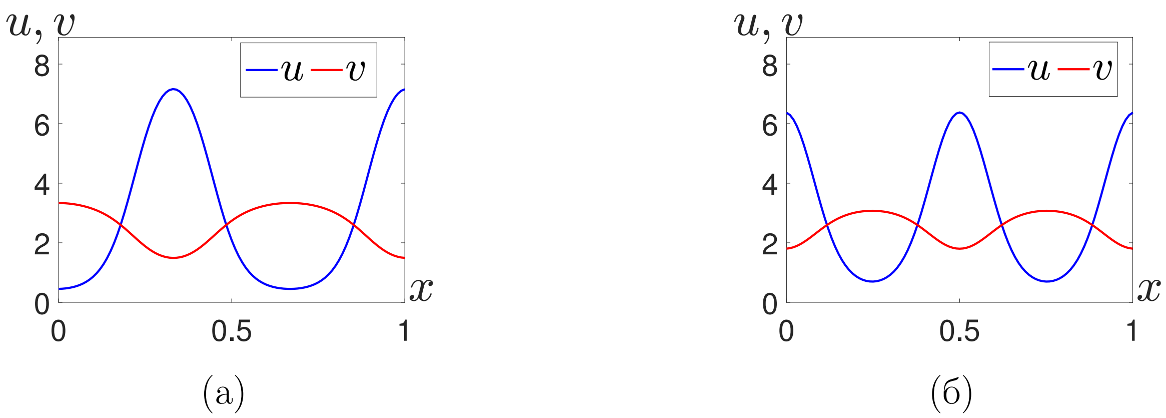


Рисунок 2.3 — Система (2.1.1), (2.1.2) при $a = 3$, $b = 9$, $D_u = 0.016$ и $D_v = 0.1$: сосуществование структуры $1.5\uparrow$ (а) и структуры $2\downarrow$ (б)

В исследованиях мультистабильности интерес представляет изменение количества сосуществующих структур в зависимости от параметров системы. В одних параметрических зонах это количество может быть велико, в других мало. Для исследования влияния значения коэффициентов диффузии на количество сосуществующих структур проведена серия численных экспериментов.

На каждой итерации проверяется существует ли концентрационная волна с заданной пространственной частотностью и фазой на левой границе интервала. Для вариации начальных состояний системы (2.1.1), (2.1.2) использована система (2.1.4):

$$\begin{aligned} u(0,x) &= \bar{u} + j\gamma cos\big(2k\pi x\big), \\ v(0,x) &= \bar{v} - j\gamma cos\big(2k\pi x\big). \end{aligned} \tag{2.1.4}$$

Здесь $\bar{u}$ и $\bar{v}$ – координаты равновесий системы (2.1.1) без диффузии. В силу граничных условий (2.1.2), устойчивое решение системы близко к пространственной косинус-волне с некоторой частотностью, характеризуемой волновым числом k, которое может быть целым или полуцелым. Параметр j принимает одно из двух значений: $j = 1$ соответствует тьюринговской структуре с убыванием $u(x)$ в точке $x = 0$, а $j = -1$ структуре с возрастанием $u(x)$. Поскольку концентрационные волны структур в брюсселяторе являются противофазными (рис. 2.3), j входит в $u(0,x)$ и $v(0,x)$ с разными знаками. Амплитуда концентрационных волн начального состояния $\gamma = 0.1$ в этой серии зафиксирована. Выбор пары k и j определяет начальное состояние, близкое к той или иной тьюринговской структуре и если такая структура действительно существует, она будет сформирована системой в процессе численного моделирования.

Для эксперимента с мультистабильностью выбраны три пары коэффициентов диффузии: (i) $D_u = 0.002$, $D_v = 0.0125$, (ii) $D_u = 0.016$, $D_v = 0.1$, (iii) $D_v = 0.032$, $D_u = 0.2$. При этом, отношение коэффициентов диффузии сохраняется $\frac{D_u}{D_v} = 0.16$. Результаты численного моделирования приведены в Таблице 1.

Судя по результатам, увеличение коэффициентов диффузии, при сохранении отношения $\frac{D_u}{D_v}$, приводит к уменьшению числа сосуществующих тьюринговских структур. При $D_u = 0.002$ получено девять разных структур, в то время как при $D_u = 0.016$ и $D_u = 0.032$ найдено только четыре структуры. Пространственная частотность волн уменьшается: при $D_u = 0.002$ число длин концентрационной волны в пространственном интервале доходило до максимума в пять при минимуме в три с половиной, при $D_u = 0.016$ до двух при минимуме в полтора, при $D_u = 0.032$ до полутора при минимуме в одну.

Увеличение коэффициентов диффузии до больших значений приводит к тому, что структуры не генерируются даже несмотря на то, что условие диффузионной неустойчивости (2.1.3) выполняется. Например, при $D_u = 0.68$, $D_v = 4.25$ тьюринговские структуры даже с самой малой частотностью $(0.5 \uparrow$

Таблица 1 — Разнообразие тьюринговских структур в брюсселяторе с диффузией

k	$D_u = 0.002$	$D_u = 0.016$	$D_u = 0.032$
0.5	$4.5\downarrow$, $4.5\uparrow$	$2\uparrow$, $2\uparrow$	$1\uparrow$, $1\uparrow$
1	$4\uparrow$, $4\uparrow$	$2\uparrow$, $2\uparrow$	$1\uparrow$, $1\downarrow$
1.5	$3\uparrow$, $3\uparrow$	$1.5\uparrow$, $1.5\downarrow$	$1.5\uparrow$, $1.5\downarrow$
2	$4\uparrow$, $4\uparrow$	$2\uparrow$, $2\downarrow$	$1\uparrow$, $1\downarrow$
2.5	$5\uparrow$, $5\uparrow$	$1.5\uparrow$, $1.5\downarrow$	$1.5\uparrow$, $1.5\downarrow$
3	$5\uparrow$, $4\uparrow$	$2\uparrow$, $2\downarrow$	$1\uparrow$, $1\downarrow$
3.5	$3.5\uparrow$, $3.5\downarrow$	$1.5\uparrow$, $1.5\downarrow$	$1.5\uparrow$, $1.5\downarrow$
4	$4\uparrow$, $4\downarrow$	$2\uparrow$, $2\downarrow$	$1\uparrow$, $1\downarrow$
4.5	$4.5\uparrow$, $4.5\downarrow$	$1.5\uparrow$, $1.5\downarrow$	$1.5\uparrow$, $1.5\downarrow$
5	$5\uparrow$, $5\downarrow$	$2\uparrow$, $2\downarrow$	$1\uparrow$, $1\downarrow$
Всего	9	4	4

и $0.5\downarrow$) не были сформированы, вместо них в системе поддерживается устойчивое однородное равновесие. Это можно связать с тем, что пропорциональное увеличение коэффициентов диффузии равносильно уменьшению длины пространственного интервала. Как следствие, собственные функции с волновыми числами, для которых условие диффузионной неустойчивости выполнено, не помещаются в столь малый интервал таким образом, чтобы граничные условия (2.1.2) были выполнены. Также можно отметить, что значительное увеличение интенсивности диффузии или сокращение пространственного интервала приближает пространственно распределенную модель к точечной, в которой точечное равновесие $(\bar{u},\ \bar{v})$ устойчиво для выбранных значений параметров системы.

2.2 Стохастические переходы в модели брюсселятора

Рассмотрен следующий вариант стохастического брюсселятора с диффузией (2.2.1):

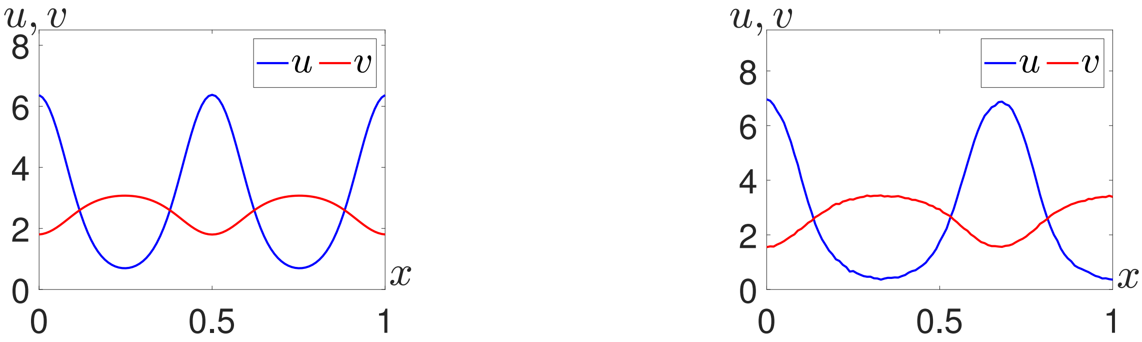
$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= a - (b+1)u + u^2 v + D_u \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \varepsilon \xi(t,x) \\ \frac{\partial v}{\partial t} &= bu - u^2 v + D_v \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \varepsilon \eta(t,x). \end{aligned} \tag{2.2.1}$$

Стохастические компоненты $\xi(t,\ x)$ и $\eta(t,\ x)$ – некоррелированные гауссовы шумы, коэффициент ε – интенсивность шума. Граничные условия – условия непроницаемости границ (2.1.2).

В предыдущей главе показано, что детерминированная система (2.1.1) с краевыми условиями (2.1.2) мультистабильна и количество сосуществующих тьюринговских структур может быть велико. Полагается, что разные структуры–аттракторы по-разному реагируют на случайные возмущения. Структура одних практически не нарушается шумом, в других наблюдаются заметные изменения. Это утверждение подтверждается таким явлением как стохастический переход между сосуществующими структурами. Под воздействием шума чувствительная структура разрушается, вместо него система сформирует более устойчивую к случайным шумам.

Для примера процесса стохастического перехода рассмотрена стохастическая система (2.2.1) с краевыми условиями (2.1.2) с параметрами $a = 3$, $b = 9$, $D_u = 0.016$, $D_v = 0.1$ и интенсивностью шума $\varepsilon = 0.5$. В качестве начального состояния использована структура $2 \downarrow$, полученная в детерминированном моделировании (рис. 2.3б). В процессе моделирования с шумом структура $2 \downarrow$ разрушается и формируется зашумленная волна $1.5 \downarrow$. Начальное и конечное состояния показаны на рис. 2.4.

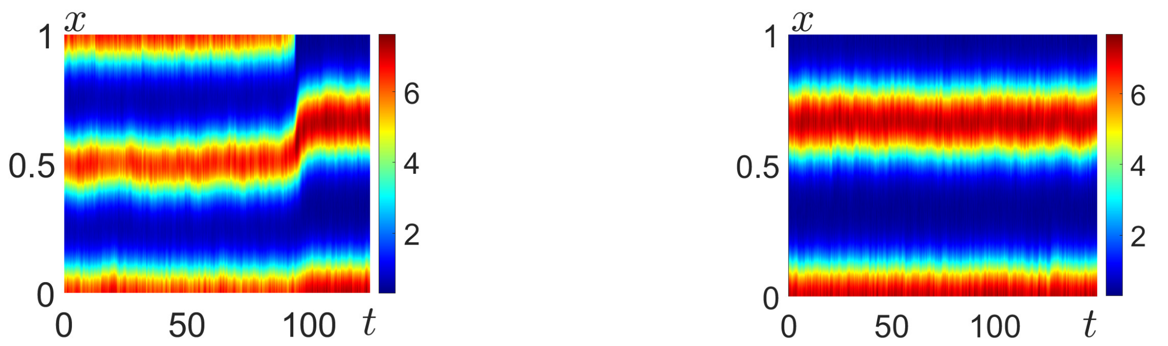
Процесс моделирования показан на рис. 2.5а, где переход между структурами виден отчетливо. До окончания эксперимента структура $1.5 \downarrow$ остается без сильных структурных изменений. Аналогичный эксперимент проведен и со структурой $1.5 \downarrow$ (рис. 2.5б), где переход к концентрационной волне какого-либо другого вида не наблюдается. Это в свою очередь подтверждает предположение, что этот аттрактор менее чувствителен к шумам и в стохастической модели



(а) (б)

Рисунок 2.4 — Стохастический переход от $2\downarrow$ $1.5\downarrow$ в системе (2.2.1), (2.1.2) при $a = 3$, $b = 9$, $D_u = 0.016$, $D_v = 0.1$, $\varepsilon = 0.5$: начальное (а) и конечное (б) состояния

будет встречаться чаще чем $2\downarrow$. Таким образом, можно говорить о конструктивной роли шума в выборе наиболее устойчивой структуры-аттрактора.



(а) (б)

Рисунок 2.5 — Стохастическая динамика $u(t,\ x)$ системы (2.2.1), (2.1.2) при $a = 3$, $b = 9$, $D_u = 0.016$, $D_v = 0.1$, $\varepsilon = 0.5$: переход $2\downarrow\longrightarrow 1.5\downarrow$ (а), отсутствие перехода из $1.5\downarrow$ (б)

Предполагается, что стохастические переходы между структурами-аттракторами в системах с диффузией имеют схожую природу с переходами между аттракторами в точечных системах. Под воздействием шумов случайное состояние может выйти из бассейна притяжения одного аттрактора и приблизиться к другому сосуществующему аттрактору. В точечных системах исследование стохастических переходов включает в себя визуализацию фазовых портретов, построение бассейнов притяжения и доверительных интервалов вокруг аттракторов. Фазовые портреты пространственных систем сложны для представления и анализа, в том числе для построения бассейнов притяжения аттракторов. В качестве аналога доверительного интервала можно использовать разброс случайных состояний вокруг тьюринговской структуры. Полагается, что чем дальше случайные состояния удаляются от аттрактора, тем выше его стохастическая чувствительность и тем больше вероятность перехода к другому аттрактору.

Для оценки и сравнения разброса случайных состояний, проведена серия численных экспериментов. В качестве начального состояния стохастической системы (2.2.1), (2.1.2) используется исследуемая структура-аттрактор с компонентами $\bar{u}(x)$, $\bar{v}(x)$. Значение коэффициента интенсивности шума ε выбирается малым, чтобы исключить стохастический переход. Моделирование проводится порядка нескольких сотен раз, после каждого процесса получается некоторое зашумленное состояние $u^{\varepsilon}(t, x)$, $v^{\varepsilon}(t, x)$. Среднеквадратическое отклонение случайных состояний в точке x при интенсивности шума ε можно получить по формуле (2.2.2):

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_u(x, \varepsilon) &= \mathrm{E}(u^{\varepsilon}(t, x) - \bar{u}(x))^2, \\ \mathcal{S}_v(x, \varepsilon) &= \mathrm{E}(v^{\varepsilon}(t, x) - \bar{v}(x))^2. \end{aligned} \tag{2.2.2}$$

На рис. 2.6 показан результат такой серии вычислений на примере координаты u структуры с обозначением $2\downarrow$. Синяя сплошная кривая изображает функцию $u(x)$ структуры $2\downarrow$. Красная кривая показывает показывает среднеквадратическое отклонение $\mathcal{S}_u(x, \varepsilon)$ от $u(x)$ в точке x при стохастическом моделировании с интенсивностью аддитивного шума ε. Как видно, такое отклонение – неоднородная функция. Точки максимума локализуют участки наиболее чувствительные к шуму.

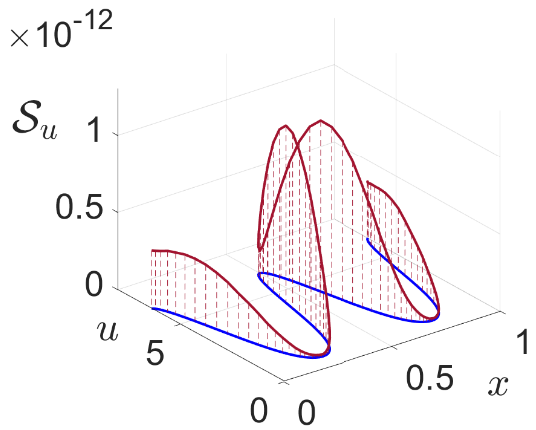


Рисунок 2.6 — Среднеквадратическое отклонение $\mathcal{S}_u$ функции $u^{\varepsilon}(t, x)$ случайного состояния от структуры $2\downarrow$ системы (2.2.1), (2.1.2) при $a = 3$, $b = 9$, $D_u = 0.016$, $D_v = 0.1$, $\varepsilon = 10^{-6}$

С помощью подобной характеристики можно провести сравнение стохастической чувствительности разных структур. Так, например, на рис. 2.7 проводится сравнение структур $1.5\downarrow$ и $2\downarrow$ при $a = 3$, $b = 9$, $D_u = 0.016$,

$D_v = 0.1$. Видно, что среднеквадратическое отклонение от $2\downarrow$ заметно выше, что в свою очередь подтверждает результат на рис. 2.4, а именно стохастическое разрушение структуры $2\downarrow$ и предпочтение структуры $1.5\downarrow$ стохастической системой.

Рисунок 2.7 — Среднеквадратическое отклонение случайных состояний от тьюринговских структур $1.5\downarrow$ и $2\downarrow$ системы (2.2.1), (2.1.2) при $a = 3$, $b = 9$, $\frac{D_u}{D_v} = 0.16$, $\varepsilon = 10^{-6}$

Такой подход позволяет оценивать и сравнивать стохастическую чувствительность тьюринговских структур, но для параметрического анализа он медленный и требовательный к вычислительным мощностям. Для аппроксимация среднеквадратического отклонения может быть использован аналитический метод функций стохастической чувствительности (ФСЧ), подробно разобранный в разделе 1.3. Если $\mathcal{W}_u(x)$ и $\mathcal{W}_v(x)$ – ФСЧ некоторой структуры-аттрактора $(\bar{u}(x),\ \bar{v}(x))$, то можно воспользоваться приближением (2.2.3):

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_u(x,\varepsilon) &\approx \overline{\mathcal{S}}_u(x,\varepsilon) = \varepsilon^2 \mathcal{W}_u(x), \\ \mathcal{S}_v(x,\varepsilon) &\approx \overline{\mathcal{S}}_v(x,\varepsilon) = \varepsilon^2 \mathcal{W}_v(x). \end{aligned} \tag{2.2.3}$$

Преимущество такого подхода в том, что нет необходимости проводить дополнительные итерации прямого моделирования с целью получить объемные статистические данные. Для определения стохастической чувствительности достаточно знать функции $\bar{u}(x)$ и $\bar{v}(x)$ рассматриваемой структуры. Данный подход значительно ускоряет и упрощает параметрический анализ стохастической чувствительности. На рис. 2.8 показано, что аппроксимация (2.2.3) хорошо соответствует статистическим данным прямого моделирования.

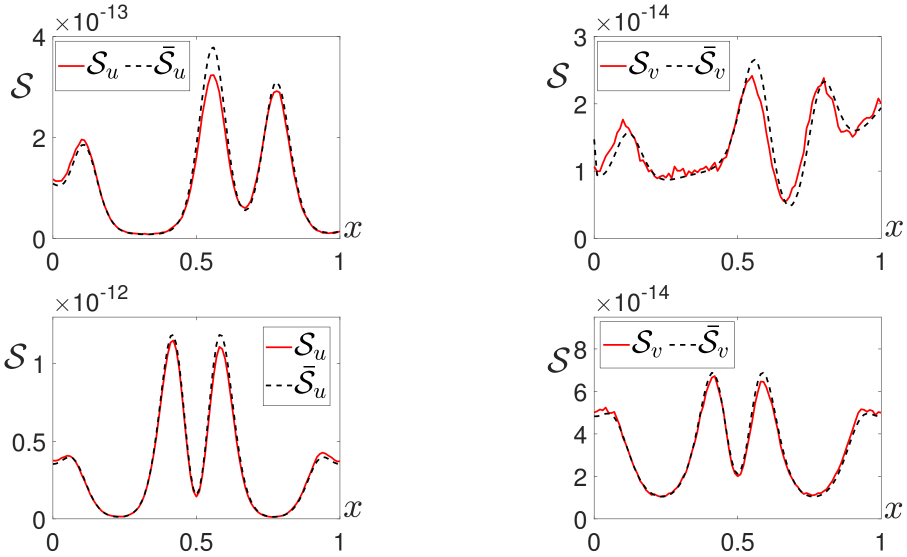


Рисунок 2.8 — Среднеквадратическое отклонение, найденное методом прямого моделирования (сплошная кривая) и оценка методом ФСЧ (пунктир) в системе (2.2.1), (2.1.2) при $a = 3$, $b = 9$, $D_u = 0.016$, $D_v = 0.1$, $\varepsilon = 0.5$: структура $1.5\downarrow$ (верхний ряд) и структура $2\downarrow$ (нижний ряд)

В дальнейшем для сравнения стохастической чувствительности будет использована числовая характеристика, а именно максимум ФСЧ (2.2.4).

$$\begin{aligned} \overline{\mathcal{W}_u} &= \max_{x\in[0,1]} \mathcal{W}_u(x), \\ \overline{\mathcal{W}_v} &= \max_{x\in[0,1]} \mathcal{W}_v(x). \end{aligned} \tag{2.2.4}$$

Для выявления влияния интенсивности коэффициентов диффузии на стохастическую чувствительность тьюринговских структур проведен параметрический анализ стохастической системы (2.2.1), (2.1.2). Параметры D_u и D_v изменяются при постоянном отношении $\frac{D_u}{D_v} = 0.16$, при этом фиксируются значения $\overline{\mathcal{W}_u}$ и $\overline{\mathcal{W}_v}$ для структур $1.5\downarrow$ и $2\downarrow$. Результаты показаны на рис. 2.9. Для упрощения, по горизонтальной оси обозначен только коэффициент D_u, при этом D_v меняется таким образом, чтобы их отношение оставалось постоянным.

Результаты говорят о снижении чувствительности структуры $2\downarrow$ при уменьшении интенсивности диффузии. При $D_u = 0.016$ и $D_v = 0.1$ чувствительность высока и под воздействием шума наблюдается ее разрушение и переход к структуре $1.5\downarrow$ (рис. 2.5). Ожидается, что при низких значениях коэффициентов диффузии такой переход не произойдет. В то же время чувствительность структуры $1.5\downarrow$, которая был более устойчивой к шумам, растет с уменьшением D_u и D_v. Таким образом, при $D_u = 0.0088$, $D_v = 0.055$ ситуация противоположна: структура $1.5\downarrow$ становится более чувствительной чем $2\downarrow$. Ожидается, что

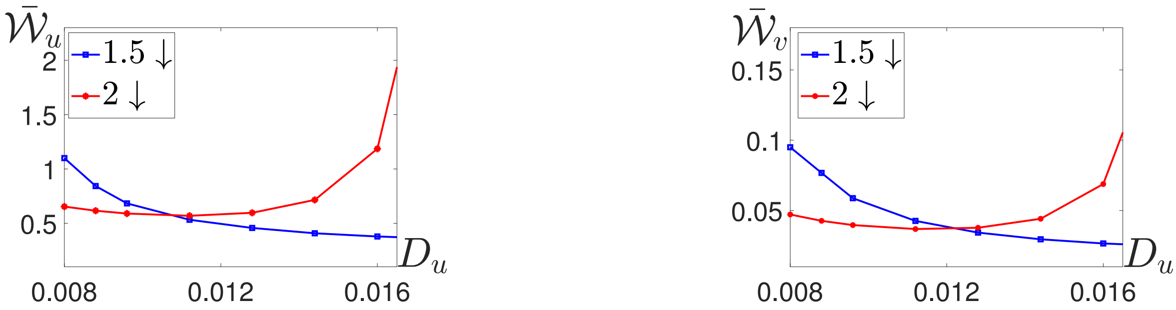
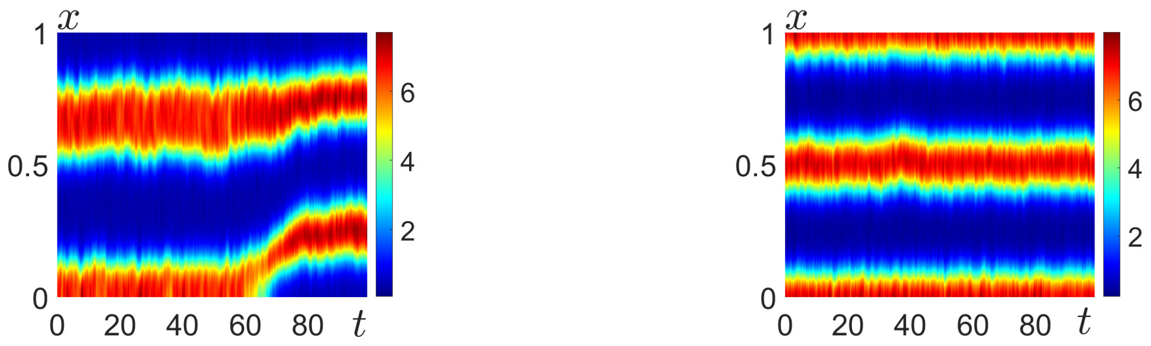


Рисунок 2.9 — Стохастическая чувствительность сосуществующих тьюринговских структур в системе (2.2.1), (2.1.2) при $a = 3$, $b = 9$, $\frac{D_u}{D_v} = 0.16$: Максимум стохастической чувствительности $\overline{\mathcal{W}_u}$ (а) и $\overline{\mathcal{W}_v}$ (б) при вариации коэффициентов диффузии

$1.5\downarrow$ будет разрушена, в то время как $2\downarrow$ существенно не изменится. Результаты моделирования, показанные на рис. 2.10 подтверждают это предположение.



(а) (б)

Рисунок 2.10 — Стохастическая динамика $u(t,\, x)$ системы (2.2.1), (2.1.2) при $a = 3$, $b = 9$, $D_u = 0.0088$, $D_v = 0.055$, $\varepsilon = 0.7$: а) стохастическое разрушение структуры $1.5\downarrow$ и переход к структуре $2\uparrow$, б) отсутствие перехода из структуры $2\downarrow$

Стоит отметить, что непосредственно на механизмы формирования тьюринговских структур влияние оказывает именно отношение коэффициентов диффузии D_u и D_v. Однако анализ стохастической чувствительности показывает, что пропорциональное изменение интенсивности диффузионных переходов даже при постоянном отношении $\dfrac{D_u}{D_v}$ оказывает значимое влияние на стохастическую динамику моделей реакции-диффузии.

2.3 Подавление автоколебаний в брюсселяторе с диффузией

В предыдущих экспериментах рассматривалась модель брюсселятора в параметрической зоне устойчивости точки равновесия. При $b > a^2 + 1$ в точечной модели (при $D_u = D_v = 0$) равновесие неустойчиво, в системе появляется устойчивый предельный цикл вследствие бифуркации Андронова–Хопфа, что соответствует автоколебательному режиму.

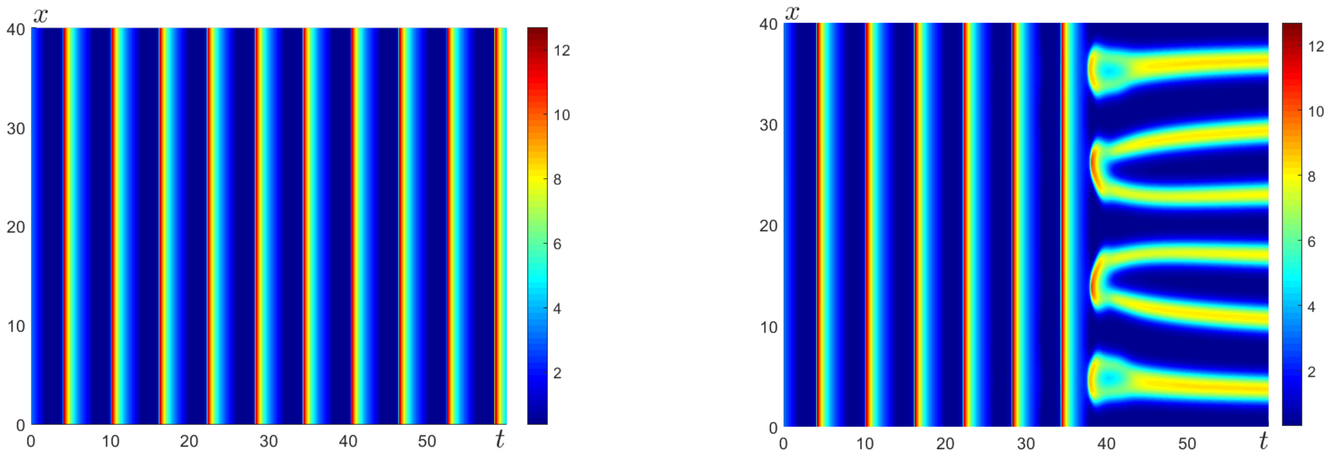
Рассмотрена система (2.2.1) на отрезке $[0, 40]$, граничные условия – условия непроницаемости границ (2.3.1):

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial x}(t,0) = \frac{\partial u}{\partial x}(t,40) = 0 \\ \frac{\partial v}{\partial x}(t,0) = \frac{\partial v}{\partial x}(t,40) = 0. \end{aligned} \tag{2.3.1}$$

Пусть $a = 3$, $b = 10.5$, $D_u = 1.5$, $D_v = 10$, $\varepsilon = 0$, влияние шума исключено. Динамика системы (2.2.1), (2.3.1) сильно зависит от своего начального состояния. Так, например, можно рассмотреть однородное состояние $u(0,\, x) = \tilde{u}$, $v(0,\, x) = \tilde{v}$, где $(\tilde{u},\, \tilde{v})$ – точка с предельного цикла системы без диффузии. Из такого начального состояния в системе формируются гомогенные колебания (рис. 2.11а). Отклонение от этого однородного состояния, например, в четвертом знаке, приводит к подавлению колебательного режима диффузией, в результате которого сформируется волнообразная стационарная структура подобная тьюринговской (рис. 2.11б).

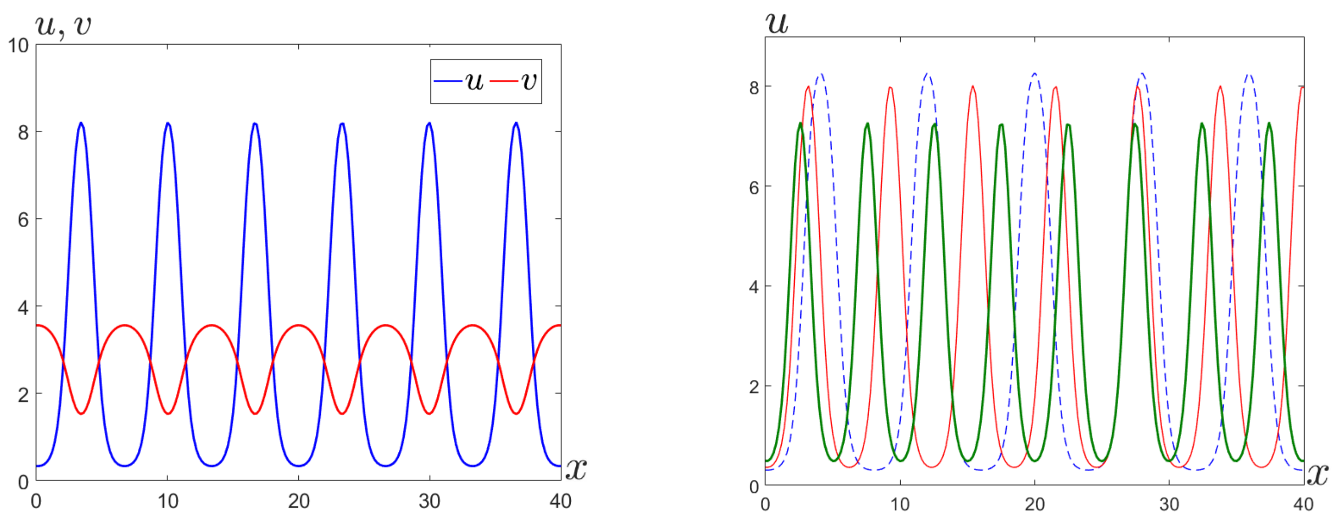
Исследование мультистабильности методом вариации начальных состояний (2.1.4) показывает, что в этой параметрической зоне возможно сосуществование нескольких тьюринговских структур (рис. 2.12). Их число варьируется в зависимости от значений параметров системы. Например, для разных значений параметра D_u количество структур меняется от шести для $D_u = 5$ до двадцати для $D_u = 1$.

Для фиксирования процесса стабилизации колебаний применимы два подхода. Первый подход анализирует экстремумы решений системы (рис. 2.13а). Фаза однородных автоколебаний характеризуется совпадением максимального и минимального значений. При подавлении таких колебаний эти значения расходятся и стабилизируются, что говорит о появлении стабильного однородного



(а) (б)

Рисунок 2.11 — Динамика $u(t, x)$ системы (2.2.1), (2.3.1) в зоне предельных циклов при $a = 3$, $b = 10.5$, $D_u = 1.5$, $D_v = 10$: а) однородные автоколебания, б) подавление автоколебаний и формирование стационарной структуры

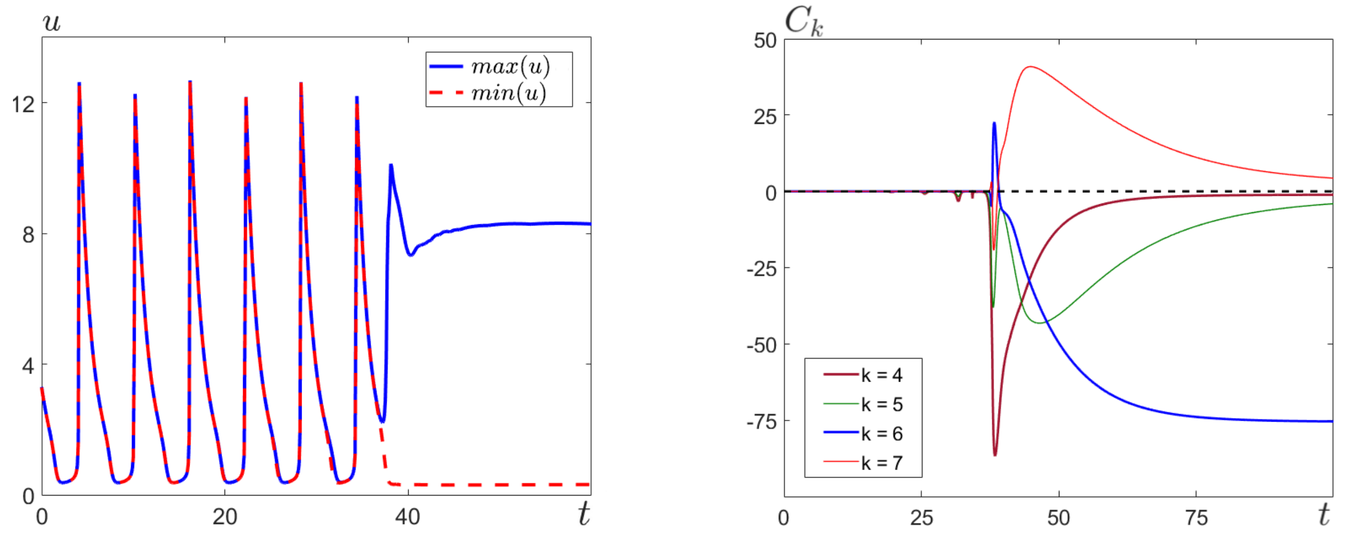


(а) (б)

Рисунок 2.12 — Мультистабильность брюсселятора (2.2.1), (2.3.1) при $a = 3$, $b = 10.5$, $D_u = 1.5$, $D_v = 10$: а) тьюринговская структура $6\uparrow$, б) структуры $8\uparrow$, $6.5\uparrow$ и $5\uparrow$

состояния. Второй подход основан на методе волновых коэффициентов, подробно описанном в разделе 1.2.2. При возникновении волнообразных структур по крйней мере один коэффициент C_k заметно отдалится от нуля (рис. 2.13б). Оба подхода дополняют визуализацию процесса показанного на рис. 2.11б.

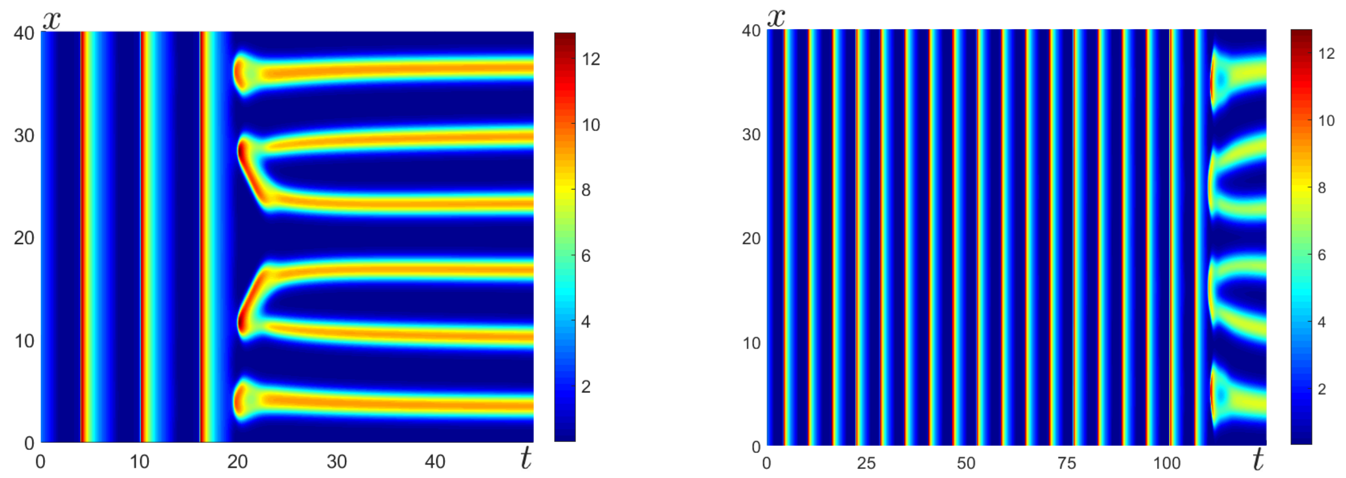
Помимо влияния на количество и пространственную частотность тьюринговских структур, интенсивность диффузии влияет на скорость подавления автоколебаний. На рис. 2.14 показана динамика процесса перехода от колебаний к структуре $6\uparrow$ для $D_u = 1.2$ и $D_u = 1.8$ с тем же начальным состоянием как



(а) (б)

Рисунок 2.13 — Подавление автоколебаний системы (2.2.1), (2.3.1) при $a = 3$, $b = 10.5$, $D_u = 1.5$, $D_v = 10$: а) динамика максимума и минимума $u(t, x)$, б) динамика волновых коэффициентов $C_k(t)$

на рис. 2.11б. Как видно по результатам прямого моделирования, при меньшей интенсивности диффузии D_u подавление происходит быстрее. Увеличение коэффициента диффузии приводит к значительному замедлению процесса. При приближении значения к границе бифуркации Тьюринга ($D_u^* \approx 5.578$ при $b = 10.5$ и $D_v = 10$) колебания не подавляются, система поддерживает колебательный режим.



(а) (б)

Рисунок 2.14 — Процесс подавления автоколебаний системы (2.2.1), (2.3.1) при $a = 3$, $b = 10.5$, $D_v = 10$: а) $D_u = 1.2$, б) $D_u = 1.8$

Поскольку даже малые отклонения от однородного состояния приводят к подавлению автоколебаний, возникает интерес к стохастической динамике системы. Случайные шумы моделируют различные естественные факторы, способные нарушить эту однородность. Прямое моделирование системы (2.2.1), (2.3.1) с малой интенсивностью шума (рис. 2.15) подтверждает роль случайных возмущений в подавлении колебаний и генерации тьюринговской структуры. Полученная концентрационная волна устойчива, а слабые шумы не привели к заметным структурным изменениям.

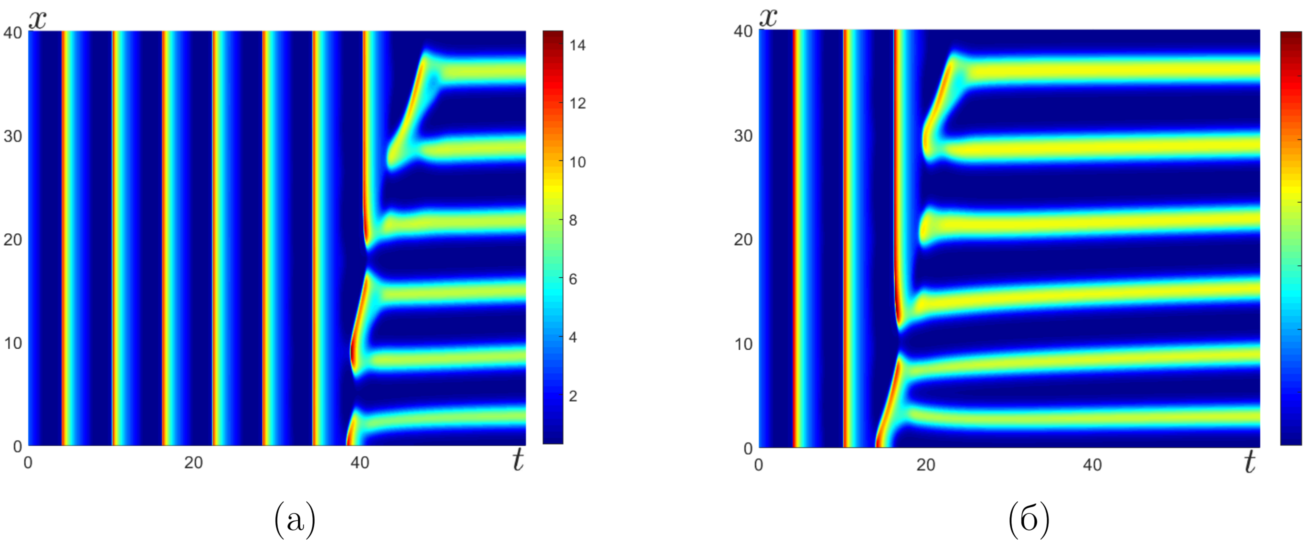
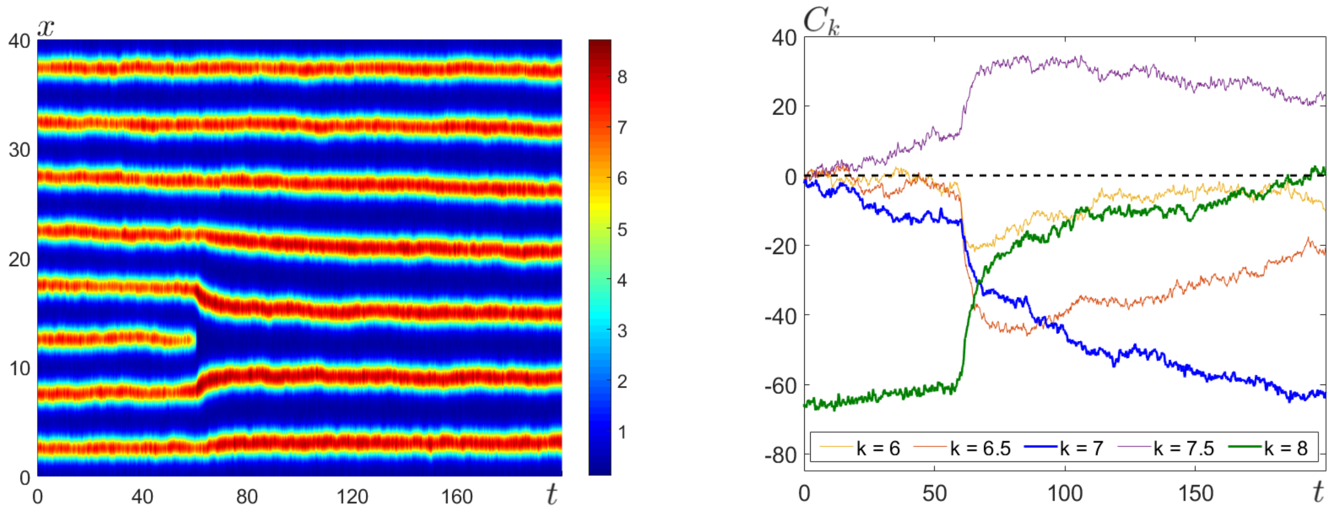


Рисунок 2.15 — Стохастическое подавление гомогенных автоколебаний системы (2.2.1), (2.3.1) при $a = 3$, $b = 10.5$, $D_u = 1.5$, $D_v = 10$: а) $\varepsilon = 10^{-6}$, б) $\varepsilon = 10^{-4}$

Полученный результат также указывает на влияние коэффициента интенсивности шума ε на скорость подавления автоколебаний в системе. На рис. 2.15а изображен результат стохастического моделирования при $\varepsilon = 10^{-6}$, на рис. 2.15б интенсивность повышена до $\varepsilon = 10^{-4}$, начальное состояние в этих экспериментах одно и то же. В результате увеличения интенсивности шума количество циклов автоколебаний значительно уменьшилось, а время перехода системы от автоколебаний к устойчивой структуре 6 $\uparrow$ сократилось.

В предыдущем разделе рассмотрен сценарий индуцированного шумами перехода между сосуществующими структурами в зоне неустойчивости Тьюринга и устойчивости точки равновесия системы (2.2.1) без диффузии. В параметрической зоне гомогенных автоколебаний наблюдаются похожие переходы между пространственно-неоднородными структурами, которые формируются в результате подавления автоколебаний (рис. 2.16).



(а) (б)

Рисунок 2.16 — Стохастический переход между сосуществующими структурами $8\uparrow \to 7\uparrow$ в системе (2.2.1), (2.3.1) при $a = 3$, $b = 10.5$, $D_u = 1.5$, $D_v = 10$, $\varepsilon = 0.5$: а) временная динамика $u(t, x)$, б) временная динамика волновых коэффициентов C_k

Начальное состояние стохастического численного эксперимента – структура $8\uparrow$, полученная детерминированным прямым моделированием. Диаграмма динамики на рис. 2.16а показывает, что она устойчива к шумам в первой части моделирования, затем происходит резкий переход к структуре $7\uparrow$. Факт перехода подтверждает динамика волновых коэффициентов (рис. 2.16б). В начале эксперимента C_8 был доминирующим, в момент перехода его абсолютное значение резко падает, а остальные коэффициенты удаляются от нуля. В процессе все C_k постепенно стремятся к нулю кроме C_7, который продолжает от него удаляться, что говорит о возникновении волнообразной структуры с семью пиками.

2.4 Стохастическая генерация концентрационных пространственных волн в брюсселяторе

В данном разделе рассмотрена модель брюсселятора (2.2.1) с граничными условиями (2.3.1) при фиксированных значениях системных параметров $a = 3$, $b = 9$, $D_v = 10$. В таких условиях бифуркацинное значение коэффициента диффузии $D_u^* \approx 4.44$. При значениях $D_u > D_u^*$ система находится в параметрической зоне диффузионной устойчивости, в отличие от случаев, рассмотренных в разделе 2.1. В детерминированной модели ($\varepsilon = 0$) пространственно-однородное равновесие устойчиво и формирование тьюринговских структур невозможно.

Под влиянием шумов ($\varepsilon > 0$) состояние системы удаляется от однородного. Более того, в процессе моделирования на формируются концентрационные волны, по форме похожие на структуры Тьюринга. На рис. 2.17а показан пример временной динамики функции $u(t, x)$ при значении коэффициента диффузии $D_u = 4.46 > D_u^*$ и интенсивности шума $\varepsilon = 0.01$. Начальное состояние в данном эксперименте - однородное равновесие.

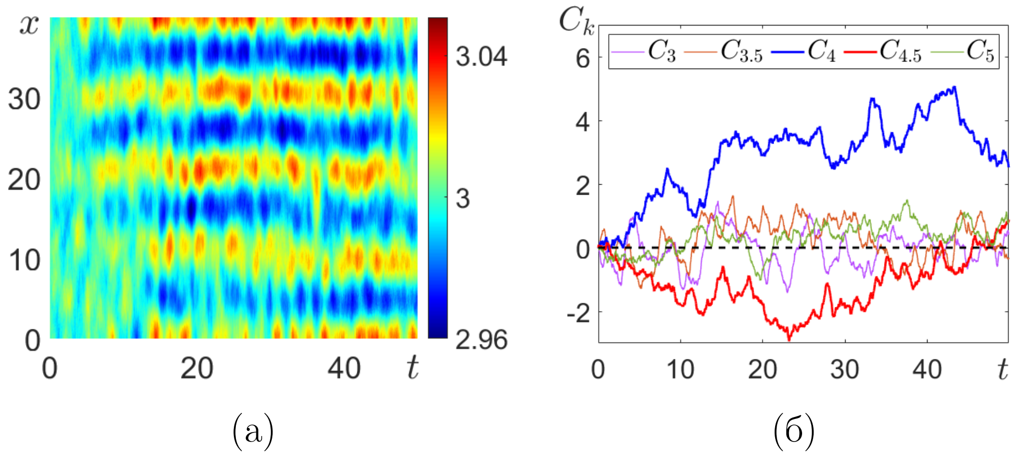


Рисунок 2.17 — Индуцированная шумом генерация концентрационных волн в системе (2.2.1), (2.3.1) при $a = 3$, $b = 9$, $D_u = 4.46$, $D_v = 10$: а) временная стохастическая динамика $u(t, x)$, б) динамика некоторых волновых коэффициентов C_k

На этой диаграмме начиная с момента $t \approx 15$ в системе визуально наблюдается волнообразная зашумленная концентрационная волна с четырьмя пиками. Этот результат подтверждается методом волновых коэффициентов (1.2.7). Временная динамика некоторых C_k соответствующая процессу на рис. 2.17а показана на рис. 2.17б. На ней заметно преобладание коэффициента C_4, соответствующего четырем пикам. На рис. 2.18 показаны примеры промежуточных состояний системы (2.2.1), (2.3.1) наблюдаемых в данном процессе.

Строго говоря, их невозможно назвать устойчивыми, однако благодаря воздействию шумов эти волны могут поддерживаться в системе [64] достаточно долго. Как и в детерминированном случае, здесь можно наблюдать мультистабильность. Так, например, на рис. 2.19 показан процесс формирования волны с 4.5 пиками.

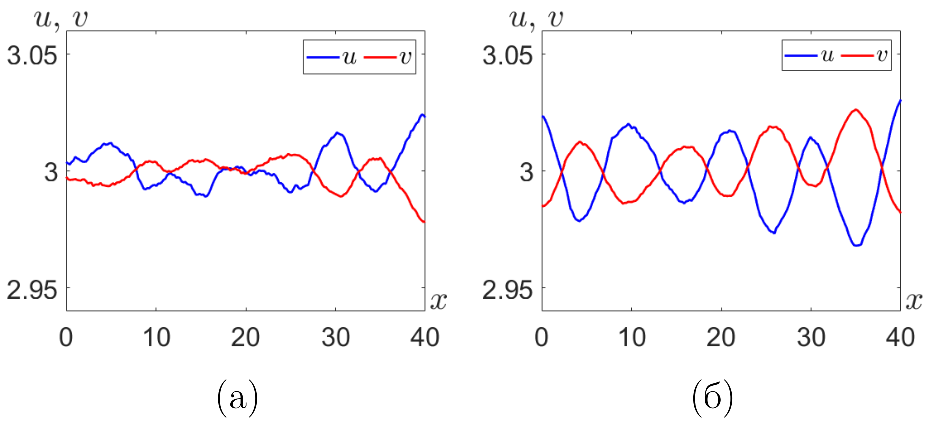


Рисунок 2.18 — Индуцированная шумом генерация концентрационных волн (рис. 2.17) в системе (2.2.1), (2.3.1) при $a = 3$, $b = 9$, $D_u = 4.46$, $D_v = 10$: а) состояние системы в момент $t = 5$, б) состояние системы в момент $t = 40$

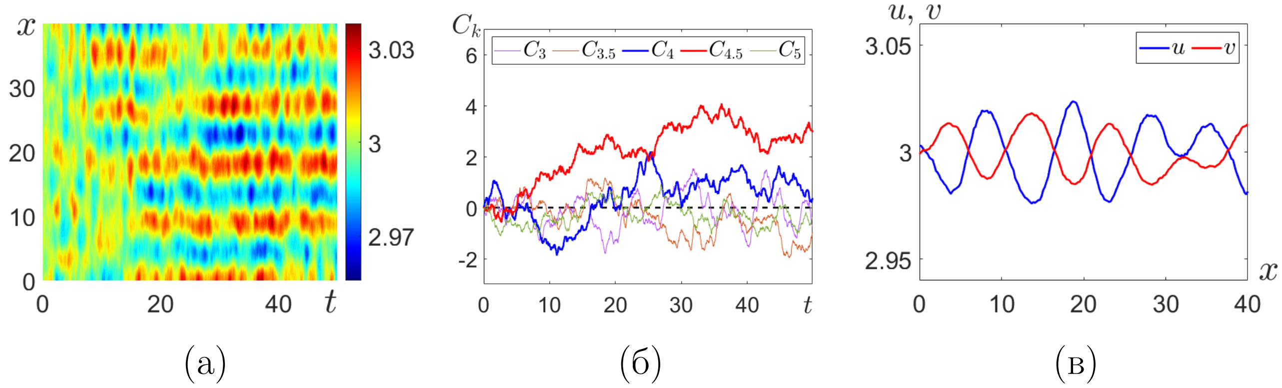


Рисунок 2.19 — Индуцированная шумом генерация концентрационных волн в системе (2.2.1), (2.3.1) при $a = 3$, $b = 9$, $D_u = 4.46$, $D_v = 10$: а) временная стохастическая динамика $u(t, x)$, б) динамика некоторых волновых коэффициентов C_k, в) состояние системы в момент $t = 40$

Подобная мультистабильность и влияние шумов на ее характер вызывает интерес для детального анализа. Из-за искажений вызванных шумами и неустойчивости неоднородных состояний, нет возможности отслеживать стабилизацию волновых коэффициентов $C_k(t)$, как это было сделано в зоне диффузионной неустойчивости. Требуется фиксировать не только сам факт присутствия пространственной частоты в состоянии системы с течением времени, но и длину временного интервала, на котором она присутствовала. Для исследования мультистабильности можно доработать метод волновых коэффициентов, а именно ввести показатель волновых мощностей (2.4.1):

$$W_k = \frac{1}{T} \int_0^T C_k^2(t) dt, \qquad (2.4.1)$$

где индекс k – целое или полуцелое положительное число, T – длина временного интервала численного эксперимента.

Характеристика W_k показывает как часто в системе наблюдается пространственная концентрационная волна, соответствующая коэффициенту C_k. Если в системе преобладает определенная частота, как в случае на рис. 2.17 и 2.19, соответствующая мощность W_k будет значительно доминировать.

В таблице 2 приведены значения волновых мощностей для процесса, показанного на рис. 2.17. Доминирующее значение W_4 отражает тот факт, что в процессе моделирования часто наблюдается волна с четырьмя пиками.

Таблица 2 — Коэффициенты волновых мощностей при $D_u = 4.46$, $\varepsilon = 0.01$, $T = 50$ (рис. 2.17)

k	3	3.5	4	4.5	5
W_k	0.3227	0.4465	9.6818	1.9897	0.3127

Аналогично, таблица 3 согласуется с процессом, показанным на рис. 2.19, где значение $W_{4.5}$ заметно больше других мощностей.

Таблица 3 — Коэффициенты волновых мощностей при $D_u = 4.46$, $\varepsilon = 0.01$, $T = 50$ (рис. 2.19)

k	3	3.5	4	4.5	5
W_k	0.4688	0.6831	0.9395	6.1771	0.2813

С помощью волновых мощностей проведен анализ связь пространственной частоты индуцированных шумом концентрационных волн с интенсивностью шума. Для каждого значения параметра ε выполнена серия численных экспериментов. В каждом эксперименте начальное состояние – однородное равновесие, время эксперимента – $T = 50$. В каждом эксперименте получены волновые мощности W_k, значения которых усредняются. Диаграмма волновых мощностей на рис. 2.20 демонстрирует средние значения W_k в зависимости от интенсивности шума ε.

Данный результат указывает на то, что некоторые частоты, как правило, присутствуют чаще и дольше других. В частности, волны с четырьмя и четырьмя с половиной пиками в ходе экспериментов формировались чаще. Это подтверждается большими значениями W_4 и $W_{4.5}$ по сравнению с другими мощностями. Увеличение интенсивности шума ε приводит к еще большему разрыву.

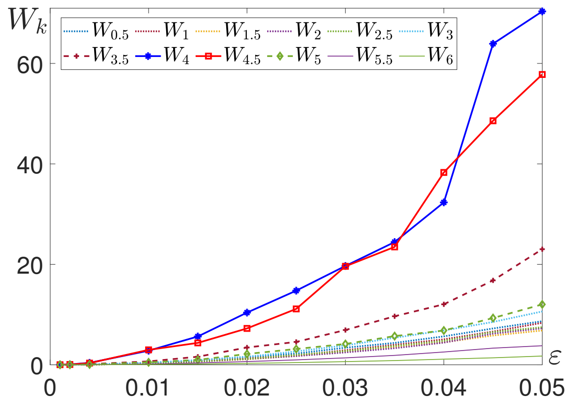


Рисунок 2.20 — Средние значения волновых мощностей в зависимости от интенсивности шума ε в системе (2.2.1), (2.3.1) при $a = 3$, $b = 9$, $D_u = 4.46$, $D_v = 10$

Подобный статистический анализ показывает, что, несмотря на случайную природу шумов, их воздействие может иметь конструктивный характер, вызывая появление концентрационных волн в зонах, где отсутствуют тьюринговские структуры.

Основные результаты главы

В данной главе рассмотрена пространственная модель брюсселятора с диффузией. Классическая локальная модель имеет одну точку равновесия, в ней также существуют предельные циклы как следствие бифуркации Андронова–Хопфа.

Раздел 2.1 рассматривает детерминированную динамику системы в параметрической зоне диффузионной неустойчивости. В нем сформулировано условие, при котором диффузионные переходы приводят к формированию пространственно-неоднородных устойчивых тьюринговских структур, определяющее зону диффузионной неустойчивости и границу бифуркации Тьюринга. Показано, что детерминированная модель мультистабильна, а интенсивность диффузии влияет на характер мультистабильности.

В разделе 2.2 рассмотрена стохастическая динамика брюсселятора с диффузией. Под воздействием шумов одни тьюринговские структуры разрушаются, другие существенно не изменяются. Разница в стохастической чувствительности приводит к стохастическим переходам от структур с высокой чувствительностью к более устойчивым к влиянию шума. С помощью метода функций стохастической чувствительности исследовано вероятностное распределение случайных состояний вокруг структуры-аттрактора и влияние интенсивности диффузии на это распределение. Связь между разбросом случайных состояний и стохастическими переходами рассмотрена на результатах стохастического моделирования.

В разделе 2.3 уделено внимание параметрической зоне гомогенных автоколебаний. Показано, что малые отклонения от однородного состояния приводят к подавлению колебательного режима и формированию тьюринговских структур. На динамику подавления влияют как значения системных параметров, так и случайные возмущения. Стохастическая динамика переходов между сосуществующими структурами и переходов от гомогенных колебаний к статичной концентрационной волне подтверждают конструктивную роль случайных шумов в самоорганизации нелинейных систем и выборе наиболее устойчивого состояния.

Раздел 2.4 завершает обзор исследования динамики брюсселятора с диффузией. В нем рассмотрены сценарии стохастической генерации концентрационных волн, схожих с тьюринговскими структурами в зоне диффузионной устойчивости. Показана мультистабильность модели, с помощью волновых коэффициентов выявлены доминирующие пространственные частоты вблизи границы бифуркации Тьюринга.

Результаты исследований динамики брюсселятора с диффузией, представленные в главе, опубликованы в работах [55, 56, 58, 59, 64—66, 69] и представлены в докладах на всероссийских и международных конференциях.

Глава 3. Тьюринговские структуры в модели популяционной динамики Левина–Сегеля

Изучение моделей популяционной динамики продолжается уже более двух столетий и берет начало в работах Мальтуса. В его рассуждениях предполагалось, что рост численности популяции ограничен доступными ей ресурсами, например продовольствием. Так, если темп потребления некоторого возобновляемого ресурса превосходит темп его производства, рост популяции будет замедляться по мере приближения к некоторому предельному значению [89]. В связи с развитием технологий производства пищи, теория Мальтуса на сегодняшний день утратила актуальность применительно к продовольствию. Но влияние его идей на политику и экономику остается открытой темой для дискуссий [90, 91].

Важным моментом в моделировании динамики популяции несомненно является публикация бельгийского математика Ферхюльста 1838 года [92], в которой описана логистическая модель роста населения стран в условиях ограниченного производства ресурсов. В статье приводятся статические данные переписи населения некоторых европейских государств, в том числе Франции, Бельгии, Великобритании и России. Примечательно, что предложенная им модель хорошо соответствует статистическим данным, несмотря на свою простоту.

Независимо от Ферхюльста логистическая модель динамики популяции была открыта американскими исследователями Пирлом и Ридом в 1920 году [93]. На то время прогноз численности населения в США прогнозировали с помощью полиномиальных моделей, например, модели Притчетта [94]. В своей публикации исследователи критикуют полиномиальную модель, показывают ее расхождение с данными переписи населения и предлагают логистическую модель, похожую на модель Ферхюльста.

Классическая логистическая модель Ферхюльста в своем первоначальном виде является сильным упрощением и не учитывает многие естественные факторы, влияющие на динамику популяций. Такими факторами могут быть случайная смертность, неравномерное распределение популяции и особенности внутривидовой конкуренции [2, 95]. Межвидовое взаимодействие, как правило, описывается более сложными моделями. Независимо друг от друга американский математик Лотка в 1925 году [96] и итальянский математик Вольтерра в 1926 [97] публикуют исследования более сложной математической модели «хищник-жертва» (или «хозяин-паразит»), более подробно описывающую поведение популяций.

Модель Лотки–Вольтерра допускает множество модификаций, например усложнение взаимодействия между видами (модели Базыкина и Холлинга–Таннера) [98, 99], увеличение количества видов [100, 101], а также добавление дифференциальных и интегральных операторов, описывающих распространение видов в пространстве [102—104]. В последних примерах часто можно обнаружить и тьюринговские структуры [105].

3.1 Детерминированная модель Левина–Сегеля

Модель популяционной динамики Левина–Сегеля с диффузией [106, 107], учитывающая взаимодействие популяций фитопланктона и зоопланктона, описана системой уравнений в частных производных (3.1.1):

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial u}{\partial t} &= au + eu^2 - buv + D_u \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \\
\frac{\partial v}{\partial t} &= cuv - dv^2 + D_v \frac{\partial^2 v}{\partial x^2}.
\end{aligned}
\tag{3.1.1}
$$

Пространственная переменная x изменяется на интервале $[0,\ 1]$. Выход популяций за границы области невозможен, что соответствует условиям непроницаемости границ (3.1.2):

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial u}{\partial x}(t,0) &= \frac{\partial u}{\partial x}(t,1) = 0 \\
\frac{\partial v}{\partial x}(t,0) &= \frac{\partial v}{\partial x}(t,1) = 0.
\end{aligned}
\tag{3.1.2}
$$

Функции $u(t,\, x)$ и $v(t,\, x)$ описывают плотность популяций фитопланктона и зоопланктона соответственно. Рост популяции планктона (в дальнейшем жертвы) u приводит к увеличению численности вида v и более интенсивному межвидовому взаимодействию. С другой стороны, рост популяции травоядного (в дальнейшем хищника) приводит к уменьшению доступной пищи и росту смертности. В терминах систем реакции-диффузии, можно говорить, что жертва является активатором, а хищник – ингибитором.

Положительные параметры a, b, c, d, e регулируют динамику системы. Темп прироста популяции жертвы управляется параметрами a и e. Параметры b и c определяют взаимодействие между двумя видами, а именно рост популяции хищника за счет поедания жертвы. Наконец, параметр d регулирует смертность внутри популяции хищника из-за конкуренции за ограниченные ресурсы. Интенсивность диффузии связана с коэффициентами D_u и D_v.

Если допустить $D_u = 0$, $D_v = 0$, то в каждой точке x можно рассматривать точечную систему без диффузии относительно функций $u(t)$ и $v(t)$. Такая система имеет две точки равновесия: тривиальное $(0, 0)$ и нетривиальное $\left(\dfrac{ad}{bc - ed}, \dfrac{ac}{bc - ed}\right)$. Нетривиальное равновесие имеет биологический смысл если выполнено дополнительное условие $bc > ed$ и будет устойчивым при $c > e$. Тривиальное равновесие всегда неустойчиво.

В системе с диффузией рассматривается устойчивость и неустойчивость однородного равновесия, где в каждой точке x значения функций равны равновесным значениям системы без диффузии. Неустойчивость Тьюринга и генерация пространственно-неоднородных структур наблюдается если выполнено условие (3.1.3):

$$\frac{D_u}{D_v} < \left(\sqrt{\frac{b}{d}} - \sqrt{\frac{b}{d} - \frac{e}{c}}\right)^2. \tag{3.1.3}$$

Значения параметров $a = d = e = 0.5$, $c = 1$ зафиксированы. Для значения коэффициента диффузии $D_v = 0.005$ рассмотрена зона неустойчивости Тьюринга, определенная неравенством (3.1.3) с бифуркационными параметрами b и D_u. Параметрическая область неустойчивости и граница бифуркации Тьюринга показаны на рис. 3.1.

На рис. 3.2 показан процесс формирования тьюринговской структуры при $D_u = 1.5 \times 10^{-4}$, $b = 1$. В этом примере начальное состояние системы выбрано случайно. Для простоты показана функция $u(t, x)$ в отдельные моменты времени. Начальное состояние (рис. 3.2а) быстро сглаживается (рис. 3.2б) и медленно переходит в волнообразную структуру (рис. 3.2в). Наконец, происходит процесс стабилизации, в котором амплитуда концентрационной волны

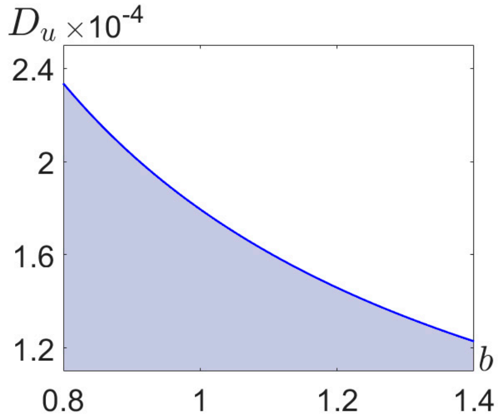


Fig 3.1 — Бифуркационная диаграмма системы (3.1.1), (3.1.2) с выделенной параметрической зоной неустойчивости Тьюринга при $a = d = e = 0.5$, $c = 1$ и $D_v = 0.005$

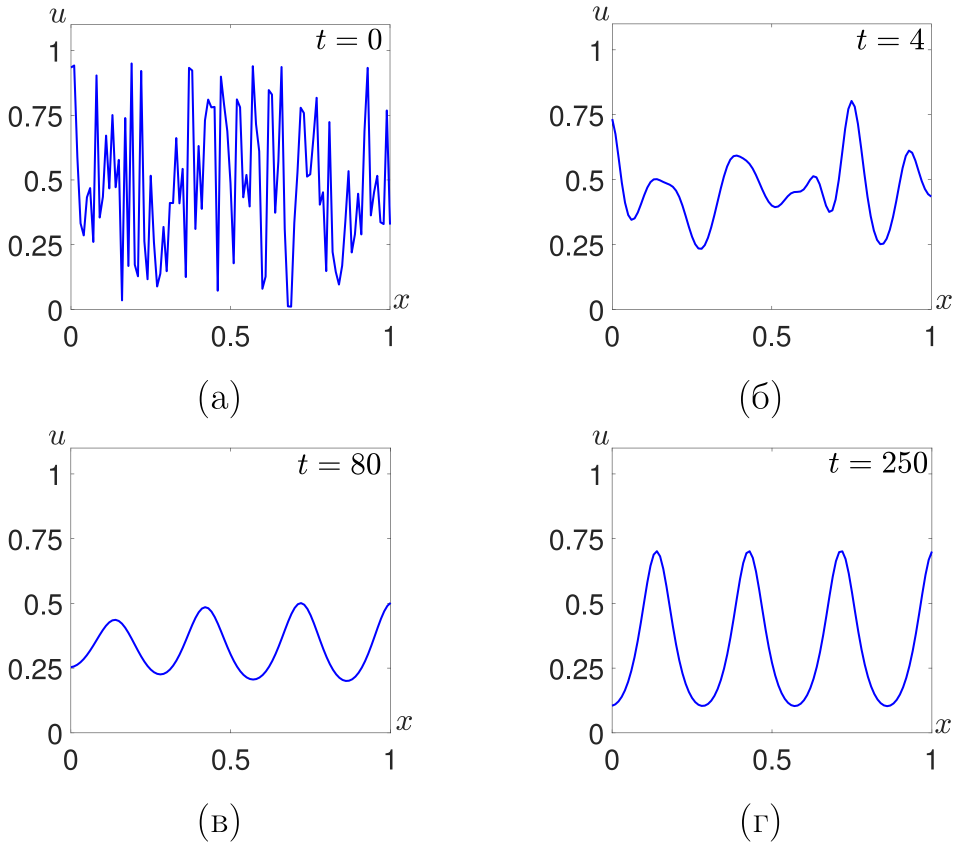


Рисунок 3.2 — Генерация тьюринговской структуры в системе (3.1.1), (3.1.2) при $a = d = e = 0.5$, $b = c = 1$, $D_u = 1.5 \times 10^{-4}$, $D_v = 0.005$: а) случайно выбранное начальное состояние $u(0, x)$, б) $u(4, x)$, в) $u(80, x)$, г) $u(250, x)$

растет и стабилизируется (рис. 3.2г). Динамика всего процесса формирования структуры изображена на рис. 3.3. На этой диаграмме пространственная переменная x изменяется вдоль вертикальной оси, время – вдоль горизонтальной, цвет соответствует значению $u(t,\ x)$.

Тьюринговская структуры представляет собой волнообразную структуру с определенной пространственной частотностью. Как и в предыдущей главе,

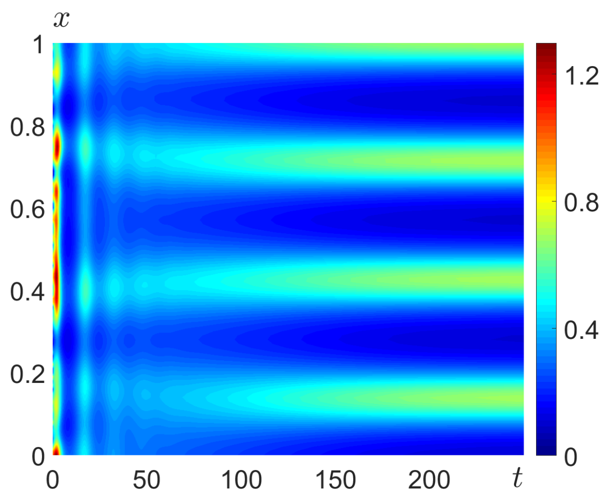


Рисунок 3.3 — Генерация тьюринговской структуры в системе (3.1.1), (3.1.2) при $a = d = e = 0.5$, $b = c = 1$, $D_u = 1.5 \times 10^{-4}$, $D_v = 0.005$: пространственно-временная динамика $u(t,x)$

каждой структуре присвоен символ, основываясь на его частотности (количестве длин волны в пространственном интервале) и фазе $u(x)$ на левом краю интервала. Структуре, показанной на рис. 3.2 и 3.3 может быть присвоен символ $3.5\ \uparrow$.

На рис. 3.4 показаны структуры Тьюринга $3.5 \uparrow$ и $3 \uparrow$, существующие в популяционной модели (3.1.1) и (3.1.2). Концентрационные волны в этих примерах являются синфазными, наибольшая концентрация популяции хищника наблюдается в точках высокой концентрации жертвы. Сосуществование тьюринговских структур разного вида говорит о мультистабильности системы, в зависимости от начального состояния может быть получена одна из этих структур. При значениях параметров $b = 1$, $D_u = 1.5 \times 10^{-4}$, $D_v = 0.005$ также могут быть получены их аналоги, а именно структуры с обозначением $3.5 \downarrow$ и $3 \downarrow$.

Каждой структуре Тьюринга соответствует некоторая параметрическая область, в которой она является устойчивой. Вне этой области она может появиться во время моделирования как временное переходное состояние. На некотором этапе численного эксперимента оно разрушится и система сформирует другую устойчивую структуру. Для выявления таких зон устойчивости проведен параметрический анализ, результаты которого показаны на рис. 3.5. Для каждого значения параметра D_u или b в качестве начального состояния выбрана пространственная волна нужной частотности и фазы на границе интервала. Если в результате эксперимента получена структура Тьюринга, ее максимальное и минимальное значения фиксируются на диаграмме. На графи-

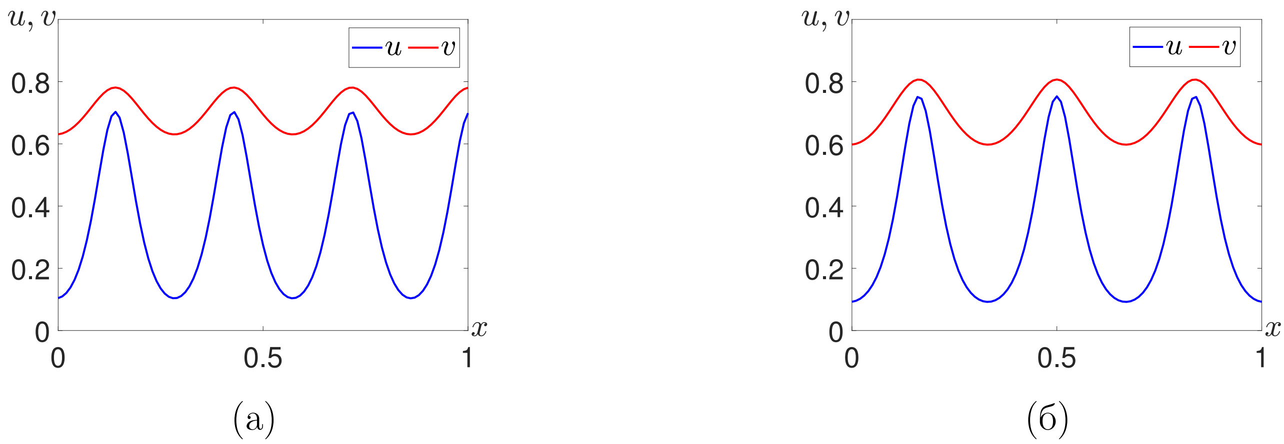


Рисунок 3.4 — Примеры тьюринговских структур системы (3.1.1), (3.1.2) при $a = d = e = 0.5$, $b = c = 1$, $D_u = 1.5 \times 10^{-4}$, $D_v = 0.005$: а) структура 3.5 ↑, б) структура 3 ↑

ке видно, что параметрическая зона устойчивости структуры с обозначением 3 ↑ меньше чем у структуры, обозначенной 3.5 ↑.

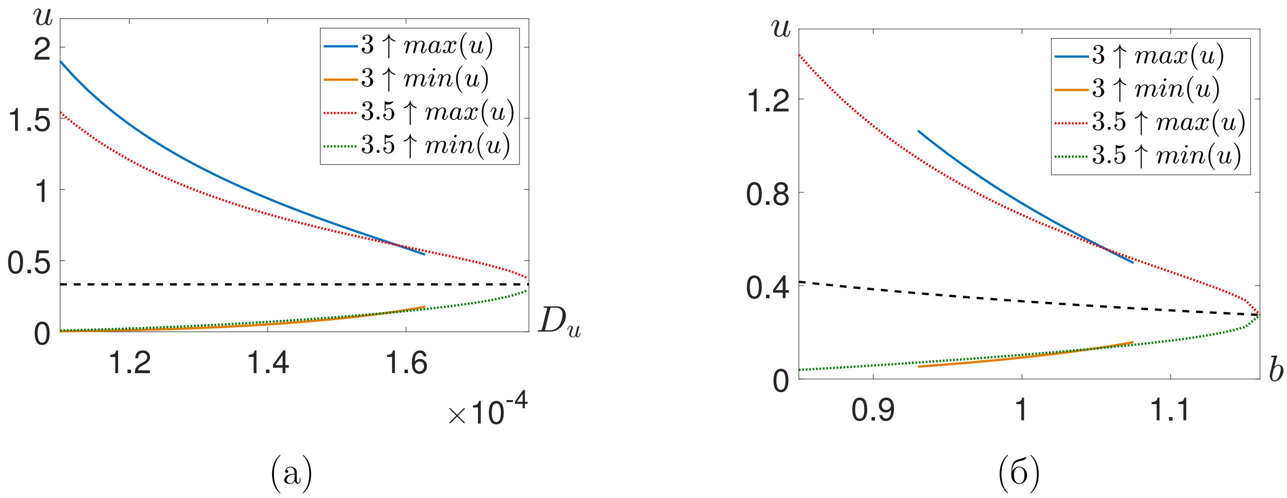


Рисунок 3.5 — Максимальные и минимальные значения функции $u(x)$ тьюринговских структур системы (3.1.1), (3.1.2) при $a = d = e = 0.5$, $b = c = 1$, $D_u = 1.5 \times 10^{-4}$, $D_v = 0.005$: а) структура 3.5 ↑, б) структура 3 ↑

Изменение системных параметров влияет на амплитуду концентрационных волн. На рис. 3.5 показана зависимость максимальных и минимальных значений от коэффициента диффузии D_u и параметра b. При приближении параметров к границе бифуркации Тьюринга, максимум и минимум концентрации становятся ближе к равновесному значению $\dfrac{ad}{bc - ed}$ (на графике жирный пунктир). Когда значение параметра достигает критического, максимум и минимум сходятся, что соответствует устойчивости однородного равновесия.

3.2 Стохастическая чувствительность структур Тьюринга в модели Левина–Сегеля

Для исследования динамики системы под воздействием случайных возмущений рассмотрен стохастический вариант популяционной модели (3.2.1) с условиями непроницаемости границ (3.1.2):

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= au + eu^2 - buv + D_u \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \varepsilon \xi(t,x), \\ \frac{\partial v}{\partial t} &= cuv - dv^2 + D_v \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \varepsilon \eta(t,x). \end{aligned} \tag{3.2.1}$$

Коэффициент ε определяет интенсивность случайных возмущений. Стохастические компоненты $\xi(t,\ x)$ и $\eta(t,\ x)$ – некоррелированные гауссовы шумы удовлетворяющие свойствам (3.2.2):

$$\begin{aligned} &\mathrm{E}\xi(t,x) = \mathrm{E}\eta(t,x) = 0, \\ &\mathrm{E}\xi(t,x)\xi(t',x') = \delta(t'-t)\delta(x'-x), \\ &\mathrm{E}\eta(t,x)\eta(t',x') = \delta(t'-t)\delta(x'-x). \end{aligned} \tag{3.2.2}$$

При $\varepsilon > 0$ под воздействием случайных шумов, стохастические решения системы (3.2.1), (3.1.2) удаляются от детерминированной структуры-аттрактора и формируют некоторое вероятностное распределение в его окрестности. На рис. 3.6 приведен пример такого распределения вокруг u-компоненты тьюринговской структуры 3.5 ↑ при значениях параметров $b = 1$, $D_u = 1.5 \times 10^{-4}$, $D_v = 0.005$. Значение коэффициента интенсивности шума в этом примере $\varepsilon = 0.01$. Данное распределение может быть получено путем многократного повторения стохастического численного эксперимента, где начальное состояние – изучаемая структура Тьюринга.

Пусть $u(x)$ и $v(x)$ – координаты тьюринговской структуры-аттрактора детерминированной системы (3.1.1), (3.1.2), $u^\varepsilon(t,x)$, $v^\varepsilon(t,x)$ – решения стохастической системы (3.2.1), (3.1.2). В качестве меры разброса случайных состояний используется среднеквадратическое отклонение (3.2.3).

$$\mathcal{S}_u(x,\varepsilon) = \mathrm{E}(u^\varepsilon(t,x) - \bar{u}(x))^2, \quad \mathcal{S}_v(x,\varepsilon) = \mathrm{E}(v^\varepsilon(t,x) - \bar{v}(x))^2. \tag{3.2.3}$$

Результат построения функции $\mathcal{S}_u(x,\ \varepsilon)$ для структур 3.5 ↑ и 3 ↑ при интенсивности шума $\varepsilon = 10^{-4}$ показан на рис. 3.7. В этих примерах видно, что

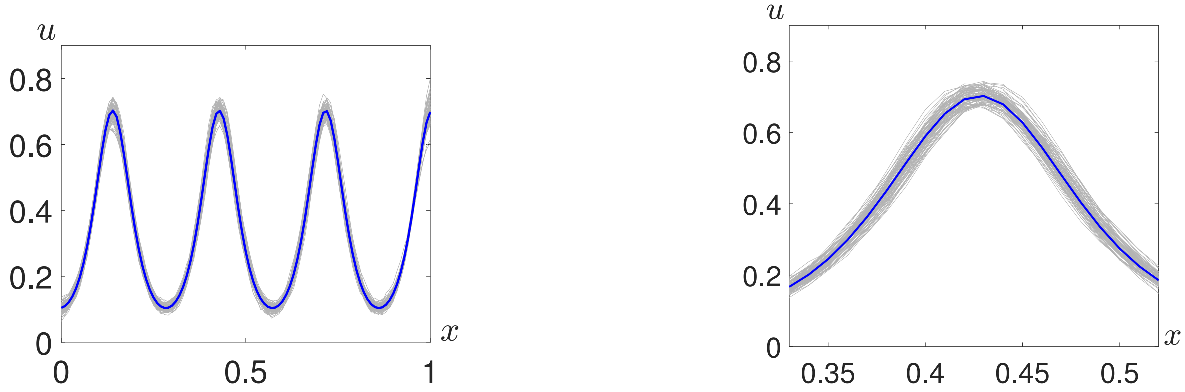
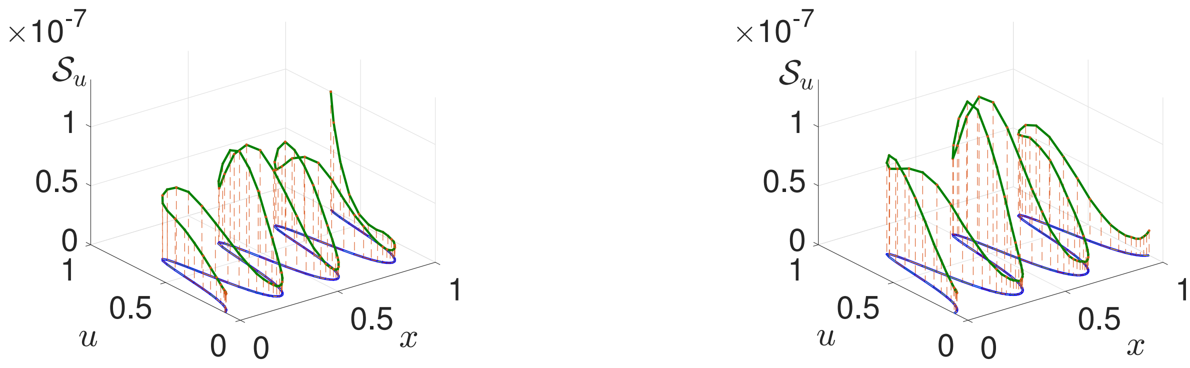


Рисунок 3.6 — Детерминированная структура 3.5 ↑ (синий) системы (3.2.1), (3.1.2) при $a = d = e = 0.5$, $b = c = 1$, $D_u = 1.5 \times 10^{-4}$, $D_v = 0.005$ и случайные состояния стохастической (серый) системы при $\varepsilon = 0.01$



(а) (б)

Рисунок 3.7 — Среднеквадратическое отклонение $\mathcal{S}_u(x,\,\varepsilon)$ случайных состояний стохастической системы (3.2.1), (3.1.2) от тьюринговской структур детерминированной системы (3.1.1), (3.1.2) при $a = d = e = 0.5$, $b = c = 1$, $D_u = 1.5 \times 10^{-4}$, $D_v = 0.005$, $\varepsilon = 10^{-4}$: а) структура 3.5 ↑, б) структура 3 ↑

среднеквадратическое отклонение неоднородно, в некоторых сегментах разброс случайных состояний может быть значительно выше чем в других. Так, например, в точках экстремума отклонение меньше, что указывает на меньшую чувствительность к шумам в этих точках.

Как было показано ранее в разделе 1.3, среднеквадратическое отклонение случайных состояний может быть аппроксимировано с помощью метода функций стохастической чувствительности (ФСЧ). Если $\mathcal{W}_u$ и $\mathcal{W}_v$ – ФСЧ структуры-аттрактора, определенного кривыми $\bar{u}(x)$ и $\bar{v}(x)$, то $\mathcal{S}_u(x,\,\varepsilon)$ и $\mathcal{S}_v(x,\,\varepsilon)$ находятся приближенно по формуле (3.2.4):

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_u(x,\varepsilon) &\approx \bar{\mathcal{S}}_u(x,\varepsilon) = \varepsilon^2 \mathcal{W}_u(x), \\ \mathcal{S}_v(x,\varepsilon) &\approx \bar{\mathcal{S}}_v(x,\varepsilon) = \varepsilon^2 \mathcal{W}_v(x). \end{aligned} \tag{3.2.4}$$

Результат такой аппроксимации $\mathcal{S}_u(x,\,\varepsilon)$ с помощью ФСЧ показан на рис. 3.8. Как можно заметить, оценка среднеквадратического отклонения $\bar{\mathcal{S}}$ достаточно точно соответствует данным прямого моделирования, представленным на рис. 3.7.

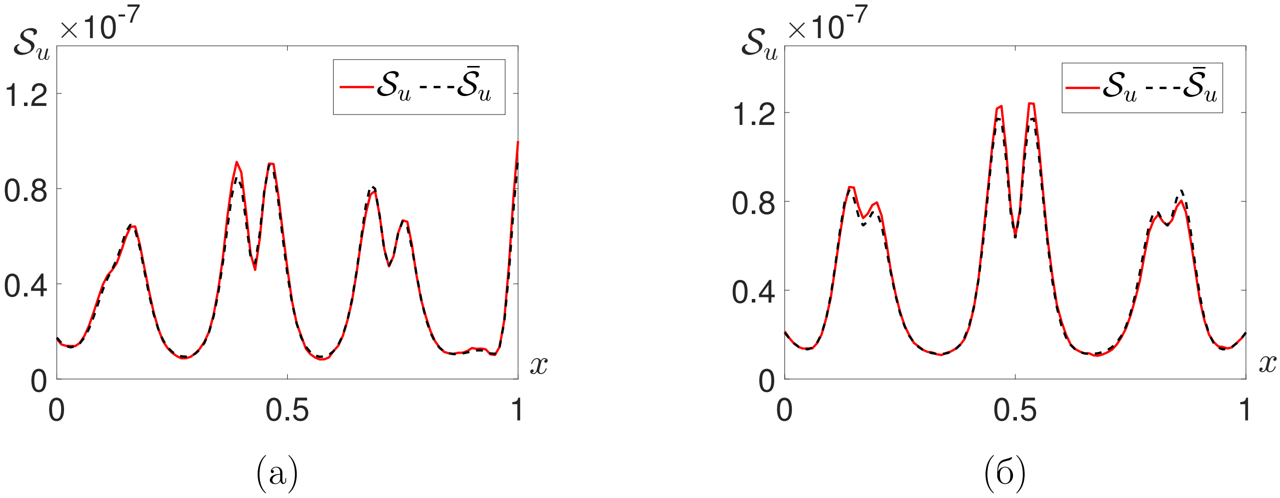


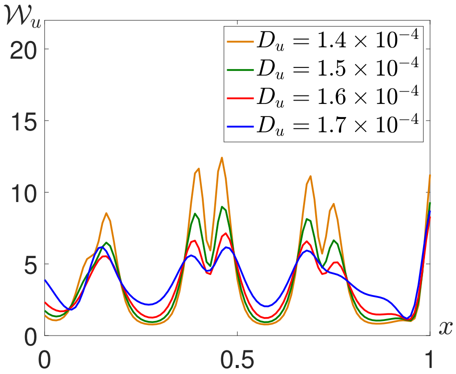
Рисунок 3.8 — Среднеквадратическое отклонение $\mathcal{S}_u(x,\,\varepsilon)$ (сплошная кривая) и его ФСЧ аппроксимация $\bar{\mathcal{S}}(x,\,\varepsilon)$ (пунктир) для структур, существующих в системе (3.1.1), (3.1.2) при $a = d = e = 0.5$, $b = c = 1$, $D_u = 1.5 \times 10^{-4}$, $D_v = 0.005$, $\varepsilon = 10^{-4}$: а) структура $3.5\uparrow$, б) структура $3\uparrow$

Для проверки качества аппроксимации (3.2.4) была проведена оценка среднеквадратического отклонения для интервала значений интенсивности шума ε. В качестве метрики качества использована относительная погрешность (3.2.5):

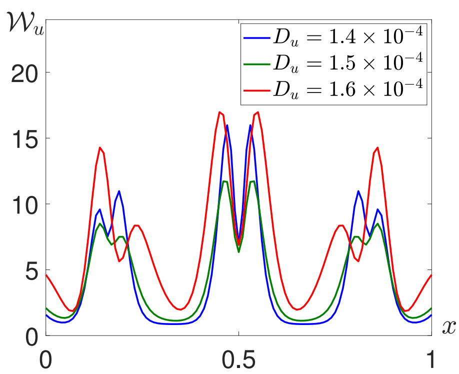
$$A_u(\varepsilon) = \sqrt{\sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\mathcal{S}_u(x_i,\varepsilon)-\bar{\mathcal{S}}_u(x_i,\varepsilon)}{\mathcal{S}_u(x_i,\varepsilon)}\right)^2}, \quad A_v(\varepsilon) = \sqrt{\sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\mathcal{S}_v(x_i,\varepsilon)-\bar{\mathcal{S}}_v(x_i,\varepsilon)}{\mathcal{S}_v(x_i,\varepsilon)}\right)^2}. \qquad (3.2.5)$$

Во время численных экспериментов при интенсивности шумов в диапазоне $10^{-6} < \varepsilon < 10^{-2}$ относительная погрешность, заданная таким образом, не покидала интервалы $0.04 < A_u < 0.1$ и $0.02 < A_u < 0.07$.

Ранее было отмечено, что вариация системных параметров влияет на форму тьюринговской структуры, в частности на амплитуду и распределение концентраций относительно равновесных значений. В свою очередь, подобное изменение влечет за собой значительное изменение профиля ФСЧ. В качестве примера, на рис. 3.9 показаны профили ФСЧ $\mathcal{W}_u(x)$ для структур $3.5\uparrow$ и $3\uparrow$, сформированных системой (3.2.1), (3.1.2). На рис. 3.9а показано, как меняются эти профили для структуры $3.5\uparrow$ при движении коэффициента диффузии D_u от $D_u = 1.4 \times 10^{-4}$ к границе своего интервала устойчивости $D_u \approx 1.78 \times 10^{-4}$.



(а)



(б)

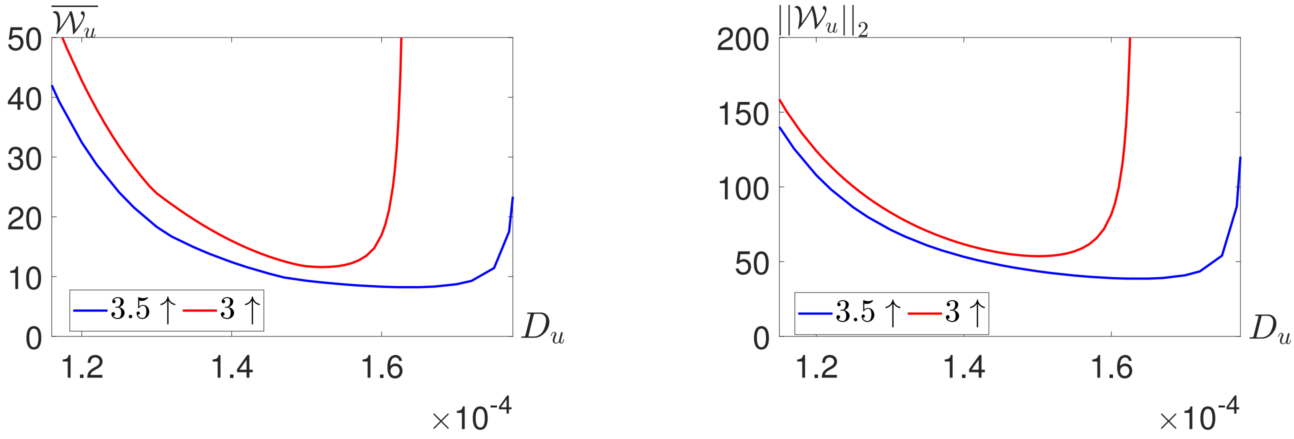
Рисунок 3.9 — Функции стохастической чувствительности $\mathcal{W}_u(x)$ тьюринговских структур системы (3.1.1), (3.1.2) для некоторых значений D_u при $a = d = e = 0.5$, $b = c = 1$, $D_v = 0.005$: а) ФСЧ структуры 3.5 ↑, б) ФСЧ структуры 3 ↑

Видна общая тенденция к уменьшению ФСЧ в критических точках, наиболее чувствительных к шуму. Разброс случайных состояний вокруг в этих точках становится меньше, а профиль более плоским. Аналогичное исследование проведено для структуры 3 ↑, граница его интервала устойчивости $D_u \approx 1.62 \times 10^{-4}$. Результаты на рис. 3.5б говорят о том, что при переходе от $D_u = 1.4 \times 10^{-4}$ к $D_u = 1.5 \times 10^{-4}$ значения ФСЧ в чувствительных точках так же уменьшаются, как и в случае со структурой 3.5 ↑. При переходе от $D_u = 1.5 \times 10^{-4}$ к $D_u = 1.6 \times 10^{-4}$, значения ФСЧ в критических точках снова возрастают. Более того, растут и значения в точках минимума функции $\mathcal{W}_u$. Вблизи границы зоны устойчивости ожидается еще более резкий рост чувствительности.

В рамках параметрического анализа чувствительности визуальное сравнение профилей ФСЧ затруднительно. Для исследования зависимости чувствительности тьюринговских структур от системных параметров системы можно ввести две числовые характеристики (3.2.6): максимальное значение ФСЧ и ее L^2-норму.

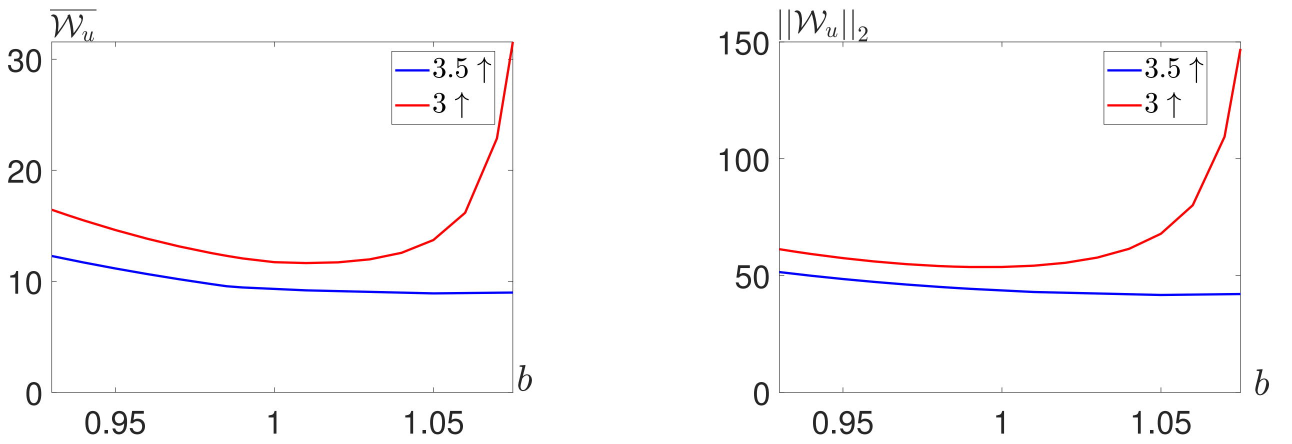
$$\overline{\mathcal{W}_u} = \underset{x \in [0,1]}{max} \mathcal{W}_u(x), \quad \|\mathcal{W}_u\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} \mathcal{W}_u^2(x_i)} \tag{3.2.6}$$

Исследовано изменение этих показателей на параметрических интервалах продемонстрированных на рис. 3.5 для структур 3 ↑ и 3.5 ↑ в пределах соответствующих областей устойчивости. Результаты анализа представлены на рис. 3.10 и 3.11. В первом случае был зафиксирован параметр $b = 1$, характеристики ФСЧ исследованы для изменяющегося коэффициента диффузии D_u. Во втором случае при фиксированном коэффициенте диффузии $D_u = 1.5 \times 10^{-4}$ изменяется параметр b.



(а) (б)

Рисунок 3.10 — Характеристики ФСЧ $\mathcal{W}_u(x)$ тьюринговских структур 3.5 ↑ и 3 ↑ системы (3.2.1), (3.1.2) при $a = d = e = 0.5$, $c = 1$, $D_v = 0.005$ и фиксированном $b = 1$: а) значение $\overline{\mathcal{W}_u}$ как функция от D_u, б) значение $\|\mathcal{W}_u\|_2$ как функция от D_u



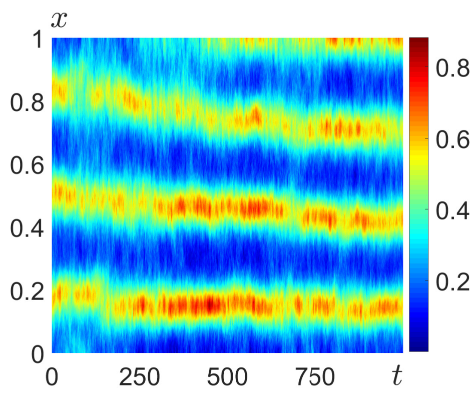
(а) (б)

Рисунок 3.11 — Характеристики ФСЧ $\mathcal{W}_u(x)$ тьюринговских структур 3.5 ↑ и 3 ↑ системы (3.2.1), (3.1.2) при $a = d = e = 0.5$, $c = 1$, $D_v = 0.005$ и фиксированном $D_u = 1.5 \times 10^{-4}$: а) значение $\overline{\mathcal{W}_u}$ как функция от b, б) значение $\|\mathcal{W}_u\|_2$ как функция от b

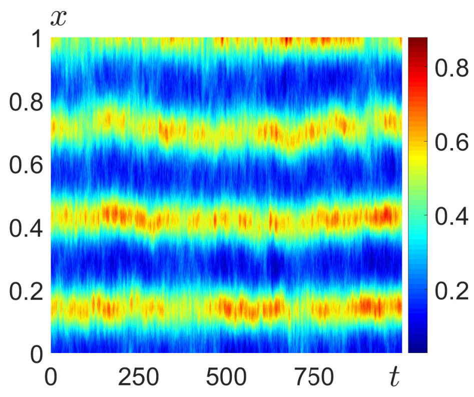
В результатах на рис. 3.10 и 3.11 можно отметить несколько особенностей. Во-первых, изменение стохастической чувствительности $\mathcal{W}_u$ не монотонное. С ростом параметра характеристики чувствительности убывают, а вблизи границы зоны устойчивости тьюринговской структуры резко возрастают. Эффект случайных шумов в этих параметрических зонах будет наиболее ощутимым. Во-вторых, метрики стохастической чувствительности структуры 3.5 ↑ на всем интервале меньше чем у структуры 3 $\uparrow$. Это, в свою очередь, указывает на то, что шум сильнее воздействует на структуру 3 $\uparrow$. Большая разница в степени чувствительности к шумам может быть причиной индуцированных переходов между сосуществующими структурами-аттракторами.

Опираясь на полученный результат можно провести анализ феномена стохастических переходов в параметрических зонах мультистабильности. Под воздействием случайных возмущений более чувствительная тюринговская структура разрушается, а менее чувствительная остается без кардинальных изменений. В качестве примера рассмотрена временная динамика системы (3.2.1), (3.1.2) при $b = 1$ и $D_u = 1.61 \times 10^{-4}$. Для данного набора значений параметров, согласно рис. 3.10, есть существенный разрыв в характеристиках ФСЧ тьюринговских структур 3 $\uparrow$ и 3.5 $\uparrow$. Так, максимальное значение $\overline{\mathcal{W}_u} \approx 21.23$ для структуры 3 $\uparrow$ и $\overline{\mathcal{W}_u} \approx 8.26$ для структуры 3.5 $\uparrow$. Значения нормы $\|\mathcal{W}_u\|_2$ приблизительно составляют 99.56 для 3 $\uparrow$ и 38.71 для 3.5 $\uparrow$ соответственно.

На рис. 3.12 показана динамика стохастической системы (3.2.1), (3.1.2). Начальным состоянием в численном эксперименте является тьюринговская структура, полученная без воздействия шума ($\varepsilon = 0$): структура 3 $\uparrow$ на рис. 3.12а и структура 3.5 $\uparrow$ на рис. 3.12б. Стохастическое моделирование в обоих случаях проведено с интенсивностью шума $\varepsilon = 0.03$. На цветовых диаграммах процесса время t изменяется вдоль горизонтальной оси, пространственная переменная x вдоль вертикальной, цвет обозначает функцию $u(t, x)$.



(а)



(б)

Рисунок 3.12 — Стохастическая динамика системы (3.2.1), (3.1.2) при $a = d = e = 0.5$, $b = c = 1$, $D_u = 1.61 \times 10^{-4}$, $D_v = 0.005$, $\varepsilon = 0.03$: стохастические преобразования структуры 3 $\uparrow$ (а) и структуры 3.5 $\uparrow$ (б)

Результат на рис. 3.12а показывает, что структура 3 $\uparrow$ поддерживается системой лишь на протяжении ограниченного времени, после чего он разрушается. После ее разрушения формируется зашумленная структура 3.5 $\uparrow$. В то же время, при той же интенсивности шума, структура 3.5 $\uparrow$ изменяется под воздействием случайных возмущений, но его общая структура сохраняется (рис. 3.12б). Переход от 3 $\uparrow$ к 3.5 $\uparrow$, а так же отсутствие перехода от структуры 3.5 $\uparrow$ связаны со значительно большей стохастической чувствительностью по сравнению со структурой 3 $\uparrow$.

Таким образом, можно говорить о связи феномена стохастических переходов с мультистабильностью, интервалами устойчивости структур-аттракторов и стохастической чувствительности. Метод ФСЧ, предложенный в разделе 1.3, помогает не только в описании разброса случайных состояний вокруг пространственных аттракторов, но и позволяет проводить анализ механизмов выбора одного из сосуществующих устойчивых состояний.

3.3 Дополнительные возможности техники стохастической чувствительности структур в модели Левина–Сегеля

Функции стохастической чувствительности (ФСЧ) в моделях, заданных системой обыкновенных дифференциальных уравнений, являются важным инструментом исследования. С их помощью строятся доверительные области, аппроксимирующие вероятностные распределения случайных состояний в окрестности аттрактора. Сценарии стохастических переходов связаны с пересечением доверительного интервала одного аттрактора с бассейном притяжения другого аттрактора. Руководствуясь этим правилом, можно находить критическое значение интенсивности шума, при котором стохастические переходы возможны.

В пространственных моделях реакции-диффузии само представление фазового пространства значительно усложняется из-за добавления пространственных переменных. Построение бассейнов притяжения, визуализация аттракторов и доверительных интервалов вокруг них – открытый вопрос. Однако, с помощью предложенного метода ФСЧ можно проводить сравнительные оценки чувствительности тьюринговских структур-аттракторов и сопоставлять размеры их бассейнов притяжения.

Для изучения конструктивных возможностей ФСЧ-анализа в изучении индуцированных шумом переходов между тьюринговскими структурами проведено дополнительное исследование стохастической модели популяционной динамики Левина–Сегеля (3.2.1), (3.1.2). Как и раньше, параметры $a = d = e = 0.5$, $c = 1$ зафиксированы. Значение коэффициента диффузии в этом разделе $D_v = 0.02$. Бифуркационная диаграмма системы относительно параметра b и коэффициента диффузии D_u с зоной неустойчивости Тьюринга и границей бифуркации заданными неравенством (3.1.3) показана на рис. 3.13.

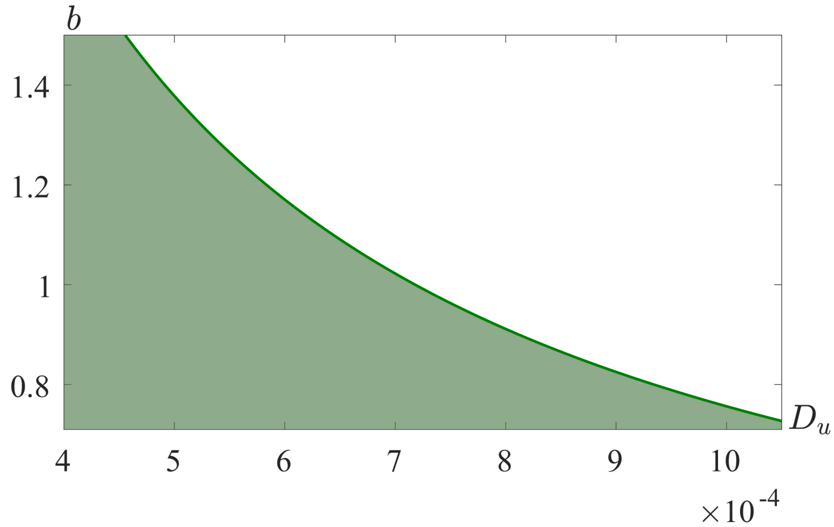


Рисунок 3.13 — Бифуркационная диаграмма системы (3.2.1), (3.1.2) в координатах (D_u, b) с выделенной параметрической зоной неустойчивости Тьюринга при $a = d = e = 0.5$, $c = 1$ и $D_v = 0.02$

При $\varepsilon = 0$ (без воздействия случайных шумов) в параметрической зоне тьюринговской неустойчивости формируются волнообразные структуры-аттракторы. Процесс формирования одного из таких структур из случайного состояния показан на рис. 3.14.

Случайное начальное состояние (рис. 3.14а) относительно быстро сглаживается (рис. 3.14б), после чего медленно формируются зоны повышенной и пониженной концентрации. Конечным состоянием является устойчивая концентрационная волна – тьюринговская структура (рис. 3.14в). Аналогично предыдущим главам, им присваиваются символы по пространственной частотности и фазе функции $u(x)$ вблизи левого края пространственного интервала $(x = 0)$. Таким образом, структуре на рис. 3.14в можно присвоить символ $1.5 \uparrow$.

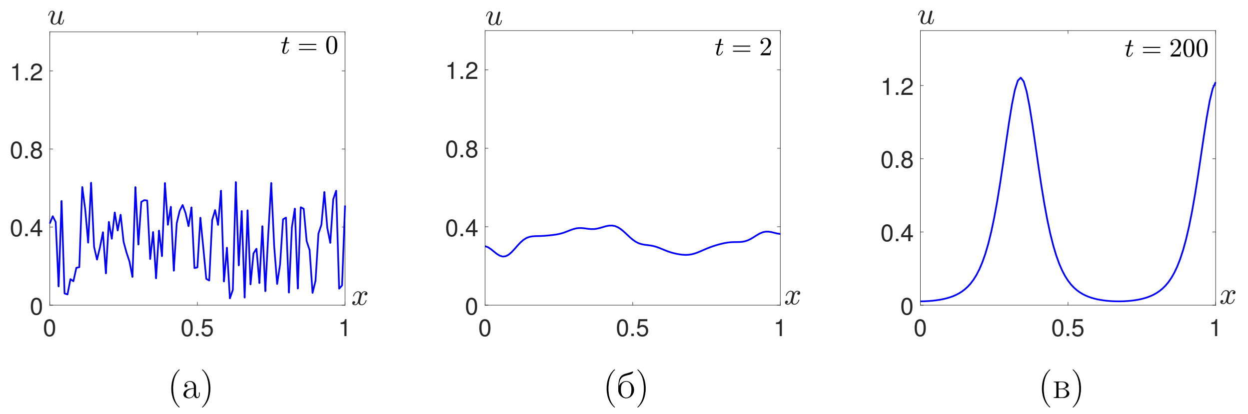


Рисунок 3.14 — Формирование пространственно-неоднородной структуры в системе (3.2.1), (3.1.2) при $a = d = e = 0.5$, $b = c = 1$, $D_u = 5 \times 10^{-4}$, $D_v = 0.02$, $\varepsilon = 0$: а) случайное начальное состояние $u(0, x)$ б) состояние $u(2, x)$, в) состояние $u(200, x)$

Динамику процессов в системе (3.2.1), (3.1.2) также можно представить в виде тепловой диаграммы (рис. 3.15). Пространственная переменная x изменяется вдоль вертикальной оси координат, время – вдоль горизонтальной, значение функции $u(t, x)$ представлено цветом. Для простоты на этой диаграмме представлена только функция $u(t, x)$, динамика функции $v(t, x)$ в целом схожа.

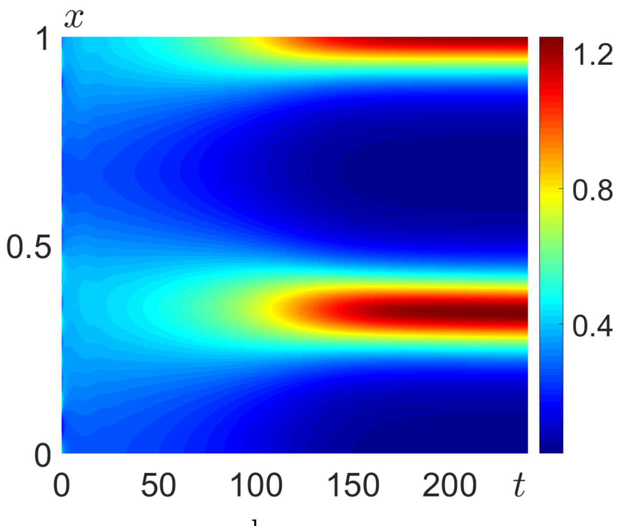


Рисунок 3.15 — Визуализация процесса формирования тьюринговской структуры 1.5 ↑ из случайного состояния в системе (3.2.1), (3.1.2) с помощью тепловой диаграммы $a = d = e = 0.5$, $b = c = 1$, $D_u = 5 \times 10^{-4}$, $D_v = 0.02$, $\varepsilon = 0$

В предыдущих разделах демонстрировалась мультистабильность популяционной модели (3.2.1), (3.1.2). Система при $\varepsilon = 0$ генерирует один из нескольких сосуществующих структур-аттракторов в зависимости от своего начального состояния. При $D_u = 1.5 \times 10^{-4}$ и $D_v = 0.005$ вариацией начальных условий были получены структуры 3.5 ↑ и 3 ↑ (рис. 3.4) и их аналоги 3.5 ↓ и

3 $\downarrow$. При значениях коэффициентов диффузии $D_u = 5 \times 10^{-4}$ и $D_v = 0.02$ в системе сосуществуют структуры с обозначениями 1.5 $\uparrow$, 2 $\uparrow$ (рис. 3.16) и их аналоги – 1.5 $\downarrow$ и 2 $\downarrow$.

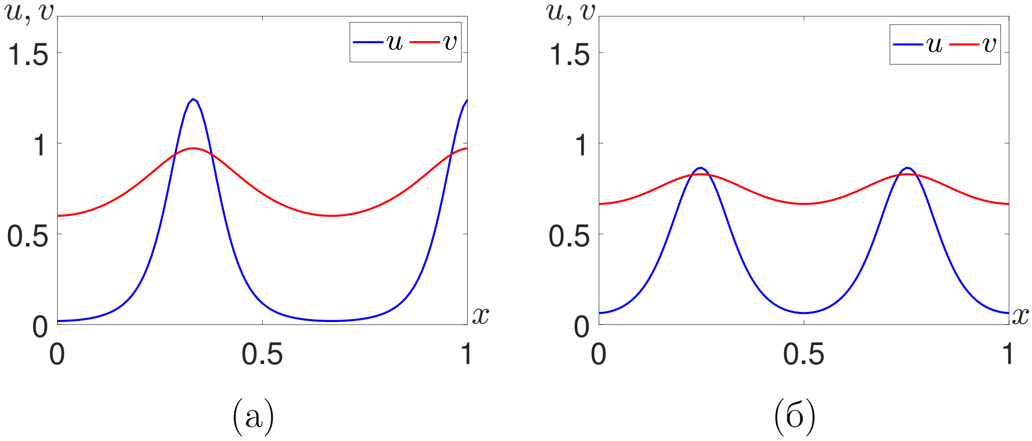


Рисунок 3.16 — Мультистабильность системы (3.2.1), (3.1.2) при $a = d = e = 0.5$, $b = c = 1$, $D_u = 5 \times 10^{-4}$, $D_v = 0.02$, $\varepsilon = 0$: а) структура 1.5 $\uparrow$, б) структура 2 $\uparrow$

Такая мультистабильность играет важную роль в понимании стохастической динамики. Как было показано ранее, под воздействием случайных шумов возможны переходы между сосуществующими структурами-аттракторами. В данном случае, можно наблюдать аналогичные сценарии стохастических переходов. Например, при $\varepsilon = 0.1$ в стохастической системе (3.2.1), (3.1.2) начальное состояние в виде тьюринговской структуры 1.5 $\uparrow$ разрушается, вместо него формируется зашумленный аналог структуры 2 $\uparrow$ (рис. 3.17).

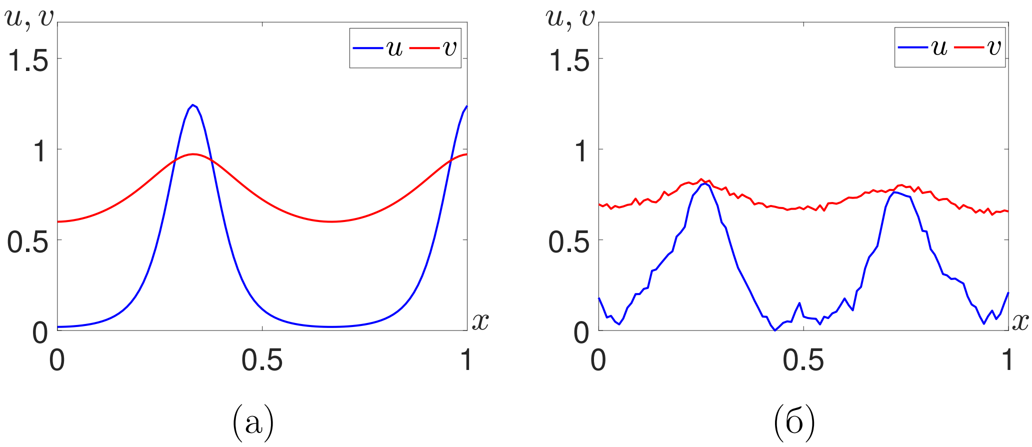
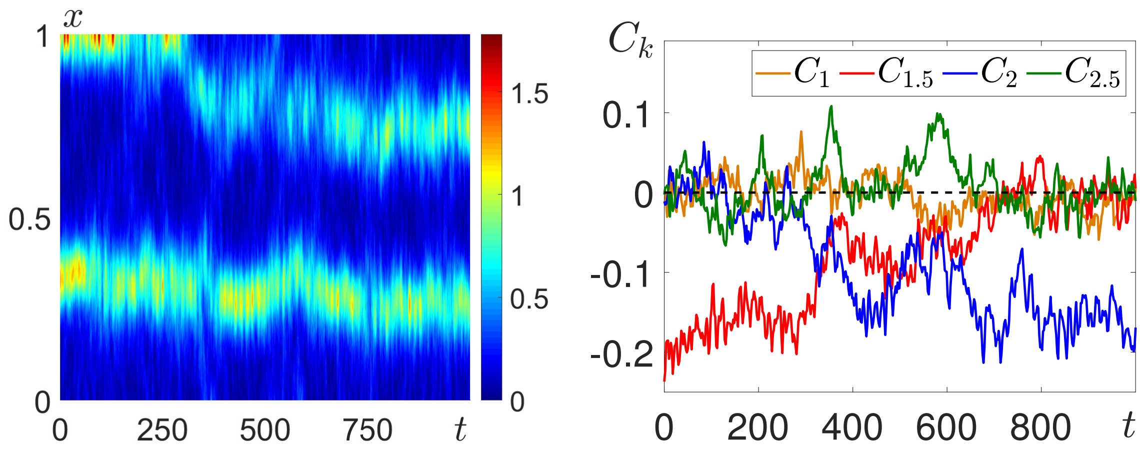


Рисунок 3.17 — Стохастический переход 1.5 $\uparrow \to$ 2 $\uparrow$ в системе (3.2.1), (3.1.2) при $a = d = e = 0.5$, $b = c = 1$, $D_u = 5 \times 10^{-4}$, $D_v = 0.02$, $\varepsilon = 0.1$: а) начальное состояние – структура 1.5 $\uparrow$, б) конечное состояние

Визуализация динамики процесса перехода представлена на рис. 3.18а в виде тепловой диаграммы. Визуально отслеживать изменение частотности в процессе моделирования часто бывает затруднительно, особенно если есть необходимость фиксировать факт перехода во время вычислений. В дополнение к таким графикам также удобно использовать волновые коэффициенты (3.3.1).

$$C_k(t) = \int_0^1 u(t,x)\cos(2\pi xk)\,dx \tag{3.3.1}$$

Такой подход позволяет иметь некоторый набор характеристик, говорящий о том, какая частота наиболее выражена в текущем состоянии системы. Например, доминирующее абсолютное значение $C_{1.5}(t)$ говорит о том, что состояние на момент времени t близко к косинусоиде с волновым числом $k = 1.5$ (полторы длины волны на интервале $[0,\,1]$). Динамика волновых коэффициентов для процесса перехода $1.5\uparrow\to 2\uparrow$ показана на рис. 3.18б.



(а) (б)

Рисунок 3.18 — Стохастический переход $1.5\uparrow\to 2\uparrow$ в системе (3.2.1), (3.1.2) при $a = d = e = 0.5$, $b = c = 1$, $D_u = 5\times10^{-4}$, $D_v = 0.02$, $\varepsilon = 0.1$: а) временная динамика $u(t,\,x)$, б) динамика некоторых волновых коэффициентов C_k

На диаграммах временной динамики на рис. 3.18 можно выделить начальный этап процесса, когда отчетливо видно структуру $1.5\uparrow$. Об этом также говорит тот факт, что $C_{1.5}$ на этом промежутке времени имеет наибольшее абсолютное значение, остальные коэффициенты остаются вблизи нуля. Примерно с $t\approx 250$ $C_{1.5}$ начинает стремиться к нулю, а коэффициенты C_2 и $C_{2.5}$ начинают от него удаляться. На тепловой диаграмме (рис. 3.18а) видно, что в этот момент времени исходное состояние начинает постепенно разрушаться. На момент $t\approx 400$ волновой коэффициент $C_{1.5}$ окончательно теряет преобладание, структура 1.5 ↑ разрушена под воздействием случайных возмущений. Наконец, начиная с $t \approx 600$ отчетливо заметно преобладание коэффициента C_2, остальные коэффициенты колеблются около нуля, состояние системы теперь больше похоже на структуру 2 ↑. Идея мониторинга процессов перехода с помощью такого подхода заложена в основу дальнейших шагов анализа чувствительности тьюринговских структур.

В предыдущих разделах было показано как под воздействием случайных шумов система удаляется от структуры-аттрактора, формируя таким образом случайное состояние. Решения стохастической системы (3.2.1), (3.1.2) при $\varepsilon > 0$ и начальным состоянием в виде некоторой тьюринговской структуры с компонентами $\bar{u}(x)$, $\bar{v}(x)$ формирует некоторое вероятностное распределение вокруг нее. Пример такого распределения для структуры 1.5 ↑ показан на рис. 3.19а. Жирная кривая показывает функцию $\bar{u}(x)$ структуры 1.5 ↑, множество тонких кривых – функции $u^{\varepsilon}(t,\ x)$ состояний полученных в серии численных экспериментов. График на рис. 3.19б. показывает среднеквадратическое отклонение этих кривых (3.3.2) и дополняет информацию о распределении случайных состояний.

$$\mathcal{S}_u(x,\varepsilon) = \mathrm{E}(u^{\varepsilon}(t{,}x) - \bar{u}(x))^2, \quad \mathcal{S}_v(x,\varepsilon) = \mathrm{E}(v^{\varepsilon}(t{,}x) - \bar{v}(x))^2. \tag{3.3.2}$$

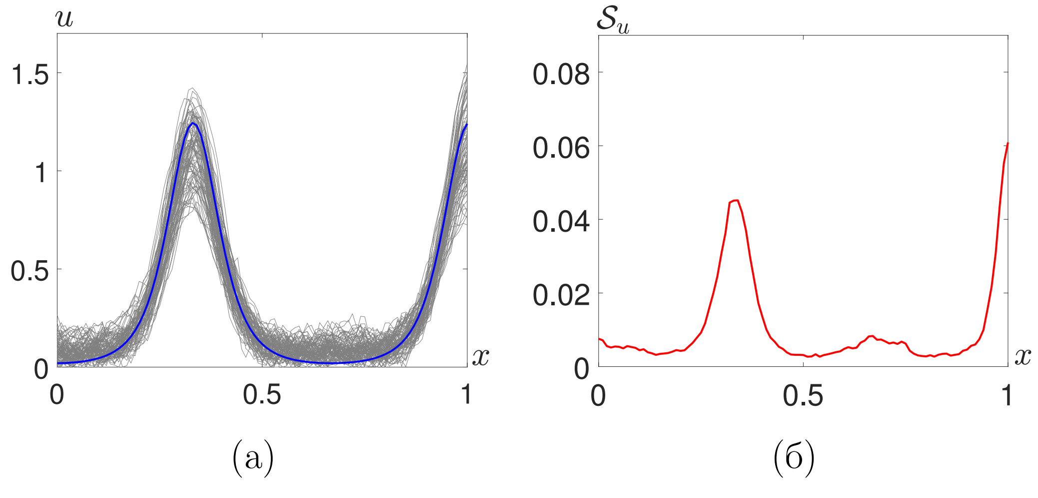


Рисунок 3.19 — Вероятностное распределение (а) и среднеквадратическое отклонение (б) случайных состояний вокруг тьюринговской структуры 1.5 ↑ в системе (3.2.1), (3.1.2) при $a = d = e = 0.5$, $b = c = 1$, $D_u = 5 \times 10^{-4}$, $D_v = 0.02$, $\varepsilon = 0.1$

Также среднеквадратическое отклонение $\mathcal{S}_u(x,\varepsilon)$ структур 1.5 ↑ и 2 ↑, полученное из результатов стохастического моделирования при $\varepsilon = 10^{-5}$ показано на рис. 3.20. Как и в примерах из предыдущих разделов, $\mathcal{S}_u(x,\varepsilon)$ –

неоднородная функция. Из этого следует, что помимо очевидного различия степени влияния случайных шумов у разных тьюринговских структур существует различие чувствительностей отдельных частей одной и той же структуры. Интенсивность шума в этой серии численных экспериментов уменьшена, чтобы исключить возможные стохастические переходы. Количество повторов эксперимента и, соответственно, случайных состояний в выборке увеличено с целью получения более точной статистики.

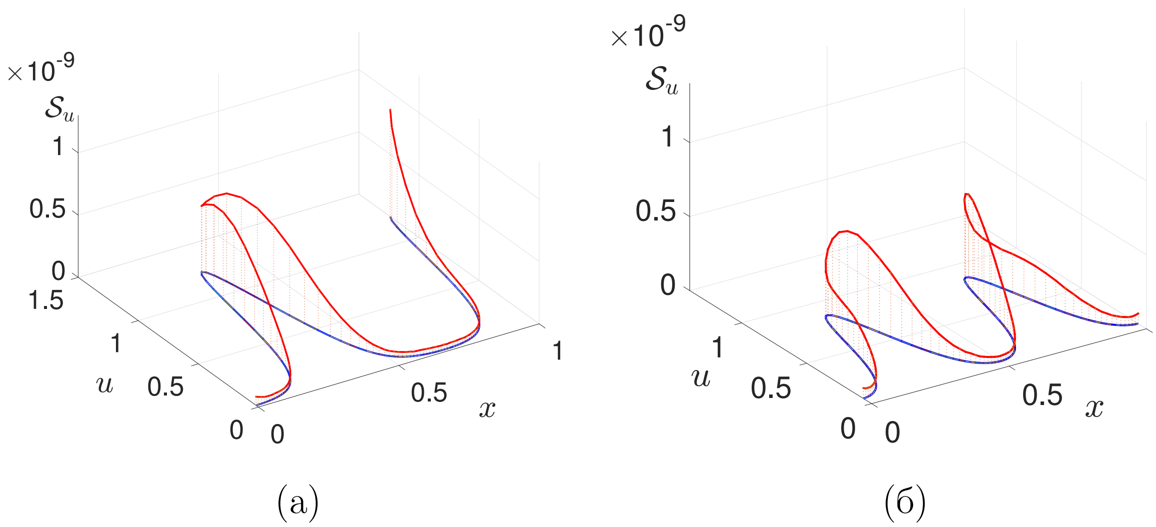


Рисунок 3.20 — Среднеквадратическое отклонение случайных состояний вокруг тьюринговских структур 1.5 ↑ (а) и 2 ↑ (б) в системе (3.2.1), (3.1.2) при $a = d = e = 0.5$, $b = c = 1$, $D_u = 5 \times 10^{-4}$, $D_v = 0.02$, $\varepsilon = 10^{-5}$

Статистический подход дает хорошее описание среднеквадратического отклонения, однако, получение нужного количества случайных состояний для точной оценки может быть затратным. Дополнительные трудности вызывает тот факт, что эта оценка зависит от интенсивности шума ε. Как показано на рис. 3.17, большая интенсивность приводит к стохастическим переходам. Если не исключить возможность перехода, в статистических данных накопится большое количество выбросов в виде состояний близких к другим структурам-аттракторам.

С помощью техники стохастической чувствительности можно построить аппроксимацию для среднеквадратического отклонения. На рис. 3.21 показана ФСЧ $\mathcal{W}_u$ структуры 1.5 ↑ и аппроксимация (3.3.3) ее среднеквадратического отклонения $\overline{\mathcal{S}}_u$ показанного на рис. 3.20а. Стоит отметить, что метод ФСЧ дает хорошую аппроксимацию с малой погрешностью.

$$
\begin{aligned}
\mathcal{S}_u(x, \varepsilon) &\approx \bar{\mathcal{S}}_u(x,\varepsilon) = \varepsilon^2 \mathcal{W}_u(x), \\
\mathcal{S}_v(x, \varepsilon) &\approx \bar{\mathcal{S}}_v(x,\varepsilon) = \varepsilon^2 \mathcal{W}_v(x).
\end{aligned}
\tag{3.3.3}
$$

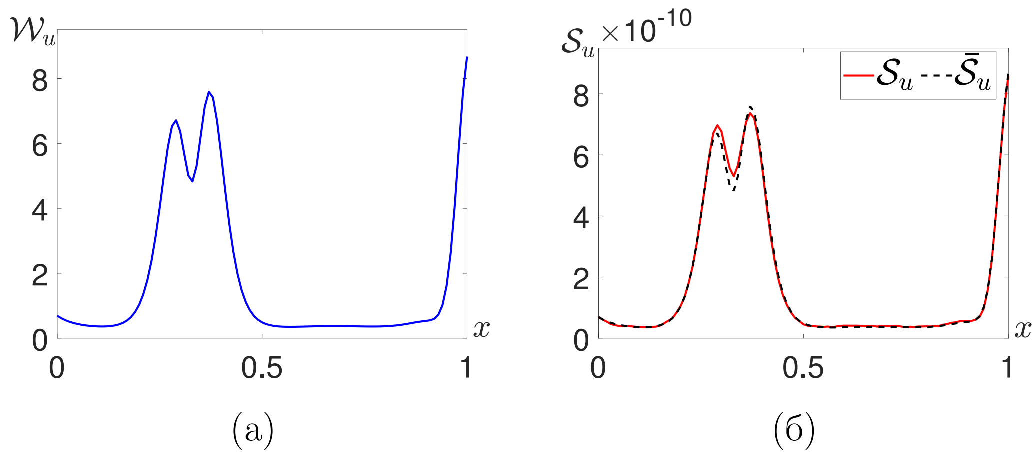


Рисунок 3.21 — Стохастическая система (3.2.1), (3.1.2) при $a = d = e = 0.5$, $b = c = 1$, $D_u = 5 \times 10^{-4}$, $D_v = 0.02$, $\varepsilon = 10^{-5}$: а) функция стохастической чувствительности $\mathcal{W}_u$ тьюринговской структуры $1.5\uparrow$ б) оценка $\overline{\mathcal{S}_u}$ среднеквадратического отклонения $\mathcal{S}_u$

Для упрощения визуализации результатов параметрического анализа стохастической чувствительности введена норма $||\mathcal{W}_u|| = max|\mathcal{W}_u(x_i)|$. На рис. 3.21 показана вариация $||\mathcal{W}_u||$ структур $1.5\uparrow$ и $2\uparrow$ на некотором интервале значений параметра b. Все остальные параметры остаются без изменений.

Изменение параметра влияет на максимум ФСЧ. Для структуры $1.5\downarrow$ значение $||\mathcal{W}_u||$ монотонно убывает, что говорит о меньшей чувствительности к случайным шумам. Для структуры $2\downarrow$ картина другая: максимум ФСЧ $||\mathcal{W}_u||$ монотонно убывает, а затем резко возрастает в окрестностях $b = 1.2$. Очень похожий результат был получен и в разделе 3.2 (рис. 3.11) и он был связан с выходом на границу интервала устойчивости изучаемой тьюринговской структуры. Ожидается, что именно в этих параметрических зонах переходы от структуры $2\uparrow$ к менее чувствительным состояниям системы будут заметно чаще при меньшей интенсивности шума.

Рассмотрим теперь, как техника ФСЧ может быть использована в исследовании стохастических переходов между сосуществующими структурами-аттракторами. Для этого необходима дополнительная информация о бассейнах притяжения аттракторов. В моделях нелинейной динамики из двух обыкновенных дифференциальных уравнений аттракторы, доверительные интервалы и бассейны притяжения наносятся на фазовую плоскость. Добавление всего одного уравнения заметно усложняет визуализацию и анализ, поскольку

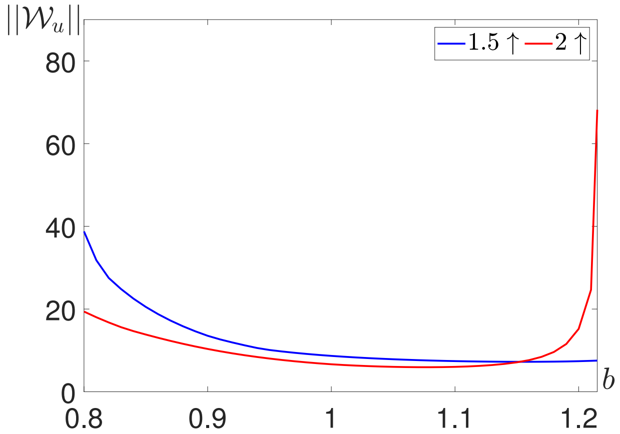


Рисунок 3.22 — Вариация максимума ФСЧ $||\mathcal{W}_u||$ структур 1.5 ↑ и 2 ↑ системы (3.2.1), (3.1.2) в зависимости от b при фиксированных $a = d = e = 0.5$, $c = 1$, $D_u = 5 \times 10^{-4}$, $D_v = 0.02$

фазовое пространство становится трехмерным. Однако, существуют интерактивные программные решения, позволяющие работать и с такими объектами.

В моделях реакции-диффузии с пространственными переменными фазовое пространство становится еще на порядок сложнее. Применение дискретизаций пространства по методу прямых и сведение системы уравнений в частных производных к соответствующей системе ОДУ не упрощает задачу, так как количество уравнений слишком велико, а значит и фазовое пространство имеет очень большую размерность.

Для сравнительной оценки бассейнов притяжения структур-аттракторов в распределенных системах предложен следующий метод. Поскольку тьюринговская структура получена методом численного моделирования, она является вектором из значений переменных в многомерном пространстве возможных состояний некоторой дискретизации системы. Между двумя точками, соответствующими структурам 1.5 ↑ и 2 ↑ можно провести отрезок и на нем приблизительно отметить границу между их бассейнами притяжения в этом выбранном направлении.

В следующей серии экспериментов предложен следующий метод определения начального состояния системы (3.2.1), (3.1.2). При этом, моделирование проходит без шума ($\varepsilon = 0$). Пусть функции $u_{1.5}(x)$ и $v_{1.5}(x)$ – компоненты структуры 1.5 ↑, а $u_2(x)$ и $v_2(x)$ – компоненты структуры 2 ↑. Рассмотрены следующие линейные комбинации этих функций (3.3.4):

$$\begin{aligned} u(0, x) &= ku_{1.5}(x) + (1-k)u_2(x), \\ v(0, x) &= kv_{1.5}(x) + (1-k)v_2(x). \end{aligned} \tag{3.3.4}$$

Параметр k изменяется на отрезке $[0,\ 1]$ для каждого значения b. Можно заметить, что состояние при $k = 0$ соответствует структуре $2\uparrow$, а при $k = 1$ – структуре $1.5\uparrow$. Для каждого промежуточного значения k проводится численный эксперимент с соответствующими начальным условиями с фиксированным временем ($t = 1000$). Для полученного конечного состояния процесса, измеряется его евклидово расстояние до каждой из рассмотренных тьюринговских структур. Клетка на пересечении b и k красится в цвет соответствующий структуре, более близкой к конечному состоянию. Результат серии экспериментов оформлен в виде диаграммы в координатах $(k,\ b)$ (рис. 3.23). Опираясь на этот результат, можно сравнить объемы бассейнов притяжения при разных значениях параметра b.

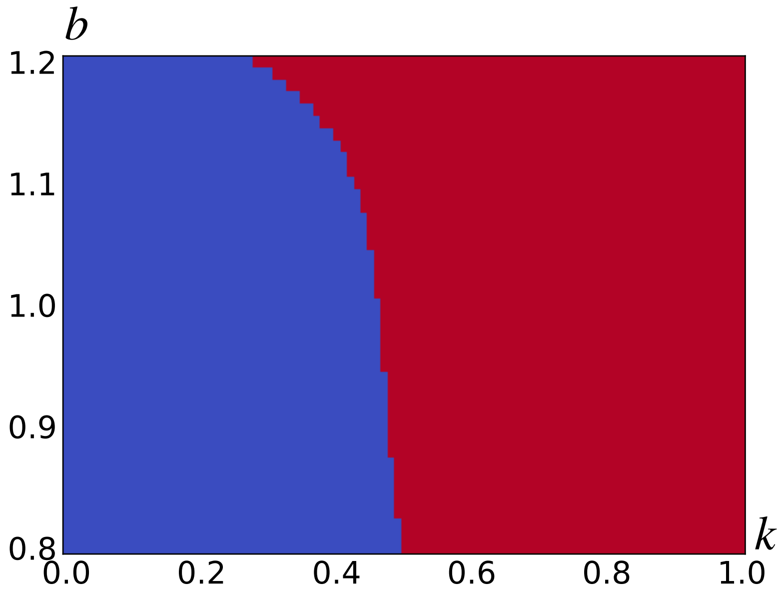


Рисунок 3.23 — Бассейны притяжения тьюринговских структур $1.5\uparrow$ (красный) и $2\uparrow$ (синий) системы (3.2.1), (3.1.2) при $a = d = e = 0.5$, $c = 1$, $D_u = 5 \times 10^{-4}$, $D_v = 0.02$

Детерминированный анализ бассейнов притяжения (рис. 3.23) показывает, что бассейн структуры $1.5\uparrow$ шире чем у структуры $2\uparrow$. В свою очередь это может говорить о том, что случайное состояние детерминированной системы (3.2.1), (3.1.2) без шума ($\varepsilon = 0$) чаще будет двигаться в сторону структуры $1.5\uparrow$. Рост параметра b приводит к сужению бассейна притяжения структуры $2\uparrow$. Критические значения k формируют границу между двумя бассейнами.

В анализе стохастических переходов между аттракторами учитывается взаимное расположение бассейнов притяжения и доверительных интервалов. В системе со случайными шумами ($\varepsilon > 0$), среднеквадратическое отклонение $\mathcal{D}$ случайного состояния от аттрактора вдоль направления, заданного единичным вектором $\bar{c}$, можно оценить по формуле (3.3.5):

$$\mathcal{D} = \varepsilon^2 \bar{c}^T W \bar{c}. \tag{3.3.5}$$

Здесь ε – интенсивность шума стохастической системы, W – матрица чувствительности изучаемого аттрактора.

Пусть в системе существуют два аттрактора A и B. По правилу трех сигма, случайное состояние не покидает аттрактор на расстояние большее чем 3σ с вероятностью 0.997, где $\sigma = \sqrt{\mathcal{D}}$. Опираясь на это правило, можно оценить критическое значение ε_A, соответствующее переходу случайного состояния от аттрактора A на достаточное расстояние, чтобы оказаться в пределах бассейна притяжения аттрактора B. Предполагается, что при интенсивности шума $\varepsilon > \varepsilon_A$, доверительный интервал аттрактора A пересекается с бассейном притяжения аттрактора B и вероятность перехода станет ненулевой.

Пусть r – евклидово расстояние между аттракторами A и B, k^* – значение k, соответствующее границе между бассейнами притяжения этих аттракторов. Это значение было найдено в рамках эксперимента на рис. 3.23 и показано как граница между областями разного цвета. Критическое значение интенсивности шума ε_A может быть оценено по формуле (3.3.6):

$$\varepsilon_A = \frac{rk^*}{3\sqrt{\bar{c}^T W_A \bar{c}}}. \tag{3.3.6}$$

Единичный вектор $\bar{c}$ коллинеарен прямой, проходящей через аттракторы A и B.

Сравнение критических значений интенсивности шума структур-аттракторов системы (3.2.1), (3.1.2) для некоторых значений параметра b приведено в Таблице 4. В некоторой степени этот результат коррелирует с рис. 3.22, так как критическая чувствительность структуры $2\uparrow$ ($\varepsilon_{2\uparrow}$) резко убывает, что говорит о возрастании ее стохастической чувствительности. Похожий результат был показан на рис. 3.23: для меньших значений параметра b размеры бассейнов притяжения структур $1.5\uparrow$ и $2\uparrow$ сопоставимы, например $k^* \approx 0.49$ при $b = 0.8$. Для больших значений, особенно для $b > 1.1$, граница между бассейнами смещается в сторону структуры $2\uparrow$, что говорит об уменьшении объема бассейна притяжения.

Общая тенденция к уменьшению критической чувствительности при увеличении b связана с приближением к границе бифуркации Тьюринга, что несомненно влияет на устойчивость структур. Предполагается, что низкое

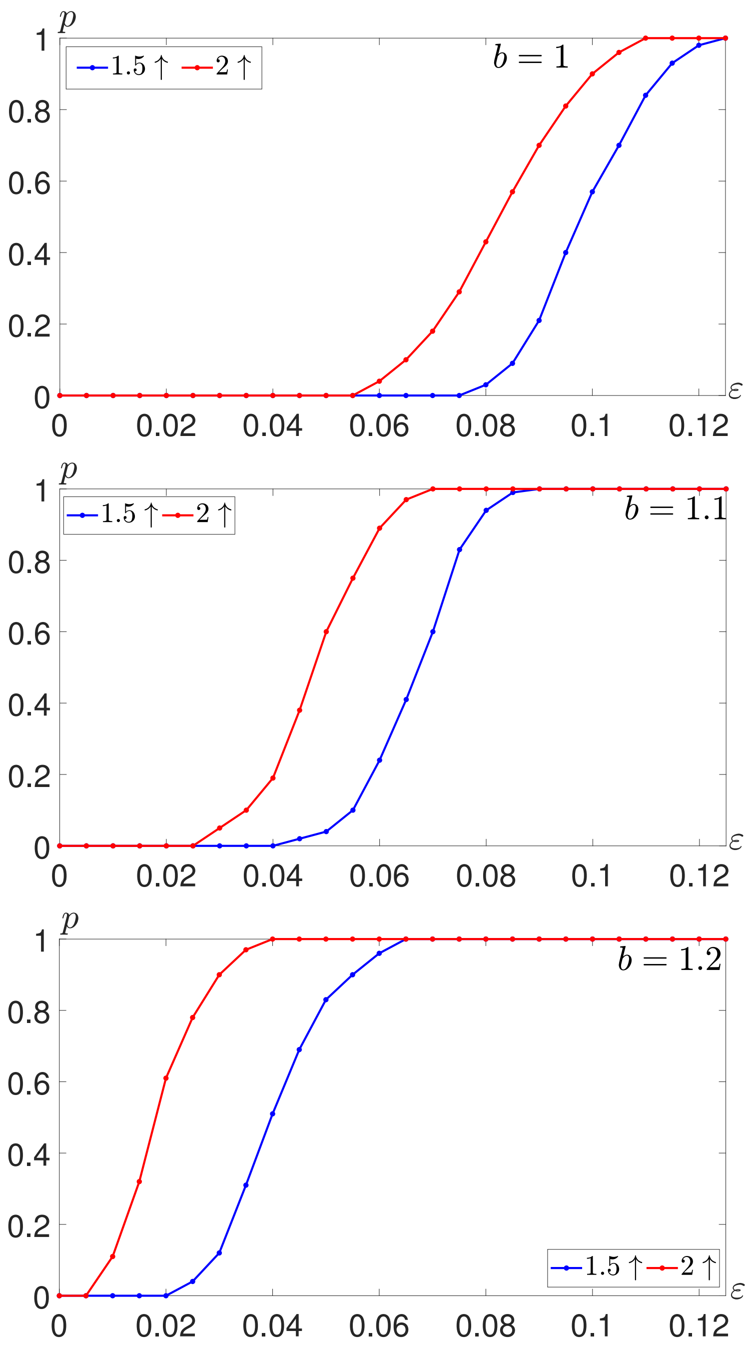
Таблица 4 — Критическая интенсивность шума для тьюринговских структур

b	k^*	$\varepsilon_{1.5\uparrow}$	$\varepsilon_{2\uparrow}$
1.0	0.46	0.154	0.107
1.1	0.42	0.103	0.052
1.2	0.29	0.056	0.009

значение критической чувствительности говорит о том, что структура чаще разрушается под воздействием шума. Для того чтобы проверить это предположение была проведена серия статистических экспериментов. Для $b_1 = 1$, $b_2 = 1.1$ и $b_3 = 1.2$ проводится стохастическое моделирование системы (3.2.1), (3.1.2), где в качестве начального состояния выбраны структуры $1.5 \uparrow$ и $2 \uparrow$, а интенсивность шума варьируется.

В каждом эксперименте отслеживается динамика волновых коэффициентов (3.3.1), а именно $C_{1.5}$, если начальное состояние – структура $1.5 \uparrow$ или C_2, если структура $2 \uparrow$. В начале эксперимента соответствующий волновой коэффициент обладает наибольшим абсолютным значением. Если в процессе моделирования этот коэффициент теряет преобладание, считается, что тьюринговская структура начала разрушаться под воздействием случайных возмущений. Если на момент времени $t = 1000$ преобладание утеряно не было, считается, что разрушение не произошло, а искажения формы незначительны. Для каждого значения ε проведено одинаковое число симуляций с каждой из тьюринговских структур. Количественная доля процессов, в которых было зафиксировано разрушение тьюринговской структуры представляет собой эмпирическую вероятность. Зависимость такой оценки вероятности стохастического разрушения от интенсивности шума ε, полученная в результате эксперимента, показана на рис. 3.24.

Полученный результат говорит о том, что с ростом параметра b минимальное значение интенсивности шума ε, необходимое для разрушения структуры, уменьшается. Также можно заметить, что в целом структура $2 \uparrow$ чаще подвергалась разрушению чем структура $1.5 \uparrow$. Так, например, в случае $b = 1$ (рис. 3.24a) при $\varepsilon \approx 0.08$ структура $2 \uparrow$ была разрушена почти в половине случаев, в то время как оценка вероятности стохастического разрушения структуры $1.5 \uparrow$ была невелика. Для $b = 1.1$ и $b = 1.2$ разрыв становится еще более отчетливым. Ожидается, что разрушение структуры $2 \uparrow$ с последующим формированием подобия структуры $1.5 \uparrow$ будут происходить чаще. Более того, в некотором



(а)

(б)

(в)

Рисунок 3.24 — Статистическая оценка вероятности стохастического разрушения тьюринговских структур системы (3.2.1), (3.1.2) при $a = d = e = 0.5$, $c = 1$, $D_u = 5 \times 10^{-4}$, $D_v = 0.02$ в зависимости от интенсивности шума ε: а) $b = 1$, б) $b = 1.1$, в) $b = 1.2$

диапазоне интенсивности шума переходы от структуры $1.5\uparrow$ к структуре $2\uparrow$ будут односторонними.

Сложно оценить точность оценок проведенных в рамках этого подхода, так как в ходе рассуждений для сложных объектов были допущены довольно сильные упрощения. Тем не менее он дает понимание об общей картине и позволяет в определенной мере предсказывать поведение стохастической модели.

Так, например, пусть $b = 1$ и $\varepsilon = 0.1$. Судя по оценке вероятности приведенной в таблице 4, стохастическое разрушение структуры $2\uparrow$ практически гарантировано ($\varepsilon \approx \varepsilon_{2\uparrow} = 0.107$). Для структуры $1.5\uparrow$ переход не гарантирован, но некоторая вероятность перехода есть, так как величина $\varepsilon = 0.1$ сопоставима с $\varepsilon_{1.5\uparrow} \approx 0.15$. Результаты моделирования на рис. 3.25 демонстрируют, что переходы между структурами-аттракторами могут проходить в обе стороны, как от $1.5\uparrow$ к $2\uparrow$ (рис. 3.24а), так и в обратную сторону (рис. 3.24б). Это подтверждается и статистическими данными на рис. 3.24а: вероятность разрушения структуры $2\uparrow$ близка к единице, а структура $1.5\uparrow$ была разрушена больше чем в половине численных экспериментов.

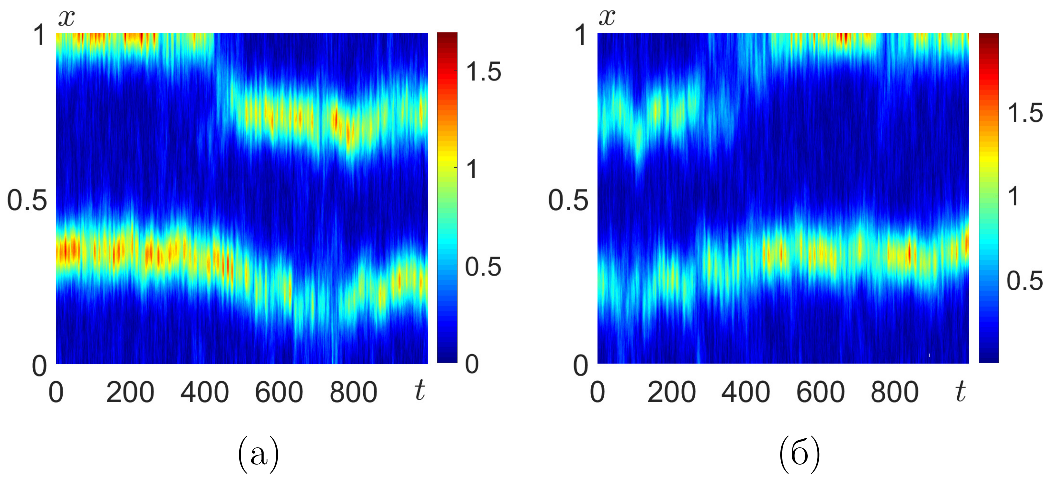


Рисунок 3.25 — Двухсторонние стохастические переходы в системе (3.2.1), (3.1.2) при $a = d = e = 0.5$, $c = 1$, $D_u = 5 \times 10^{-4}$, $D_v = 0.02$, $b = 1$, $\varepsilon = 0.1$: а) переход $1.5\uparrow \rightarrow 2\uparrow$ б) переход $2\uparrow \rightarrow 1.5\uparrow$

Пример другой динамики стохастических переходов показан на рис. 3.26 для $b = 1.2$ и $\varepsilon = 0.02$. Здесь значения критической интенсивности тьюринговских структур – $\varepsilon_{2\uparrow} \approx 0.009$ и $\varepsilon_{1.5\uparrow} \approx 0.056$. Различие этих величин существенно, из этого следует существование интервала ε, на котором структура $2\uparrow$ разрушится, а структура $1.5\uparrow$ останется без существенных изменений. Подобное можно предположить основываясь на результатах параметрических исследований функций стохастической чувствительности (рис. 3.22). Судя по статистике, представленной на рис. 3.24в, $\varepsilon = 0.02$ попадает в этот интервал, так как структура $1.5\uparrow$ ни разу не была разрушен в ходе экспериментов, в то время как $2\uparrow$ разрушался более чем в шестидесяти процентов случаев. Данные рассуждения указывают на то, что стохастические переходы будут проходить только в одну сторону, а именно от структуры $2\uparrow$ структуре $1.5\uparrow$.

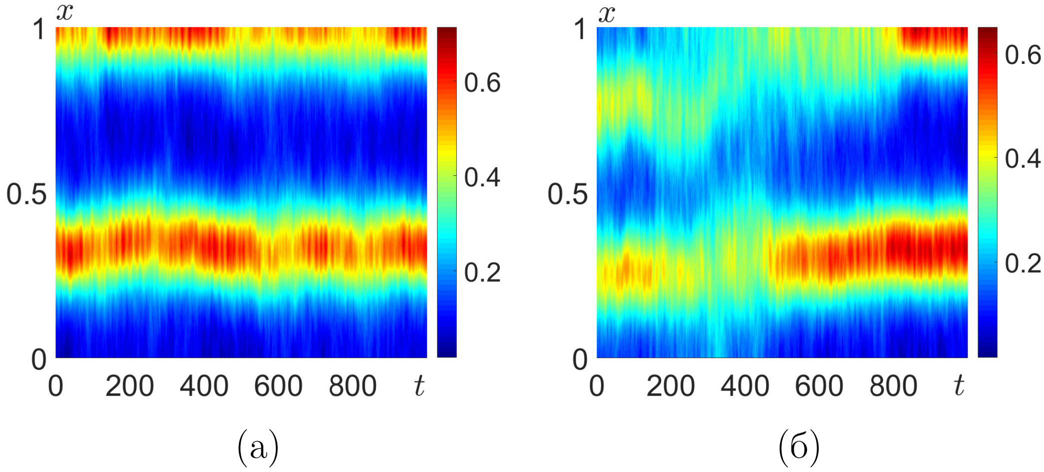


Рисунок 3.26 — Односторонний стохастический переход в системе (3.2.1), (3.1.2) при $a = d = e = 0.5$, $c = 1$, $D_u = 5 \times 10^{-4}$, $D_v = 0.02$, $b = 1.2$, $\varepsilon = 0.02$: а) переход $2 \uparrow \rightarrow 1.5 \uparrow$ б) отсутствие перехода от структуры $1.5 \uparrow$

Проведенное исследование показывает, что в пространственно-распределенных системах существует взаимосвязь трех ключевых объектов: бассейнов притяжения, доверительных интервалов и стохастических переходов. На этой связи основывается ФСЧ-анализ аттракторов и стохастических феноменов точечных моделей нелинейной динамики. Применение похожих концепций в исследовании пространственных моделей, несмотря на определенные затруднения, предлагает возможности исследования и предсказания их поведения.

Основные результаты главы

В этой главе была исследована модель популяционной динамики Левина–Сегеля, моделирующая взаимодействие фитопланктона (активатора) и зоопланктона, питающегося им (ингибитора). Точечная модель без дифузии имеет два равновесия, тривиальное и нетривиальное. Наряду с точечным нетривиальным равновесием можно рассматривать пространственно-однородное равновесие на предмет устойчивости.

Раздел 3.1 посвящен исследованию зоны неустойчивости однородного равновесия детерминированной пространственной модели (зона неустойчивости Тьюринга). В этой зоне формируются тьюринговские структуры в виде пар синфазных концентрационных волн определенной частотности. При приближении к параметрической границе бифуркации Тьюринга амплитуда этих волн равномерно уменьшается. Отдельное внимание уделено мультистабильности системы, а также исследована ее связь с параметрическими зонами устойчивости отдельных структур-аттракторов.

В разделе 3.2 исследование зон устойчивости структур дополняется параметрическим анализом стохастической чувствительности. Показано, что вблизи границы зоны устойчивости тьюринговская структура гораздо более чувствительна к шумам. Это подтверждается резким ростом среднеквадратического отклонения случайного состояния от структуры-аттрактора. Отдельное внимание уделяется аппроксимации распределения случайных состояний системы методом функций стохастической чувствительности. Данный подход позволяет проводить параметрический анализ чувствительности без необходимости сбора большого объема статистических данных.

Более детальный анализ связи стохастических переходов и чувствительности к шумам проведен в разделе 3.3. Здесь исследуется связь стохастической чувствительности структур и вероятности их разрушения под воздействием шума. Также демонстрируется сравнительный анализ объемов бассейнов притяжения. Результат указывает на то, что существует зависимость между этим объемом и вероятностью переходов, как и в нелинейных моделях заданных системами обыкновенных дифференциальных уравнений.

Результаты исследований, представленные в этой главе, опубликованы в работах [60, 61, 67, 68].

Глава 4. Тьюринговские структуры в модели термохимической кинетики

Интерес к исследованиям тепловых процессов, связанных с химическими реакциями, не угасает более ста лет. Как и изучение химических осцилляторов, подобных реакции Белоусова–Жаботинского [81, 83], исследование феноменов в моделях термохимической кинетики тесно связаны с неравновесной термодинамикой [84].

Одно из важнейших направлений в данной области – моделирование реакций и тепловых явлений протекающих в химических реакторах, в частности, реакторах с непрерывным перемешиванием. На практике это устройство представляет собой резервуар, в котором поддерживается некоторый химический процесс путем непрерывного поступления реагентов и вывода продуктов реакции, а также механизм для поддержания постоянной температуры. Такие реакторы широко применяются в фармацевтике [108], химической промышленности [109] и исследовательских лабораториях, что объясняет повышенный интерес к анализу их свойств.

Первые работы о моделях реакторов с непрерывным перемешиванием, анализе устойчивости и мультистабильности были опубликованы в начале XX века, в частности одна из ранних работ академика Семенова 1928 года [110], однако до середины столетия тема математических моделей химических реакторов не находила должного внимания исследователей.

Несомненный вклад в этой области принадлежит американскому химику Амундсону. В 1955 выходит его статья о модели реактора [111], в которой проведен анализ локальной устойчивости по Ляпунову с описанием фазовых портретов. В 1957 выходит более подробная статья в соавторстве с британским химиком Арисом [112] о бифуркационном анализе модели химического реактора, названной в честь исследователей. В этом труде проведен анализ предельных циклов и описаны параметрические зоны их возникновения.

На сегодняшний день существует широкий спектр подробно изученных моделей термохимической кинетики [113—115]. Особенно интересна стохастическая динамика, чувствительность аттракторов и индуцированные шумом переходы между рабочими режимами.

В ходе диссертационного исследования одна из моделей термохимической кинетики взята за основу системы реакции-диффузии и на ее примере рассмотрена стохастическая динамика тьюринговских структур.

4.1 Тьюринговские структуры и мультистабильность

В этой главе рассмотрен пространственно-распределенный вариант термохимической модели Уппала–Рэя [116] с диффузией, определенный системой уравнений параболического типа (4.1.1)

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= -u + D(1-u)e^v + D_u \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \\ \frac{\partial v}{\partial t} &= -v + DB(1-u)e^v - \beta v + D_v \frac{\partial^2 v}{\partial x^2}. \end{aligned} \tag{4.1.1}$$

Переменные системы – функции $u(t, x)$ и $v(t, x)$ описывают безразмерную концентрацию смеси реагентов и температуру соответственно. Рост концентрации замедляет реакцию, в то время как повышение температуры ускоряет ее. Соответственно, концентрация является компонентом-ингибитором, а температура – активатором. Положительные параметры β, B и D (число Дамкёлера) регулируют термохимические процессы системы. Пространственная переменная x изменяется в пределах интервала $[0, 1]$. В качестве граничных условий краевой задачи приняты условия непроницаемости границ (4.1.2):

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial x}(t, 0) &= \frac{\partial u}{\partial x}(t, 1) = 0, \\ \frac{\partial v}{\partial x}(t, 0) &= \frac{\partial v}{\partial x}(t, 1) = 0. \end{aligned} \tag{4.1.2}$$

Точечная модель описывает динамику реактора с непрерывным перемешиванием. Реагенты регулярно поступают в реактор, а продукты постоянно из него выводятся. Таким образом, в реакторе непрерывно поддерживается химическая реакция. В этом исследовании значения параметров $B = 15$ и $\beta = 3$ зафиксированы. Диаграмма аттракторов точечной модели ($D_u = D_v = 0$) в зависимости от числа Дамкёллера D представлена на рис. 4.1.

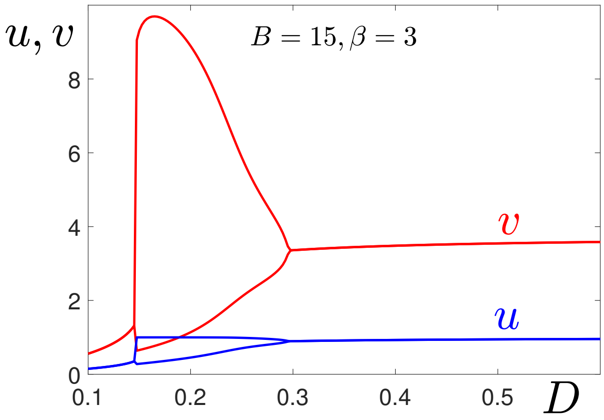


Рисунок 4.1 — Аттракторы системы (4.1.1) при $B = 15$, $\beta = 3$, $D_u = D_v = 0$ в зависимости от числа Дамкёллера D

Из диграммы видно, что аттрактором системы может быть как равновесие, так и предельный цикл. Так, например, при $D = 0.5$, система имеет точку равновесия $(\bar{u},\, \bar{v})$, где $\bar{u} \approx 0.945$, $\bar{v} \approx 3.545$. Далее в этом исследовании считается, что $D > 0.3$, таким образом, динамика системы будет рассмотрена в условиях когда существует единственная точка равновесия и нет предельных циклов.

В системе (4.1.1), (4.1.2) с диффузией однородное равновесие ($u(t,\, x) = \bar{u}$ и $v(t,\, x) = \bar{v}$) неустойчиво если выполнено условие (4.1.3). Зная значения $\bar{u}$ и $\bar{v}$ точки равновесия можно найти параметрическую область неустойчивости и границу бифуркации Тьюринга.

$$\frac{D_u}{D_v} > \left(\frac{\sqrt{f_u(\bar{u},\, \bar{v})g_v(\bar{u},\, \bar{v}) - f_v(\bar{u},\, \bar{v})g_u(\bar{u},\, \bar{v})} + \sqrt{-f_v(\bar{u},\, \bar{v})g_u(\bar{u},\, \bar{v})}}{g_v(\bar{u},\, \bar{v})}\right)^2$$
$$f(u,\, v) = -u + D(1-u)e^v \tag{4.1.3}$$
$$g(u,\, v) = -v + DB(1-u)e^v - \beta v$$

Как видно из неравенства (4.1.3), для нахождения точной границы бифуркации Тьюринга необходимо знать значения $\bar{u}$ и $\bar{v}$. Например, для $D = 0.5$ минимальное значение отношения коэффициентов диффузии $\dfrac{D_u}{D_v} \approx 5.27$. Для системы (4.1.1), (4.1.2) при фиксированных $B = 15$, $\beta = 3$ и изменяющемся числе Дамкёллера D, зона неустойчивости Тьюринга изображена на рис. 4.2. Точка равновесия системы (4.1.1) найдена приближенно, поскольку для нахождения точных $\bar{u}$ и $\bar{u}$ значений необходимо решить систему трансцендентных уравнений. Бифуркационные значения параметров и кривая, определяющая зону неустойчивости Тьюринга также найдены приближенно.

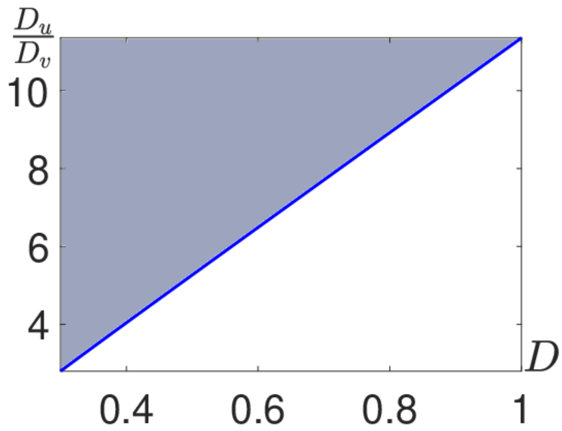


Рисунок 4.2 — Зона неустойчивости Тьюринга и бифуркационная граница для системы (4.1.1), (4.1.2) при $B = 15$, $\beta = 3$

При значении коэффициента диффузии активатора $D_v = 0.01$ критическое значение интенсивности диффузии ингибитора $D_u^* \approx 0.053$. При больших значениях наблюдается формирование тьюринговских структур. Процесс формирования такой структуры для $D_v = 0.01$ $D_u = 0.08 > D_u^*$ показан на рис. 4.3.

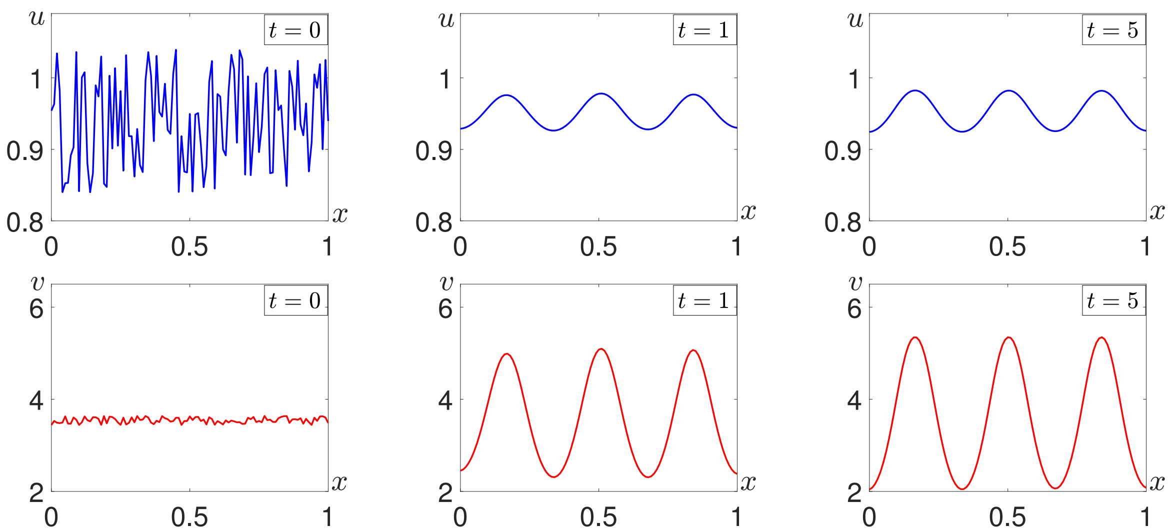
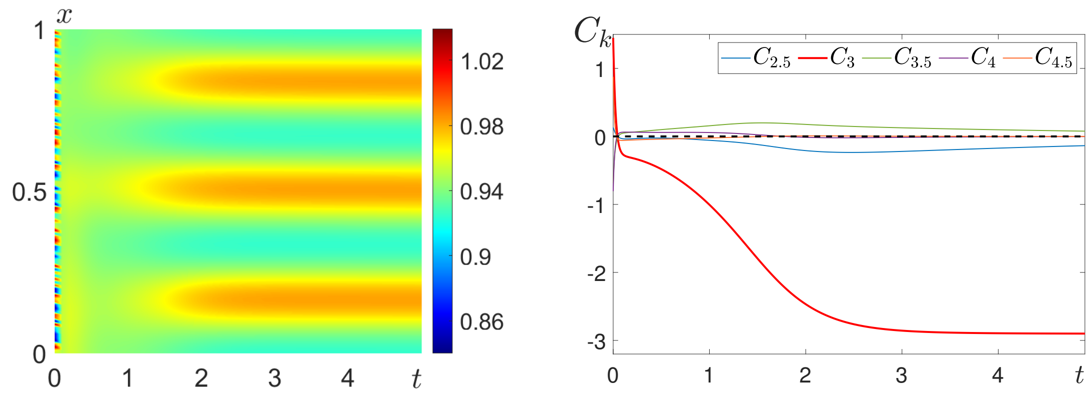


Рисунок 4.3 — Формирование тьюринговской структуры в системе (4.1.1), (4.1.2) из случайного начального состояния при $B = 15$, $\beta = 3$, $D = 0.5$, $D_v = 0.01$ и $D_v = 0.08$

Тьюринговская структура в системе (4.1.1), (4.1.2) – пара синфазных концентрационных волн. Как и в предыдущих главах, каждой структуре присвоен символ в соответствии его пространственной частотности и фазе на левой границе интервала (возрастание ($\uparrow$) или убывание ($\downarrow$) в точке $x = 0$). Так, структуре на рис. 4.3 можно присвоить символ $3 \uparrow$.

Динамику системы также можно представить в виде цветовой диаграммы (рис. 4.4а). На ней вертикальная ось – ось пространственной переменной x, горизонтальная – ось времени, а цвет означает значение функции $u(t,\, x)$.

Поскольку структуры имеют вид концентрационных пространственных волн,



(а) (б)

Рисунок 4.4 — Формирование тьюринговской структуры в системе (4.1.1), (4.1.2) из случайного начального состояния при $B = 15$, $\beta = 3$, $D = 0.5$, $D_v = 0.01$ и $D_v = 0.08$: а) диаграмма пространственно-временной динамики $u(t,\, x)$, б) динамика некоторых гармонических коэффициентов C_k

их формирование может быть выявлено методами гармонического анализа, например, с помощью преобразований Фурье. В силу граничных условий (4.1.2), соответствующее решение системы дифференциальных уравнений можно представить в виде суммы собственных функций – косинусов. В связи с этим, в качестве дополнительной информации для цветовых диаграмм временной динамики применяется дискретное косинус-преобразование (4.1.4).

$$C_k(t) = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{i=0}^{N-1} u(t, x_i) \cos\left(\frac{(2i+1)k\pi}{2N}\right) \qquad (4.1.4)$$

На рис. 4.4б показан пример анализа динамики генерации с помощью коэффициентов $C_k(t)$. Все гармонические коэффициенты сходятся к нулю (пунктир на графике) кроме одного, а именно C_3, который стабилизируется далеко от нуля. Это, в свою очередь, говорит о формировании структуры с тремя длинами волны в пределах пространственного интервала – тьюринговской структуры с обозначением $3 \uparrow$.

В системе (4.1.1), (4.1.2) могут сосуществовать несколько разных устойчивых тьюринговских структур. Вид полученной структуры зависит от начального состояния системы. Для исследования возможных сосуществующих пространственных частот можно применить следующий метод вариации начального состояния (4.1.5).

$$u(0, x) = \bar{u} + j\gamma cos\big(2k\pi x\big)$$
$$v(0, x) = \bar{v} + j\gamma cos\big(2k\pi x\big) \qquad (4.1.5)$$

Это начальное состояние удовлетворяет граничным условиям (4.1.2), волновое число k может быть целым или полуцелым и соответствует числу длин волны в пределах пространственного интервала. Параметр j принимает значения 1 или -1 и определяет направление волны на границе интервала. Параметр γ устанавливает амплитуду концентрационных волн. Наконец, $\bar{u}$ и $\bar{v}$ соответствуют точке равновесия системы (4.1.1) при $D_u = D_v = 0$. Примеры тьюринговских структур, полученных из таких начальных условий в системе (4.1.1), (4.1.2) при $D_u = 0.08$ и $D_v = 0.01$, показаны на рис. 4.5. Им присвоены символы $2.5 \uparrow$ (рис. 4.5а), $3 \uparrow$ (рис. 4.5б) и $3.5 \uparrow$ (рис. 4.5в).

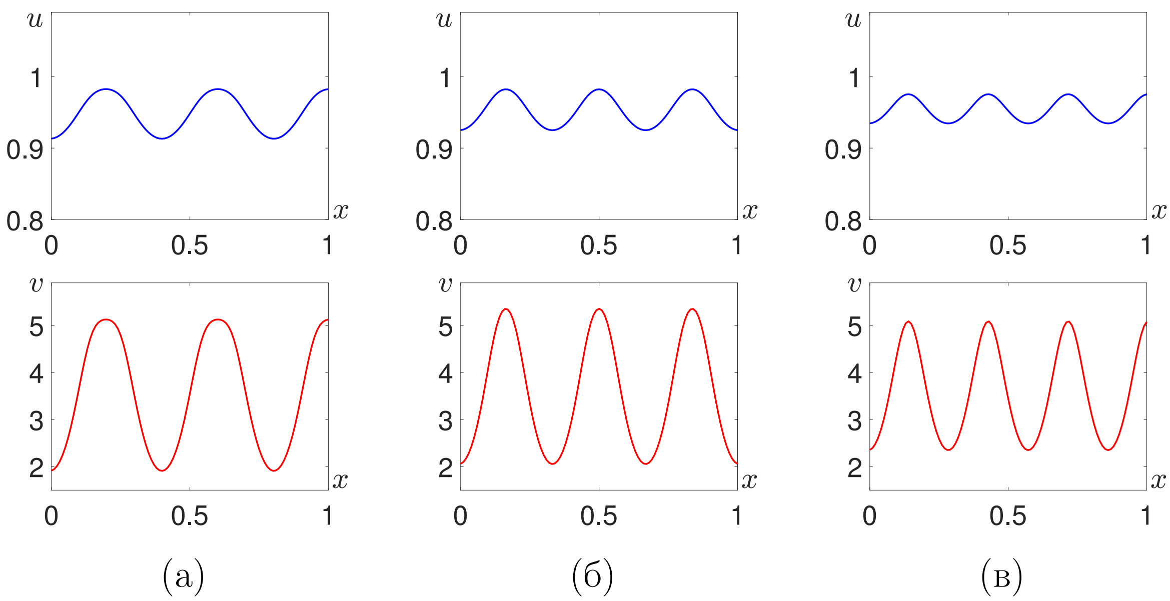


Рисунок 4.5 — Мультистабильность системы (4.1.1), (4.1.2) при $B = 15$, $\beta = 3$, $D = 0.5$, $D_v = 0.01$ и $D_v = 0.08$: а) структра $2.5 \uparrow$, б) структура $3 \uparrow$, в) структура $3.5 \uparrow$

Дополнительные примеры тьюринговских структур с другими пространственными частотами были получены при $D_u = 0.016$ и $D_v = 0.002$ и показаны на рис. 4.6. Отношение коэффициентов диффузии не меняется $\Big(\dfrac{D_u}{D_v} = 8\Big)$. Этим структурам можно присвоить символы $5.5 \uparrow$ (рис. 4.6а), $6 \uparrow$ (рис. 4.6б) и $6.5 \uparrow$ (рис. 4.6в) соответственно. На этих примерах видно, что уменьшение интенсивности диффузии активатора и ингибитора увеличивает пространственную частотность структур. В условие неустойчивости Тьюринга (4.1.3) входит

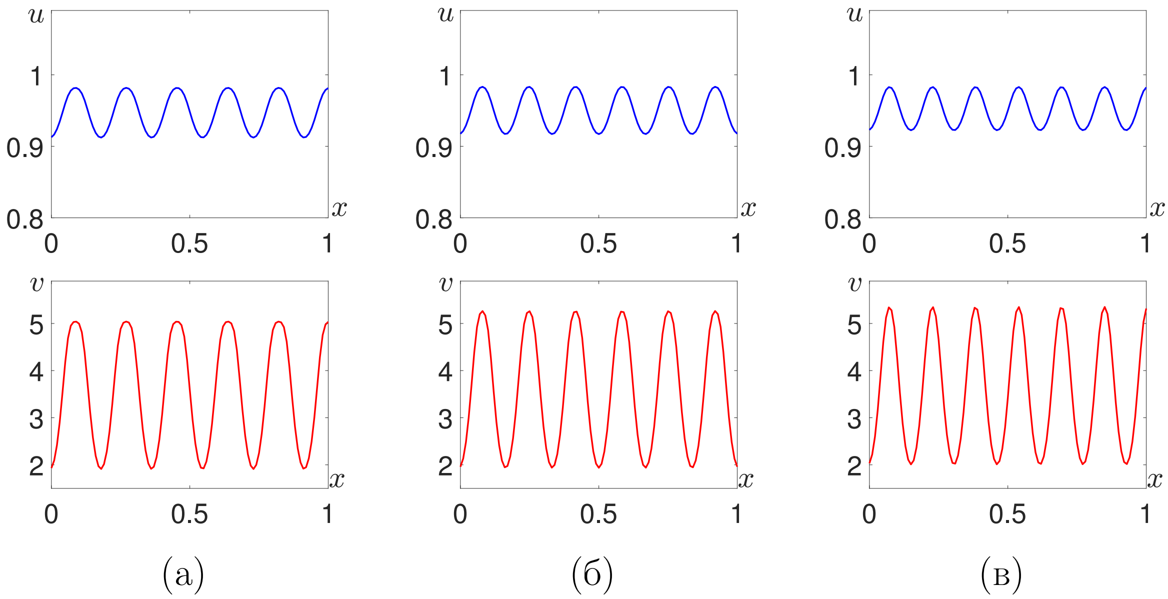


Рисунок 4.6 — Мультистабильность системы (4.1.1), (4.1.2) при $B = 15$, $\beta = 3$, $D = 0.5$, $D_v = 0.016$ и $D_v = 0.002$: а) структура 5.5 ↑, б) структура 6 ↑, в) структура 6.5 ↑

отношение коэффициентов $\dfrac{D_u}{D_v}$, а значит его изменение повлияет на вид тьюринговских структур и на процесс их формирования. Этот пример показывает, что пропорциональное изменение коэффициентов диффузии с сохранением отношения между ними также повлечет изменения формы структур.

4.2 Стохастическая динамика и переходы

В предыдущем разделе показано, что модель Уппала–Рэя с диффузией (4.1.1), (4.1.2) мультистабильна в зоне неустойчивости Тьюринга. Наличие нескольких сосуществующих тьюринговских структур в одной и той же параметрической зоне оказывает влияние на стохастическую динамику системы. Как было показано ранее, под воздействием случайных шумов система отклоняется от сформировавшейся в ней структуры-аттрактора. В некоторых случаях состояние системы кардинально не меняется и шум вносит лишь незначительные отклонения локального характера. В других случаях состояние кардинально меняется, как, например, в случае стохастических переходов между сосуществующими структурами.

Для моделирования стохастической динамики рассмотрен следующий вариант модели термохимической кинетики (4.2.1) с условиями непроницаемости границ (4.1.2):

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= -u + D(1-u)e^{v} + D_u \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \varepsilon \xi(t, x), \\ \frac{\partial v}{\partial t} &= -v + DB(1-u)e^{v} - \beta v + D_v \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \varepsilon \eta(t, x). \end{aligned} \tag{4.2.1}$$

Положительный коэффициент $\varepsilon > 0$ – интенсивность шума, стохастические компоненты $\xi(t, x)$ и $\eta(t, x)$ – некоррелированные гауссовские случайные процессы со свойствами (4.2.2):

$$\begin{aligned} &\mathrm{E}\xi(t, x) = \mathrm{E}\eta(t, x) = 0, \\ &\mathrm{E}\xi(t, x)\xi(t', x') = \delta(t' - t)\delta(x' - x), \\ &\mathrm{E}\eta(t, x)\eta(t', x') = \delta(t' - t)\delta(x' - x). \end{aligned} \tag{4.2.2}$$

Пусть в системе (4.2.1), (4.1.2) $D = 0.5$, $B = 15$, $\beta = 3$, $D_u = 0.08$ и $D_v = 0.01$. Начальное состояние системы – структура $3.5\uparrow$ (рис. 4.7а), интенсивность шума $\varepsilon = 0.06$. Под воздействием шума структура $3.5\uparrow$ превратилась в зашумленную структуру $3\uparrow$. Конечное состояние численного эксперимента показано на (рис. 4.7б).

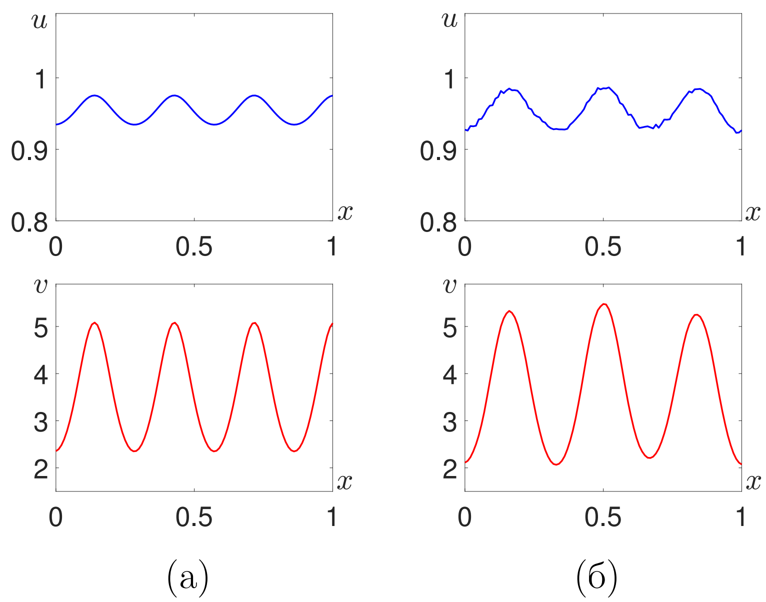
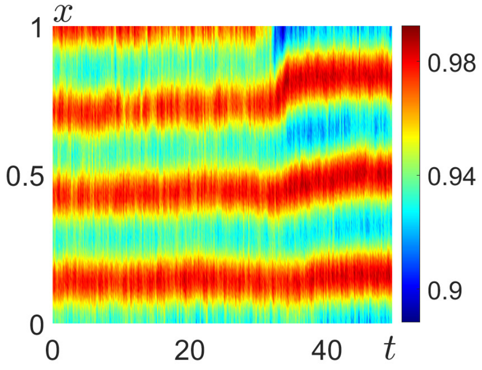


Рисунок 4.7 — Стохастический переход $3.5\uparrow\to 3\uparrow$ в системе (4.2.1), (4.1.2) при $B = 15$, $\beta = 3$, $D = 0.5$, $D_v = 0.01$ и $D_v = 0.08$: а) начальное состояние, б) конечное состояние

Более подробная информация о процессе перехода представлена на цветовой диаграмме рис. 4.8а. На ней отчетливо видно как структура $3.5\ \uparrow$



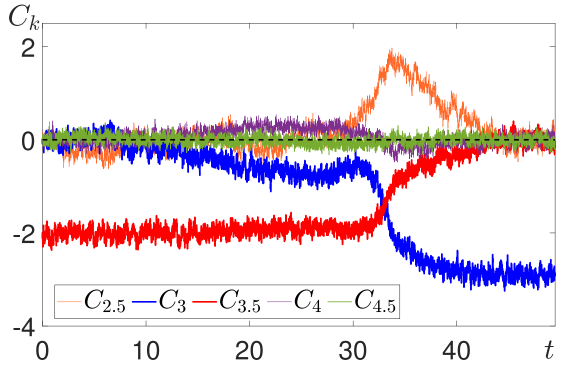


Рисунок 4.8 — Временная динамика перехода 3.5 ↑→ 3 ↑ в системе (4.2.1), (4.1.2) при $B = 15$, $\beta = 3$, $D = 0.5$, $D_v = 0.01$, $D_v = 0.08$ и $\varepsilon = 0.06$: а) диаграмма пространственно-временной динамики $u(t, x)$, б) динамика некоторых гармонических коэффициентов C_k

разрушается и вместо нее формируется структура 3 ↑. Факт перехода подтверждается и динамикой гармонических коэффициентов (рис. 4.8б). В момент $t \approx 32$ абсолютное значение функции $C_{3.5}(t)$ убывает, а коэффициенты $C_{2.5}(t)$ и $C_3(t)$ удаляются от нуля, что соответствует разрушению исходной структуры. В конце численного эксперимента $C_3(t)$ стабилизируется на достаточном расстоянии от нуля, значения остальных коэффициентов колеблются около нуля. Этот пример показывает, как индуцированные шумом переходы можно анализировать и распознавать с помощью гармонических коэффициентов (4.1.4).

Стохастические переходы указывают на разную степень стохастической чувствительности. Одни структуры более устойчивы к шумам, отклонение случайного состояния от этих них невелико. Другие структуры более чувствительны и разрушаются под воздействием шума. Таким образом, процесс стохастического перехода можно рассматривать как процесс разрушения чувствительной структуры с последующим формированием более устойчивой структуры из случайного состояния.

Оценить стохастическую чувствительность структуры-аттрактора можно оценив отклонение случайных состояний в его окрестности. Пусть $\bar{u}(x)$ и $\bar{v}(x)$ – компоненты тьюринговской структуры детерминированный системы (4.1.1), (4.1.2). Проводится серия численных экспериментов в стохастической системе (4.2.1), (4.1.2) с начальным состоянием $u(0, x) = \bar{u}(x)$, $u(0, x) = \bar{v}(x)$ и интенсивностью шума ε. При этом важно исключить описанные выше стохастические переходы, поэтому коэффициент интенсивности шума выбран небольшим. Результат каждого эксперимента – случайное состояние описанное парой функций

$u^\varepsilon(t, x)$ и $v^\varepsilon(t, x)$. Имея достаточное количество статистических данных, можно оценить среднеквадратическое отклонение случайных состояний от структуры-аттрактора (4.2.3):

$$\mathcal{S}_u(x, \varepsilon) = \mathrm{E}(u^\varepsilon(t,x) - \bar{u}(x))^2, \quad \mathcal{S}_v(x, \varepsilon) = \mathrm{E}(v^\varepsilon(t,x) - \bar{v}(x))^2. \qquad (4.2.3)$$

Таким образом была получена статистическая оценка стохастической чувствительности для тьюринговских структур $3\!\uparrow$ и $3.5\!\uparrow$, участвовавшие в процессе перехода, показанного на рис. 4.7 и 4.8. Результат статистического эксперимента показан на рис. 4.9. Визуальное сравнение графиков $\mathcal{S}_u$ указывает на то, что структура $3.5\!\uparrow$ более чувствителен к стохастическим эффектам, что могло бы объяснить сценарий перехода от структуры $3.5 \uparrow$ к структуре $3 \uparrow$.

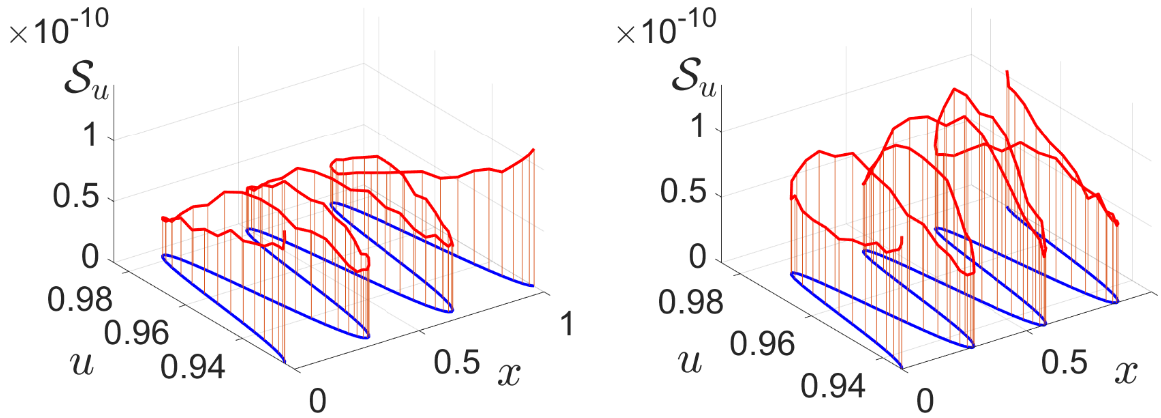


Рисунок 4.9 — Среднеквадратическое отклонение $\mathcal{S}_u$ случайных состояний от тьюринговской структуры системы (4.2.1), (4.1.2) при $B = 15$, $\beta = 3$, $D = 0.5$, $D_v = 0.01$, $D_v = 0.08$ и $\varepsilon = 10^{-5}$: а) структура $3\!\uparrow$, б) структура $3.5\!\uparrow$

Важно отметить, что разброс случайных состояний $\mathcal{S}_u(x, \varepsilon)$ и $\mathcal{S}_v(x, \varepsilon)$ пространственно-неоднородные функции. Это, в свою очередь, говорит о том, что на разных участках одной и той же структуры отклонение будет различаться.

Предложенный метод оценки среднеквадратического отклонения требует большого количества статистических данных, для сбора которых проводится большое число повторений прямого моделирования. Применение аналитического метода функций стохастической чувствительности (ФСЧ), описанного в разделе 1.2.2, позволяет значительно сократить вычислительное время и получить хорошую оценку среднеквадратического отклонения. Пусть $\mathcal{W}_u(x)$ и $\mathcal{W}_v(x)$ ФСЧ структуры-аттрактора $\big(\bar{u}(x),\ \bar{v}(x)\big)$. Тогда отклонение случайного состояния можно оценить следующим образом:

$$\mathcal{S}_u(x, \varepsilon) \approx \overline{\mathcal{S}}_u(x,\varepsilon) = \varepsilon^2 \mathcal{W}_u(x), \quad \mathcal{S}_v(x, \varepsilon) \approx \overline{\mathcal{S}}_v(x,\varepsilon) = \varepsilon^2 \mathcal{W}_v(x). \qquad (4.2.4)$$

Результат аппроксимации разброса случайных состояний вокруг сосуществующих структур-аттракторов 2.5↑, 3↑ и 3.5↑ (рис. 4.5) показан на рис. 4.10.

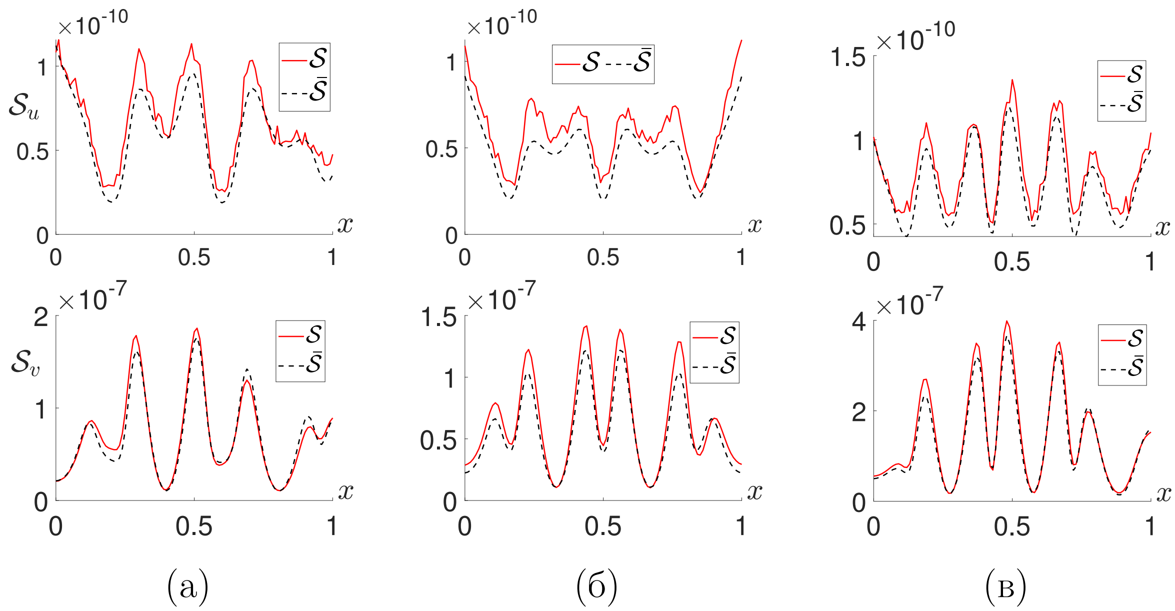


Рисунок 4.10 — Аппроксимация среднеквадратического отклонения случайных состояний системы (4.2.1), (4.1.2) $\mathcal{S}_u(x,\,\varepsilon)$ (верхний ряд) и $\mathcal{S}_v(x,\,\varepsilon)$ (нижний ряд) функциями стохастической чувствительности при $B = 15$, $\beta = 3$, $D = 0.5$, $D_v = 0.01$, $D_v = 0.08$ и $\varepsilon = 10^{-5}$: а) структура 2.5 ↑, б) структура 3 ↑, в) структура 3.5 ↑

Можно заметить, что аппроксимация ФСЧ хорошо согласуется со статистическими данными. Более того, ФСЧ позволяет выявить наиболее чувствительные участки структур-аттракторов, в которых отклонение стохастической системы велико. Наконец, компонент v структуры 3.5↑ в целом более чувствительный к шуму по сравнению со структурами 2.5↑ и 3↑. Полагается, что под воздействием шума она с большей вероятностью превратится в другую структуру, как было показано на рис. 4.7 и 4.8, в то время как структуры 2.5↑ и 3↑ в тех же условиях останутся без значительных изменений. Так, на рис. 4.11 приведены соответствующие примеры стохастической динамики.

Как видно из диаграмм, несмотря на присутствие шумов, концентрационные волны поддерживаются системой и частотность не меняется. Это, в свою очередь, указывает на более высокую устойчивость тьюринговских структур 2.5↑ и 3↑ к стохастическим возмущениям.

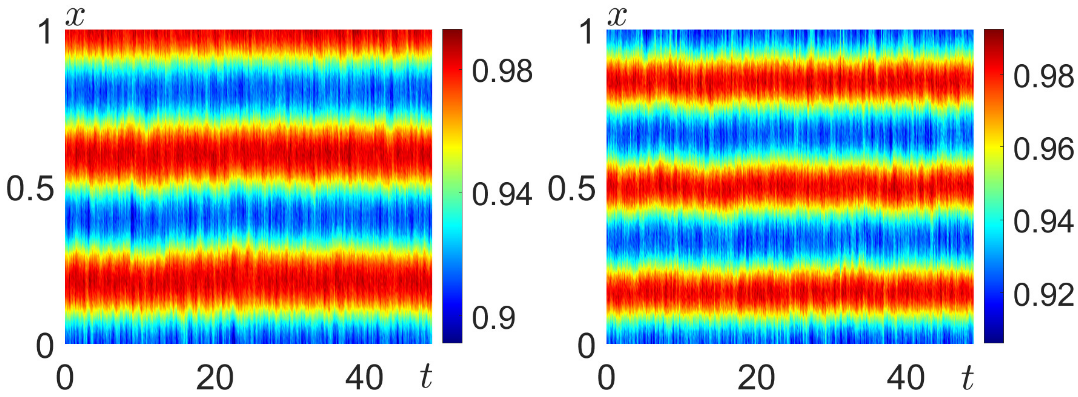


Рисунок 4.11 — Стохастическая динамика $u(t, x)$ тьюринговских структур системы (4.2.1), (4.1.2) при $B = 15$, $\beta = 3$, $D = 0.5$, $D_v = 0.01$, $D_v = 0.08$ и $\varepsilon = 0.06$: а) структура 2.5↑, б) структура 3↑

Основные результаты главы

В данной главе рассмотрена пространственная модель термохимической кинетики Уппала–Рэя, описывающая динамику реактора с непрерывным перемешиванием с диффузией. Раздел 4.1 посвящен детерминированной динамике без участия случайных возмущений. Рассмотрены сценарии формирования тьюринговских структур. В параметрической зоне неустойчивости Тьюринга показана мультистабильность модели, проявляющаяся в сосуществовании нескольких структур-аттракторов с разной пространственной частотностью.

Стохастическая динамика модели рассмотрена в разделе 4.2, где мультистабильность проявляется не только в сосуществовании структур, но и в возможности индуцированных шумом переходов между ними. На примере такого перехода исследована стохастическая чувствительность сосуществующих тьюринговских структур методом статистического анализа распределения случайных состояний вблизи структуры-аттрактора. Также показаны возможности методов гармонического анализа в распознании перехода и метода функций стохастической чувствительности в описании распределения случайных состояний.

Результаты главы опубликованы в статье [62] и представлены на конференции «Современные проблемы математики и ее приложений - СоПроМат 2024».

Глава 5. Комплексы программ

В данной главе приведены характеристики разработанных программных комплексов для моделирования систем описанных в диссертационной работе, анализа стохастической чувствительности и динамики переходов. Теоретической основой этих программных комплексов являются численные методы и подходы, продемонстрированные в Главе 1. Исследования, результаты которых описаны в Главах 2, 3 и 4, проведены с помощью данных комплексов.

Программные решения реализованы на языке программирования `python 3` в дистрибутиве `Anaconda` [117]. Основное преимущество данной технологии – большое число прикладных пакетов, полезных для работы с векторами, матрицами и случайными величинами. Реализация не ограничена установленной операционной системой и может быть использована на любой ЭВМ с установленной программой-интерпретатором.

Отладка и проверка работоспособности программных комплексов выполнена в операционных системах Windows 7, 10 и 11, с установленным интерпретатором языка программирования `python` и дистрибутивом `Anaconda`.

5.1 Анализ динамики распределенных моделей

Комплекс программ по моделированию динамики пространственно-распределенных моделей реакции–диффузии включает в себя реализацию сеточного метода Кранка–Никольсон, а так же ряда процедур, вызываемых в основном цикле метода.

Конфигурация сетки (листинг 5.1) подразумевает определение длины пространственного интервала и количество шагов сетки, таким образом определяется шаг метода по пространственной переменной x, а также величины временного интервала и количества шагов по нему. Метод имеет возможность выполнить прогрев, длина временного интервала и количество итераций прогрева задаются отдельно.

Листинг 5.1 Конфигурация сетки

```
import numpy as np

# параметры сетки
X_LENGTH = 1
X_SAMPLES = 101
X_STEP = X_LENGTH / (X_SAMPLES - 1)
x_grid = np.array([j * X_STEP for j in range(X_SAMPLES)])

HEATING_LENGTH = 0
HEATING_SAMPLES = 0
HEATING_STEP = HEATING_LENGTH / (HEATING_SAMPLES - 1)
heating_grid = np.array([n * HEATING_STEP for n in range(HEATING_SAMPLES)])

T_LENGTH = 100
T_SAMPLES = 100000
T_STEP = T_LENGTH / (T_SAMPLES - 1)
t_grid = np.array([n * T_STEP for n in range(T_SAMPLES)])
```

Затем нужно определить изучаемую модель в виде функций, задающих модель без диффузии. Например, для брюсселятора подключаемый пакет будет выглядеть как на листинге 5.2.

Листинг 5.2 Уравнения брюсселятора

```
# уравнения базовой модели без диффузии
def f(u, v):
        return A - (B + 1)*u + u*u*v

def g(u, v):
        return B*u - u*u*v
```

Для модели необходимо задать начальные условия. Они могут быть загружены из файла или сгенерированы программным кодом. Шаг метода включает в себя заполнение матриц и решение матричного уравнения (листинг 5.3)

Векторы `uu` и `vv` известны с предыдущего шага метода. Функции `f_vec` и `g_vec` принимают на вход эти векторы и возвращает векторы значений функций $f(u_i, v_i)$ и $g(u_i, v_i)$ соответственно. Трехдиагональные матрицы `a_u` и `a_v` обладают свойством диагонального преобладания, а значит уравнения можно

Листинг 5.3 Шаг метода

```
import numpy as np

def method_step(uu, vv, du, dv, f_vec, g_vec, noise_intensity=0, heating=False):
        time_step = HEATING_STEP if heating else T_STEP

        sigma_u = DU * time_step/(2.*X_STEP**2)
        sigma_v = DV * time_step/(2.*X_STEP**2)

        a_u = np.diagflat([-sigma_u for _ in range(X_SAMPLES-1)], -1) + \
        np.diagflat([1. + sigma_u] +
                [1.+2.*sigma_u for _ in range(X_SAMPLES-2)] +
                [1.+sigma_u]) + \
        np.diagflat([-sigma_u for _ in range(X_SAMPLES-1)], 1)

        b_u = np.diagflat([sigma_u for _ in range(X_SAMPLES-1)], -1) + \
        np.diagflat([1.-sigma_u] +
                [1.-2.*sigma_u for _ in range(X_SAMPLES-2)] +
                [1.-sigma_u]) + \
        np.diagflat([sigma_u for _ in range(X_SAMPLES-1)], 1)

        a_v = np.diagflat([-sigma_v for _ in range(X_SAMPLES-1)], -1) + \
        np.diagflat([1.+sigma_v] +
                [1.+2.*sigma_v for _ in range(X_SAMPLES-2)] +
                [1.+sigma_v]) + \
        np.diagflat([-sigma_v for _ in range(X_SAMPLES-1)], 1)

        b_v = np.diagflat([sigma_v for _ in range(X_SAMPLES-1)], -1) + \
        np.diagflat([1.-sigma_v] +
                [1.-2.*sigma_v for _ in range(X_SAMPLES-2)] +
                [1.-sigma_v]) + \
        np.diagflat([sigma_v for _ in range(X_SAMPLES-1)], 1)

        # решаем два матричных уравнения вида Ax=B
        u_result, v_result = (np.linalg.solve(a_u, b_u.dot(uu) + f_vec(uu, vv)),
                np.linalg.solve(a_v, b_v.dot(vv) + g_vec(uu, vv)))
```

решить методом прогонки. Решив систему уравнений, находим $u(t_{j+1}\ ,x_i)$ и $v(t_{j+1}, x_i)$. Затем происходит моделирование случайных возмущений в листинге 5.4. Физический и биологический смысл рассмотренных моделей подразумевает, что значения функций $u(t,\ x)$ и $v(t,\ x)$ неотрицательные, а значит, перед тем как вернуть результат, нужно очистить векторы от отрицательных значений. После того как параметры сетки установлены, задано начальное состояние

Листинг 5.4 Добавление шума

```
import numpy as np
import math

if heating:
        # во время прогрева влияние шума исключено
        return u_result, v_result

else:
        # добавление шума
        noise_multiplier = noise_intensity * math.sqrt(time_step)
        u_random = np.random.randn(X_SAMPLES) * noise_multiplier
        v_random = np.random.randn(X_SAMPLES) * noise_multiplier

# убираем отрицательные значения
return np.clip(u_result + u_random, a_min=0, a_max=None),
       np.clip(v_result + v_random, a_min=0, a_max=None)
```

системы и все необходимые параметры системы заданы запускается основной цикл (листинг 5.5). На каждой итерации происходит сохранение истории процесса. Также сохраняются данные о волновых коэффициентах. Все данные вычислений доступны из области видимости цикла, так, например, можно реализовать условие остановки с плавающим окном – сверить текущее состояние с несколькими предыдущими и прервать цикл если условие выполняется.

После выхода из цикла желательно вывести данные в файлы. В этом примере формируются три файла: временная динамика, финальное состояние и значения волновых коэффициентов. Также можно сохранить данные в графическом виде для визуальной оценки результатов. Чаще всего эти черновики не соответствуют требованиям редакции, поэтому рекомендуется использовать прикладной пакет для визуализации данных, например, `MatLab`.

Данный комплекс выполняет задачу программной реализации численного метода для исследования и анализа стохастических феноменов моделей нелинейной динамики с диффузией. Тестирование и отладка проводились на модели

Листинг 5.5 Главный цикл

```
import time

start_u = INITIAL_U
start_v = INITIAL_V
start = time.perf_counter()
timestamp = time.time()
u_record = []
v_record = []
c_record = []

# прогрев без шума
for i in range(HEATING_SAMPLES):
        uu, vv = method_step(uu, vv, heating=True)
        print('Heating done')

# основной цикл с шумом
for i in range(T_SAMPLES):
        u_record.append(uu)
        v_record.append(vv)
        uu, vv = method_step(uu, vv, noise_intensity=GAMMA)
        c_record.append(get_coeffs(uu))

print('Modeling done')
print(f'Time elapsed: {time.perf_counter() - start}')
```

стохастического брюсселятора из главы 2, для которой имелась богатая база результатов из предыдущих исследований.

Программная реализация численного метода полностью удовлетворяет требованиям задачи диссертационного исследования. Представленный в этом разделе код лежит в основе зарегистрированных комплексов программ из приложений А и Б. Также она является важной частью программного комплекса приложения В, с ее помощью находится структура-аттрактор, для которой формируется матричное уравнение стохастической чувствительности. Более того, с помощью этого метода формируется база статистических данных численных экспериментов для верификации результатов метода ФСЧ.

5.2 Метод функций стохастической чувствительности тьюринговских структур в математических моделях реакции–диффузии

В этом разделе предлагается подробно рассмотреть программную реализацию метода функций стохастической чувствительности применительно к тьюринговским структурам в моделях реакции-диффузии. Теоретические основы этого метода были подробно разобраны в разделе 1.3.

Для подготовки к нахождению функции стохастической чувствительности нужно расширить данные о модели. Сами по себе правые части уравнений в этом методе не участвуют, но необходимо знать их частные производные. Для брюсселятора их можно определить как показано в листинге 5.6.

Листинг 5.6 Частные производные модели брюсселятора

```
def df_du(u, v):
        return -(B + 1) + 2*u*v

def df_dv(u, v):
        return u*u

def dg_du(u, v):
        return B - 2*u*v

def dg_dv(u, v):
        return -u*u
```

Для анализа чувствительности структуры необходимо передать состояние полученное прямым моделированием (считывается из файла), а также значения коэффициентов диффузии `DU` и `DV`, количество узлов сетки `N` и шаг по пространству `H`. После этого составляются матрицы для дискретизованной системы ОДУ 1.3.5. Пример заполнения матриц показан в листинге 5.8.

Последний шаг алгоритма – решение матричного уравнения Ляпунова 1.3.7. В данной реализации используется алгоритм Бартелса–Стюарта [118] (процедура `solve_continuous_lyapunov` из библиотеки `scipy.linalg`). Полностью процедура получения функции стохастической чувствительности описана в листинге 5.7. Вывод алгоритма – вектор, в котором последовательно выводятся диагональные элементы матрицы стохастической чувствительности. В целях отладки также можно вывести саму матрицу в отдельный файл.

В диссертационной работе оценка разброса случайных состояний вокруг тьюринговских структур проведена с помощью продемонстрированного алгоритма. Тестирование проводилось на большом объеме случайных состояний вблизи структуры-аттрактора полученных прямым моделированием с разной интенсивностью шума. Погрешность метода оказалась допустимой, а соответствие статистическому распределению допустимым.

Данная программная реализация выполняет задачу о реализации средств и методов исследования стохастических феноменов в моделях реакции-диффузии.

Листинг 5.7 Алгоритм получения ФСЧ для тьюринговской структуры

```
from scipy.linalg import solve_continuous_lyapunov

def get_sensitivity(h, du, dv, n, out_file, custom_implementation=False):
        uu, vv = read_values()
        matrix = fill_matrix(uu, vv, h, du, dv, n)

        solution = solve_continuous_lyapunov(matrix, identity(2 * n) * - 1)

        with open(f'{out_file}_matrix.txt', 'w') as f:
                for line in solution:
                        for entry in line.tolist():
                                f.write(str(entry) + " ")
                f.write("\n")

        diag = [solution[i][i] for i in range(2 * n)]
        sensitivity_function = [x for x in diag]

        with open(f'{out_file}_sensitivity.txt', 'w') as f:
                for entry in sensitivity_function:
                        f.write(entry)
                        f.write("\n")
```

Листинг 5.8 Заполнение матрицы для уравнения Ляпунова

```
import numpy as np

def fill_matrix(uu, vv, h, du, dv, n):
"""Заполнение стохастической матрицы"""
result = []
first_line = np.zeros(2*n)
first_line[0] = df_du(uu[0], vv[0]) - du / (h**2)
first_line[1] = du / (h**2)
first_line[n] = df_dv(uu[0], vv[0])
result.append(first_line)
for i in range(1, n-1):
line = np.zeros(2*n)
line[i] = df_du(uu[i], vv[i]) - 2 * du / (h**2)
line[i-1] = du / (h * h)
line[i+1] = du / (h * h)
line[n+i] = df_dv(uu[i], vv[i])
result.append(line)
last_line = np.zeros(2*n)
last_line[n-2] = du / (h**2)
last_line[n-1] = df_du(uu[-1], vv[-1]) - du / (h**2)
last_line[-1] = df_dv(uu[-1], vv[-1])
result.append(last_line)

v_first_line = np.zeros(2*n)
v_first_line[n] = dg_dv(uu[0], vv[0]) - dv / (h**2)
v_first_line[n+1] = dv / (h**2)
v_first_line[0] = dg_du(uu[0], vv[0])
result.append(v_first_line)
for i in range(1, n-1):
line = np.zeros(2 * n)
line[n + i] = dg_dv(uu[i], vv[i]) - 2 * dv / (h**2)
line[n + i - 1] = dv / (h * h)
line[n + i + 1] = dv / (h * h)
line[i] = dg_du(uu[i], vv[i])
result.append(line)
v_last_line = np.zeros(2*n)
v_last_line[-2] = dv / (h**2)
v_last_line[-1] = dg_dv(uu[-1], vv[-1]) - dv / (h**2)
v_last_line[n-1] = dg_du(uu[-1], vv[-1])
result.append(v_last_line)

return np.asarray(result)
```

Основные результаты главы

В данной главе рассмотрены основные методы для работы со стохастическими моделями реакции-диффузии, реализованные в рамках разработки проблемно ориентированных программных комплексов. Главные результаты диссертационной работы были получены с помощью этих методов.

Комплексы реализованы на современном и удобном языке `python`, преимущества которого – легкость в освоении, большое количество доступных библиотек а так же независимость от какой-либо конкретной операционной системы.

В настоящее время проводится дальнейшая работа по оптимизации и усовершенствованию этих комплексов с целью применения на более широком классе математических моделях. Представленные программные решения зарегистрированы в Федеральной службе по интеллектуальной собственности (Роспатент). Свидетельства о регистрации программ для ЭВМ оформлены в виде приложений к диссертационной работе.

Заключение

В диссертационной работе исследованы стохастические феномены в моделях нелинейной динамики с диффузией. Основными объектами исследования в этих моделях являются диффузионная неустойчивость, тьюринговские структуры и индуцированные шумами переходы между ними. Новизна работы заключается в разработке метода функций стохастической чувствительности для систем реакции-диффузии, где такие структуры являются аттракторами, применении нового метода в моделях нелинейной динамики с диффузией. Возможности применения метода в исследовании факторов, влияющих на динамику стохастических переходов, рассмотрены на математических моделях феноменов.

Основные результаты диссертационной работы можно описать следующим образом.

- Исследованы математические модели реакции-диффузии из разных областей, в том числе модели химической реакции, популяционной динамики и термохимической кинетики. Показано, что несмотря на сильно различающийся характер соответствующих феноменов, принципы моделирования и анализа тьюринговских структур в этих системах схожи. Данный результат указывает на универсальность применяемых методик исследования и допускает возможность их применения в других областях науки.
- Проведено исследование трех детерминированных диффузионных моделей: брюсселятора, модели Левина–Сегеля популяционной динамики и модели Уппала–Рэя термохимической кинетики. Выявлены параметрические зоны неустойчивости Тьюринга, приведены примеры формирования тьюринговских структур из случайного начального состояния. Результаты моделирования показали, что в подобных системах часто наблюдается мультистабильность, выраженная в сосуществовании нескольких структур-аттракторов.
- Показано, что системные параметры влияют на форму тьюринговской структуры, а именно на амплитуду концентрационных волн. В то же время при одновременном пропорциональном изменении коэффициен-

тов диффузии меняется пространственная частотность структур и их количество.

- Изучено влияние случайных шумов на вышеперечисленные модели нелинейной динамики с диффузией. Под влиянием интенсивного шума возможно стохастическое разрушение тьюринговской структуры и формирование одной из сосуществующих с ней структур-аттракторов. Статистическое исследование влияния шума на форму структуры показало, что вероятностное распределение случайных состояний вокруг структуры-аттрактора различается – в одних случаях отклонение сильнее. Это указывает на разную степень стохастической чувствительности тьюринговских структур.
- Для аппроксимации среднеквадратического отклонения случайных состояний от тьюринговских структур предложен аналитический метод функций стохастической чувствительности (ФСЧ). Данный метод дает хорошую оценку отклонений и не требует большого объема статистических данных.
- С помощью метода ФСЧ проведен параметрический анализ чувствительности тьюринговских структур. Найдены зоны, в которых чувствительность сосуществующих структур сильно различается, а следовательно вероятность перехода между ними высока. Результат подтверждается данными численных экспериментов.
- На примере модели брюсселятора с диффузией исследованы сценарии подавления автоколебаний. Показано, что добавление диффузии может разрушить однородные автоколебания и привести к формированию устойчивых концентрационных волн, схожих с тьюринговскими структурами. Интенсивная диффузия ускоряет переход модели от колебательного режима к стационарным концентрационным волнам. Добавление случайных шумов также ускоряет данный переход.
- В ходе работы были разработаны, отлажены и протестированы комплексы программ для моделирования систем реакции-диффузии и анализа чувствительности тьюринговских структур.

Рекомендации и дальнейшие перспективы. Разработка и применение количественных характеристик состояний подобных систем остается актуальной задачей. Предложенный в ходе диссертационной работы метод функций стохастической чувствительности позволяет эффективно исследовать чувствительность тьюринговских структур в двухкомпонентных моделях реакции-диффузии на одномерной области. Этот метод можно распространить на более сложные системы с большим количеством компонентов. Куда более серьезным вызовом является исследование моделей с двумерным и трехмерным пространством, где помимо вычислительных сложностей возникают трудности визуализации данных.

Благодарности. Автор благодарит научного руководителя, профессора кафедры теоретической и математической физики УрФУ, д.ф.-м.н. Ряшко Л. Б., а также профессора кафедры теоретической и математической физики УрФУ, д.ф.-м.н. Башкирцеву И. А. за неоценимую помощь в постановке задач и разработке методологии математических исследований. Диссертационные исследования проведены при поддержке грантов Российского научного фонда: «Математическое моделирование и анализ индуцированных шумом явлений в биологических системах» (проект №16-11-10098), «Стохастическая нелинейная динамика живых систем: модели, явления и методы анализа» (проект №21-11-00062), «Математическое моделирование и анализ нелинейной стохастической динамики колебательных термохимических процессов» (проект №23-21-00042) и «Математическое моделирование и стохастический анализ регулярной и хаотической динамики живых систем» (проект №24-11-00097), а также при поддержке Уральского математического центра УрФУ.

Список литературы

1. Nicolis, G. Self-Organization in Nonequilibrium Systems / G. Nicolis, I. Prigogine. New York : Wiley, 1977.
2. Mikhailov, A. S. Foundations of Synergetics II: Chaos and Noise / A. S. Mikhailov, A. Y. Loskutov. Springer, 1996.
3. Synchronization: From Coupled Systems to Complex Networks / S. Boccaletti [et al.]. Cambridge Univ. Press, 2018.
4. Hiraiwa, T. Dynamic self-organization of idealized migrating cells by contact communication / T. Hiraiwa // Phys. Rev. Lett. 2020. Vol. 125, issue 26. P. 268104.
5. Avila-Vales, E. Bifurcation and spatiotemporal patterns in a Bazykin predator-prey model with self and cross diffusion and Beddington-DeAngelis response / E. Avila-Vales, G. García-Almeida, E. Rivero-Esquivel // Discrete and Continuous Dynamical Systems - B. 2017. Vol. 22, no. 3. P. 717—740.
6. Modeling of glycolytic wave propagation in an open spatial reactor with inhomogeneous substrate influx / A. I. Lavrova [et al.] // BioSystems. 2009. Vol. 97. P. 127—133.
7. Malchow, H. Spatiotemporal Patterns in Ecology and Epidemiology / H. Malchow, S. V. Petrovskii, E. Venturino. Chapman and Hall/CRC, 2019. P. 469.
8. Maynard Smith, J. Models in ecology / J. Maynard Smith. Cambridge : Cambridge University Press, 1974.
9. Transient phenomena in ecology / A. Hastings [et al.] // Science. 2018. Vol. 361, no. 6406. eaat6412.
10. Localised structures in a virus-host model / F. Al Saadi [et al.] // Journal of Mathematical Analysis and Applications. 2021. Vol. 499, no. 1. P. 125014.
11. Torcicollo, I. Turing instability and spatial pattern formation in a model of urban crime / I. Torcicollo, M. Vitiello // Mathematics. 2024. Vol. 12. P. 1097.
12. Turing, A. M. The chemical basis of morphogenesis / A. M. Turing // Phil. Trans. Royal Soc. of London. Ser. B, Biol. Sci. 1952. Vol. 237. P. 37—72.

13. Villar-Sepúlveda, E. General conditions for Turing and wave instabilities in reaction-diffusion systems / E. Villar-Sepúlveda, A. R. Champneys // Journal of Mathematical Biology. 2023. Vol. 86, issue 3, no. 39.

14. Maron, J. L. Spatial pattern formation in an insect host-parasitoid system / J. L. Maron, S. Harrison // Science. 1997. Vol. 278, issue 5343. P. 1619—1621.

15. Rietkerk, M. Regular pattern formation in real ecosystems / M. Rietkerk, J. van de Koppel // Trends in Ecology & Evolution. 2008. Т. 23, вып. 3. С. 169—175.

16. Mimura, M. On a diffusive prey–predator model which exhibits patchiness / M. Mimura, J. D. Murray // Journal of Theoretical Biology. 1978. Vol. 75, issue 3. P. 249—262.

17. Environmental metal pollution considered as noise: Effects on the spatial distribution of benthic foraminifera in two coastal marine areas of Sicily (Southern Italy) / D. Valenti [et al.] // Ecological Modelling. 2008. Vol. 213. P. 449—462.

18. Strier, D. Turing patterns inside cells / D. Strier, S. Ponce Dawson // PloS ONE. 2007. Vol. 2. e1053.

19. Briere, C. Mathematical analysis of an activation-inhibition system in a discrete field / C. Briere // Mathematical Biosciences. 1985. Vol. 73, issue 1. P. 51—60.

20. Pattern formation mechanisms of self-organizing reaction-diffusion systems / A. N. Landge [et al.] // Developmental Biology. 2020. Vol. 460, issue 1. P. 2—11.

21. Stochastic population dynamics in spatially extended predator-prey systems / U. Dobramysl [et al.] // Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical. 2018. Vol. 51. P. 063001.

22. Yuan, S. Spatial dynamics in a predator-prey model with herd behavior / S. Yuan, C. Xu, T. Zhang // Chaos. 2013. Vol. 23. P. 033102.

23. Field, R. J. Oscillations in chemical systems. IV. Limit cycle behavior in a model of a real chemical reaction / R. J. Field, R. M. Noyes // The Journal of Chemical Physics. 1974. Vol. 60, no. 5. P. 1877—1884.

24. Pechenkin, A. B. P. Belousov and his reaction / A. Pechenkin // Journal of biosciences. 2009. Vol. 34. P. 365—71.

25. Dúzs, B. Turing patterns and waves in closed two-layer gel reactors / B. Dúzs, P. De Kepper, I. Szalai // ACS Omega. 2019. Vol. 4, issue 2. P. 3213—3219.

26. Experimental evidence of a sustained standing Turing-type nonequilibrium chemical pattern / V. Castets [et al.] // Physical Review Letters. 1990. Vol. 64, issue 24. P. 2953—2956.

27. Wetzel, D. Tristability between stripes, up-hexagons, and down-hexagons and snaking bifurcation branches of spatial connections between up- and down-hexagons / D. Wetzel // Phys. Rev. E. 2018. Vol. 97, issue 6. P. 062221.

28. Shoji, H. Pattern selection and the direction of stripes in two-dimensional Turing systems for skin pattern formation of fishes / H. Shoji, Y. Iwasa. 2003.

29. Gupta, A. Diffusiophoresis-enhanced Turing patterns / A. Gupta // Science advances. 2023. Vol. 9.

30. Watanabe, M. Is pigment patterning in fish skin determined by the Turing mechanism? / M. Watanabe, S. Kondo // Trends in Genetics. 2015. Vol. 31, issue 2. P. 88—96.

31. Li, Y. Stripe and spot patterns for the Gierer–Meinhardt model with saturated activator production / Y. Li, J. Wang, X. Hou // Journal of Mathematical Analysis and Applications. 2017. Vol. 449, no. 2. P. 1863—1879.

32. Li, X. Hopf bifurcation and Turing instability in the reaction–diffusion Holling–Tanner predator–prey model / X. Li, W. Jiang, J. Shi // IMA Journal of Applied Mathematics. 2011. Vol. 78, no. 2. P. 287—306.

33. Witt, H. de. Beyond all order asymptotics for homoclinic snaking in a Schnakenberg system / H. de Witt // Nonlinearity. 2019. Vol. 32, no. 7. P. 2667.

34. Time-dependent localized patterns in a predator-prey model / F. Al Saadi [et al.] // Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science. 2024. Vol. 34, no. 4. P. 043143.

35. Hassard, B. D. Theory and applications of Hopf bifurcation / B. D. Hassard, N. D. Kazarinoff, Y.-H. Wan. Cambridge University Press Archive, 1981.

36. Alsaadi, F. Transitions between dissipative localized structures in the simplified Gilad–Meron model for dryland plant ecology / F. Alsaadi, P. Parra-Rivas // Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science. 2023. Mar. Vol. 33. P. 033129.

37. Interaction of Turing and Hopf modes in the superdiffusive Brusselator model near a codimension two bifurcation point / Tzou, J. C. [et al.] // Math. Model. Nat. Phenom. 2011. Vol. 6, no. 1. P. 87—118.

38. Salewski, M. Origin of localized snakes-and-ladders solutions of plane Couette flow / M. Salewski, J. F. Gibson, T. M. Schneider // Phys. Rev. E. 2019. Vol. 100, issue 3. P. 031102.

39. Uecker, H. Continuation and bifurcation in nonlinear PDEs – algorithms, applications, and experiments / H. Uecker // Jahresber. Dtsch. Math. Ver. 2022. Vol. 124. P. 43—80.

40. Sorokin, V. G. Nonlinear reaction–diffusion equations with delay: Partial survey, exact solutions, test problems, and numerical integration / V. G. Sorokin, A. V. Vyazmin // Mathematics. 2022. Vol. 10, no. 11.

41. Nayied, N. A. Fibonacci wavelet method for the numerical solution of nonlinear reaction-diffusion equations of Fisher-type / N. A. Nayied, F. A. Shah, M. A. Khanday // Mathematics. 2023. Vol. 2023, no. 1705607.

42. Array programming with NumPy / C. R. Harris [et al.] // Nature. 2020. Vol. 585, no. 7825. P. 357—362.

43. SciPy 1.0: Fundamental Algorithms for Scientific Computing in Python / P. Virtanen [et al.] // Nature Methods. 2020. Vol. 17. P. 261—272.

44. Firstova, N. Analysis of critical phenomena in a dynamic system under the influence of random perturbations / N. Firstova // Journal of Mathematical Sciences. 2023. Vol. 272. P. 1—8.

45. Kowalska-Styczeń, A. Noise induced unanimity and disorder in opinion formation / A. Kowalska-Styczeń, K. Malarz // PloS ONE. 2020. Vol. 15. P. 0235313.

46. Song, E. Impact of noise on the instability of spiral waves in stochastic 2D mathematical models of human atrial fibrillation / E. Song // Journal of Biological Physics. 2023. Vol. 49. P. 1—13.

47. Turing patterns in a fiber laser with a nested microresonator: Robust and controllable microcomb generation / H. Bao [et al.] // Physical Review Research. 2020. Vol. 2, issue 2. P. 023395.

48. Bratsun, D. Protein pattern formation induced by the joint effect of noise and delay in a multi-cellular system / D. Bratsun // Mathematical Modelling of Natural Phenomena. 2022. Vol. 17, no. 16.

49. Jenkins, D. How do stochastic processes and genetic threshold effects explain incomplete penetrance and inform causal disease mechanisms? / D. Jenkins // Philosophical Transactions of the Royal Society B. 2024. Vol. 379, no. 1900. P. 20230045.

50. Das, D. Dichotomous-noise-induced pattern formation in a reaction-diffusion system / D. Das, D. S. Ray // Phys. Rev. E. 2013. Vol. 87, issue 6. P. 062924.

51. Alonso, S. Noise-reversed stability of Turing patterns versus Hopf oscillations near codimension-two conditions / S. Alonso, F. Sagués // Phys. Rev. E. 2009. Vol. 80, issue 3. P. 035203.

52. Di Patti, F. Robust stochastic Turing patterns in the development of a one-dimensional cyanobacterial organism / F. Di Patti [et al.] // PLOS Biology. 2018. May. Vol. 16, no. 5. P. 1—25.

53. Stochastic reaction and diffusion on growing domains: Understanding the breakdown of robust pattern formation / T. E. Woolley [et al.] // Phys. Rev. E. 2011. Vol. 84, issue 4. P. 046216.

54. Schnörr, D. Learning system parameters from Turing patterns / D. Schnörr, C. Schnörr // Machine Learning. 2023. Vol. 112, issue 9. P. 3151—3190.

55. Kolinichenko, A. Modality analysis of patterns in reaction-diffusion systems with random perturbations / A. Kolinichenko, L. Ryashko // Izv. IMI UdGU. 2019. Vol. 53. P. 73—82.

56. Kolinichenko, A. Multistability and stochastic phenomena in the distributed Brusselator model / A. Kolinichenko, L. Ryashko // J. Comp. Nonlin. Dyn. 2020. Vol. 15, no. 1. P. 011007.

57. Kolinichenko, A. Stochastic phenomena in pattern formation for distributed nonlinear systems / A. Kolinichenko, A. Pisarchik, L. Ryashko // Phil. Trans. Royal Soc. A. 2020. Vol. 378, no. 2171. P. 0252.

58. Kolinichenko, A. Analysis of stochastic sensitivity of Turing patterns in distributed reaction-diffusion systems / A. Kolinichenko, L. Ryashko // Izv. IMI UdGU. 2020. Vol. 55. P. 155—163.

59. Kolinichenko, A. Stochastic sensitivity analysis of stationary patterns in spatially extended systems / A. Kolinichenko, L. Ryashko // Mathematical Methods in the Applied Sciences. 2021. Vol. 44, no. 16. P. 12194—12202.

60. Bashkirtseva, I. Stochastic sensitivity of Turing patterns: methods and applications to the analysis of noise-induced transitions / I. Bashkirtseva, A. Kolinichenko, L. Ryashko // Chaos, Solitons & Fractals. 2021. Vol. 153. P. 111491.

61. Kolinichenko, A. Self-organization in randomly forced diffusion systems: A stochastic sensitivity technique / A. Kolinichenko, I. Bashkirtseva, L. Ryashko // Mathematics. 2023. Vol. 11, issue 2. P. 451.

62. Kolinichenko, Alexander. Noise-induced pattern evolution in thermochemical kinetics / Kolinichenko, Alexander, Bashkirtseva, Irina, Ryashko, Lev // Eur. Phys. J. Spec. Top. 2024. Vol. 233. P. 3387—3395.

63. Kolinichenko, A. Analysis of spatiotemporal self-organization in stochastic population model / A. Kolinichenko, L. Ryashko // AIP Conference Proceedings. 2018. Vol. 2015, no. 1. P. 020041.

64. Kolinichenko, A. P. Analysis of stochastic transitions in the distributed model with diffusion / A. P. Kolinichenko, L. B. Ryashko // AIP Conference Proceedings. 2019. Vol. 2174, no. 1. P. 020121.

65. Kolinichenko, A. P. Analysis of Turing patterns in distributed reaction-diffusion models with self-oscillations / A. P. Kolinichenko, L. B. Ryashko // AIP Conference Proceedings. 2020. Vol. 2313, no. 1. P. 080017.

66. Kolinichenko, A. Analysis of spatial patterns in the distributed stochastic Brusselator / A. Kolinichenko, L. Ryashko // Mathematical Analysis With Applications. CONCORD-90 2018. Vol. 318 / ed. by S. Pinelas, A. Kim, V. Vlasov. Springer, Cham, 2020. P. 195—204.

67. Kolinichenko, A. P. Stochastic sensitivity analysis of patterns in population dynamics models / A. P. Kolinichenko, L. B. Ryashko // AIP Conference Proceedings. 2022. Vol. 2466, no. 1. P. 070008.
68. Колиниченко, А. П. Тьюринговские паттерны в динамике популяций: мультистабильность, чувствительность, стохастические переходы / А. П. Колиниченко // XI Информационная школа молодого ученого. Издательство Уральского университета, 2023. С. 145—155.
69. Kolinichenko, A. The effect of diffusion on multistability and stochastic sensitivity in spatially extended systems / Kolinichenko, A. // Cybernetics and Physics. 2024. Vol. 13, no. 2. P. 123—129.
70. Li, C. Stochastic bifurcation analysis in Brusselator system with white noise / C. Li, J. Zhang // Advances in Difference Equations. 2019. Vol. 2019.
71. Analysis of noise-induced transitions in a thermo-kinetic model of the autocatalytic trigger / I. Bashkirtseva [et al.] // Mathematics. 2023. Vol. 11. P. 4302.
72. Murray, J. D. Mathematical Biology II: Spatial Models and Biomedical Applications / J. D. Murray. Berlin : Springer, 2002.
73. Crank, J. A practical method for numerical evaluation of solutions of partial differential equations of the heat-conduction type / J. Crank, P. Nicolson // Advances in Computational Mathematics. 1947. Vol. 6. P. 207—226.
74. Марчук, Г. Методы вычислительной математики / Г. Марчук. Москва : Наука, 1977.
75. Bashkirtseva, I. Stochastic sensitivity analysis: Theory and numerical algorithms / I. Bashkirtseva // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. 2017. Vol. 192, no. 1. P. 012024.
76. Bashkirtseva, I. Stochastic sensitivity of cycles in periodic dynamical systems / I. Bashkirtseva // The European Physical Journal B. 2018. Vol. 91, no. 283.
77. Poznyak, A. S. Advanced Mathematical Tools for Automatic Control Engineers: Deterministic Techniques / A. S. Poznyak. Oxford : Elsevier, 2008. P. 133—174.

78. Bray, W. C. A periodic reaction in homogeneous solution and its relation to catalysis / W. C. Bray // Journal of the American Chemical Society. 1921. Vol. 43, no. 6. P. 1262—1267.

79. Ciric, J. The Bray-Liebhafsky oscillatory Reaction. Kinetic investigations in reduction and oxidation pathways based on hydrogen peroxide concentration monitoring / J. Ciric, S. Anic, Z. Cupic // Science of Sintering. 2000. Vol. 32, issue 3. P. 187—196.

80. Белоусов, Б. П. Периодически действующая реакция и её механизм / Б. П. Белоусов // Сборник рефератов по радиационной медицине за 1958 г. Медгиз, 1959. С. 145.

81. Kiprijanov, K. Chaos and beauty in a beaker: The early history of the Belousov-Zhabotinsky reaction / K. Kiprijanov // Annalen der Physik. 2016. Vol. 528. P. 233—237.

82. Жаботинский, А. М. Периодический ход окисления малоновой кислоты в растворе / А. М. Жаботинский // Биофизика. 1964. Т. 9. С. 306—311.

83. Zaikin, A. N. Concentration wave propagation in two-dimensional liquid-phase self-oscillating system / A. N. Zaikin, A. M. Zhabotinsky // Nature. 1970. Vol. 225. P. 535—537.

84. Prigogine, I. Symmetry breaking instabilities in dissipative systems. II / I. Prigogine, R. Lefever // The Journal of Chemical Physics. 1968. Vol. 48, no. 4. P. 1695—1700.

85. Provata, A. From Turing patterns to chimera states in the 2D Brusselator model / A. Provata // Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science. 2023. Vol. 33. P. 033133.

86. Ji, C. Random attractors of the stochastic extended Brusselator system with a multiplicative noise / C. Ji, H. Liu, J. Xin. 2020.

87. Prokudina, L. Numerical simulation of the diffusion instability of the oregonator / L. Prokudina // AIP Conference Proceedings. 2022. Vol. 2522. P. 100010.

88. Giné, J. On the dynamics of Higgins–Selkov, Selkov and Brusellator oscillators / J. Giné // Symmetry. 2022. Vol. 14. P. 438.

89. Fürnkranz-Prskawetz, A. Population dynamics: Mathematic models of population, development, and natural resources / A. Fürnkranz-Prskawetz // International Encyclopedia of the Social & Behavioral Sciences / ed. by N. J. Smelser, P. B. Baltes. Oxford : Pergamon, 2001. P. 11762—11766.

90. Valenze, D. Immortal Malthus / D. Valenze // The Invention of Scarcity. New Haven : Yale University Press, 2023. P. 1—18.

91. Harris, J. A. Poverty as a political problem in late eighteenth-century Britain: Smith, Burke, Malthus / J. A. Harris // The Southern Journal of Philosophy. 2023. Vol. 61, no. 1. P. 63—81.

92. Verhulst, P. F. Notice sur la loi que la population suit dans son accroissement / P. F. Verhulst // Corr. math. phys. 1838. Vol. 10. P. 113—121.

93. Pearl, R. On the rate of growth of the population of the United States since 1790 and its mathematical representation / R. Pearl, L. J. Reed // Proceedings of the National Academy of Sciences. 1920. Vol. 6, no. 6. P. 278—286.

94. Pritchett, H. S. AfFormula for predicting the population of the United States / H. S. Pritchett // Publications of the American Statistical Association. 1891. Vol. 2, no. 14. P. 278—286.

95. Haken, H. Synergetics: Introduction and Advanced Topics / H. Haken. Heidelberg : Springer Berlin, 2004.

96. Lotka, A. J. Elements of physical biology / A. J. Lotka // Nature. 1925. Vol. 116, no. 461.

97. Voltera, V. Fluctuations in the abundance of a apecies considered mathematically / V. Voltera // Nature. 1926. Vol. 118. P. 558—560.

98. Bazykin, A. D. Volterra's system and the Michaelis-Menten equation / A. D. Bazykin // Problems in mathematical genetics. USSR Academy of Science, Novosibirsk, USSR. 1974. P. 103—142.

99. Tanner, J. T. The stability and the intrinsic growth rates of prey and predator populations / J. T. Tanner // Ecology. 1975. Vol. 56, no. 4. P. 855—867.

100. Hsu, S. Two predators competing for two prey species: An analysis of MacArthur's model / S. Hsu, S. Hubbell // Mathematical Biosciences. 1979. Vol. 47, no. 3. P. 143—171.

101. Safi, M. A. Global stability analysis of two-stage quarantine-isolation model with Holling type II incidence function / M. A. Safi // Mathematics. 2019. Vol. 7, issue 4, no. 350.

102. Ecosystem engineers: From pattern formation to habitat creation / E. Gilad [et al.] // Physical review letters. 2004. Vol. 93. P. 098105.

103. Medlock, J. Spreading disease: Integro-differential equations old and new / J. Medlock, M. Kot // Mathematical Biosciences. 2003. Vol. 184, no. 2. P. 201—222.

104. Gladkov, S. On the question of self-organization of population dynamics on Earth / S. Gladkov // Biophysics. 2021. Vol. 66. P. 858—866.

105. Dey, S. Spatio-temporal dynamics in a diffusive Bazykin model: Effects of group defense and prey-taxis / S. Dey, M. Banerjee, S. Ghorai // Discrete and Continuous Dynamical Systems - B. 2024. Vol. 29, no. 6. P. 2497—2531.

106. Levin, S. A. Hypothesis for origin of planktonic patchiness / S. A. Levin, L. A. Segel // Nature. 1976. Vol. 259. P. 659—659.

107. Butler, T. Robust ecological pattern formation induced by demographic noise / T. Butler, N. Goldenfeld // Physical review. E, Statistical, nonlinear, and soft matter physics. 2009. Vol. 80. P. 030902.

108. Nissa, R. Type design of continuous stirred tank reactors (CSTRs) for bath bomb lavender production / R. Nissa // Indonesian Journal of Chemical Science and Technology (IJCST). 2024. Vol. 7. P. 35.

109. Castañeda, L. C. Experimentation in continuous stirred tank reactors / L. C. Castañeda, J. A. Muñoz, J. Ancheyta // Experimental Methods for Evaluation of Hydrotreating Catalysts. John Wiley & Sons, Ltd, 2020. P. 341—397.

110. Semenov, N. N. Theories of combustion processes / N. N. Semenov // Z. Phys. Chem. 1928. Issue 48. P. 571—582.

111. Bilous, O. Chemical reactor stability and sensitivity / O. Bilous, N. R. Amundson // AIChE Journal. 1955. Vol. 1, no. 4. P. 513—521.

112. Aris, R. Some remarks on longitudinal mixing or diffusion in fixed beds / R. Aris, N. R. Amundson // AIChE Journal. 1957. Vol. 3, no. 2. P. 280—282.

113. Vaganov, D. Periodic regimes of continuous stirred tank reactors / D. Vaganov, N. Samoilenko, V. Abramov // Chemical Engineering Science. 1978. Vol. 33, no. 8. P. 1131—1140.

114. Sheplev, V. Dynamics of a stirred tank reactor with first-order reaction / V. Sheplev, S. Treskov, E. Volokitin // Chemical Engineering Science. 1998. Vol. 53, no. 21. P. 3719—3728.

115. Быков, В. Нелинейные модели химической кинетики / В. Быков, С. Цыбенова. URSS, 2011. (Синергетика: От прошлого к будущему).

116. Uppal, A. On the dynamic behavior of continuous stirred tank reactors / A. Uppal, W. Ray, A. Poore // Chemical Engineering Science. 1974. Vol. 29, no. 4. P. 967—985.

117. Anaconda Software Distribution. Version Vers. 2-2.4.0. 2020. URL: https://docs.anaconda.com/.

118. Solving the generalized Lyapunov equation by the Bartels-Stewart method using standard software libraries for linear algebra computations / I. Blanquer [et al.] // IFAC Proceedings Volumes. 1998. Vol. 31, no. 18. P. 387—392.

Приложение А. Свидетельство о регистрации программы ЭВМ №2022614148

РОССИЙСКАЯ ФЕДЕРАЦИЯ

СВИДЕТЕЛЬСТВО

о государственной регистрации программы для ЭВМ

№ 2022614148

Анализ динамики распределенных моделей

Правообладатель: ***Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина» (RU)***

Авторы: ***Колиниченко Александр Павлович (RU), Ряшко Лев Борисович (RU)***

Заявка № **2022613095**

Дата поступления **10 марта 2022 г.**

Дата государственной регистрации

в Реестре программ для ЭВМ ***17 марта 2022 г.***

Руководитель Федеральной службы

по интеллектуальной собственности

ДОКУМЕНТ ПОДПИСАН ЭЛЕКТРОННОЙ ПОДПИСЬЮ

Сертификат 68b80077e14e40f0a94edbd24145d5c7

Владелец **Зубов Юрий Сергеевич**

Действителен с 2.03.2022 по 26.05.2023

Ю.С. Зубов

Приложение Б. Свидетельство о регистрации программы ЭВМ №2023663314

РОССИЙСКАЯ ФЕДЕРАЦИЯ

СВИДЕТЕЛЬСТВО

о государственной регистрации программы для ЭВМ

№ 2023663314

Метод функций стохастической чувствительности паттернов в математических моделях реакции-диффузии.

Правообладатель: ***Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н.Ельцина» (RU)***

Авторы: ***Колиниченко Александр Павлович (RU), Ряшко Лев Борисович (RU)***

Заявка № **2023661142**

Дата поступления **01 июня 2023 г.**

Дата государственной регистрации

в Реестре программ для ЭВМ ***21 июня 2023 г.***

Руководитель Федеральной службы

по интеллектуальной собственности

ДОКУМЕНТ ПОДПИСАН ЭЛЕКТРОННОЙ ПОДПИСЬЮ

Сертификат 429b6a0fe3853164baf96f83b73b4aa7

Владелец **Зубов Юрий Сергеевич**

Действителен с 10.05.2023 по 02.08.2024

Ю.С. Зубов

Приложение В. Свидетельство о регистрации программы ЭВМ №2024660528

РОССИЙСКАЯ ФЕДЕРАЦИЯ

СВИДЕТЕЛЬСТВО

о государственной регистрации программы для ЭВМ

№ 2024660528

Моделирование диффузионной неустойчивости в термохимическом реакторе

Правообладатель: ***Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н.Ельцина» (RU)***

Авторы: ***Колиниченко Александр Павлович (RU), Ряшко Лев Борисович (RU)***

Заявка № **2024619420**

Дата поступления **02 мая 2024 г.**

Дата государственной регистрации

в Реестре программ для ЭВМ ***07 мая 2024 г.***

Руководитель Федеральной службы

по интеллектуальной собственности

ДОКУМЕНТ ПОДПИСАН ЭЛЕКТРОННОЙ ПОДПИСЬЮ

Сертификат 429b6a0fe3853164baf96f83b73b4aa7

Владелец **Зубов Юрий Сергеевич**

Действителен с 10.05.2023 по 02.08.2024

Ю.С. Зубов