

УДК 621.373.12.532

## ТЕОРИЯ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ФРОНТА В БИСТАБИЛЬНЫХ ДВУХКОМПОНЕНТНЫХ СИСТЕМАХ

Ю. Д. Калафати, Ю. А. Ржанов

Построена теория распространения фронта в двухкомпонентных бистабильных реакционно-диффузионных системах, для которых выполняются неравенства  $\tau_p/\tau_s \ll 1$  и  $l_p/l_s \ll 1$ , где  $\tau_p, \tau_s$  — характерные времена релаксации,  $l_p$  и  $l_s$  — характерные диффузионные длины активатора и ингибитора соответственно. Методами сингулярной теории возмущений получены уравнения для скорости распространения фронта. В случае кусочно-линейной аппроксимации нелинейных источников найдены решения уравнений. Показано, что если  $v_p/v_s < 1$ , где  $v_p = l_p/\tau_p$ ,  $v_s = l_s/\tau_s$  — характерные скорости, то существует лишь одно решение для скорости. Если же  $v_p/v_s > 1$ , то при увеличении параметра неравновесности возникают три решения для скорости, два из которых устойчивы. При этом в системе оказывается возможным распространение и уединенной волны — импульса. Сделан вывод о том, что бифуркационным параметром, отвечающим за существование бегущих структур в реакционно-диффузионных системах, является отношение  $v_p/v_s$ . Результаты моделирования процесса распространения фронта на ЭВМ в основном подтвердили выводы теории. Обнаружено, что дискретизация, возникающая при численном моделировании, приводит к стабилизации ряда неустойчивых решений.

В настоящее время широко известны примеры неравновесных физических, химических и биологических систем, в которых наблюдаются автоволновые процессы [1-4]. Наиболее яркий пример такой системы — химическая реакция Белоусова — Жаботинского.

Многие характерные особенности обнаруженных автоволновых процессов удается описать с помощью уравнений

$$\tau_p \frac{\partial P}{\partial t} - l_p^2 \frac{\partial^2 P}{\partial z^2} = F_p(P, S); \quad (1)$$

$$\tau_s \frac{\partial S}{\partial t} - l_s^2 \frac{\partial^2 S}{\partial z^2} = F_s(P, S), \quad (2)$$

где  $\tau_p, \tau_s$  — характерные временные, а  $l_p = \sqrt{D_p \tau_p}$ ,  $l_s = \sqrt{D_s \tau_s}$  — пространственные масштабы изменения кинетических переменных, например концентраций химических реагентов  $P$  и  $S$ ;  $D_p$  и  $D_s$  — коэффициенты диффузии,  $F_p(P, S)$ ,  $F_s(P, S)$  — нелинейные функции концентраций. В дальнейшем нас будет интересовать случай, когда нуль-изоклины уравнений (1) и (2)

$$F_p(P, S) = 0; \quad (3)$$

$$F_s(P, S) = 0 \quad (4)$$

имеют вид, показанный на рис. 1. На рисунке кривая 1 соответствует уравнению (3) и демонстрирует неоднозначную зависимость  $P$  от  $S$ . На этом основании переменную  $P$  будем называть автокаталитической. Рис. 1а и рис. 1б отличаются друг от друга числом пересечений кривых 1 и 2. На рис. 1а имеется три пересечения, что соответствует существованию трех корней системы уравнений (3), (4). Это означает, что в системе имеется три стационарных однородных состояния. Ана-

лиз устойчивости этих состояний показывает, что два из них  $((P_1, S_1)$  и  $(P_3, S_3))$  устойчивы, а одно  $(P_2, S_2)$  неустойчиво.

Кривые на рис. 1б пересекаются только в одной точке, которая соответствует устойчивому стационарному однородному состоянию системы.

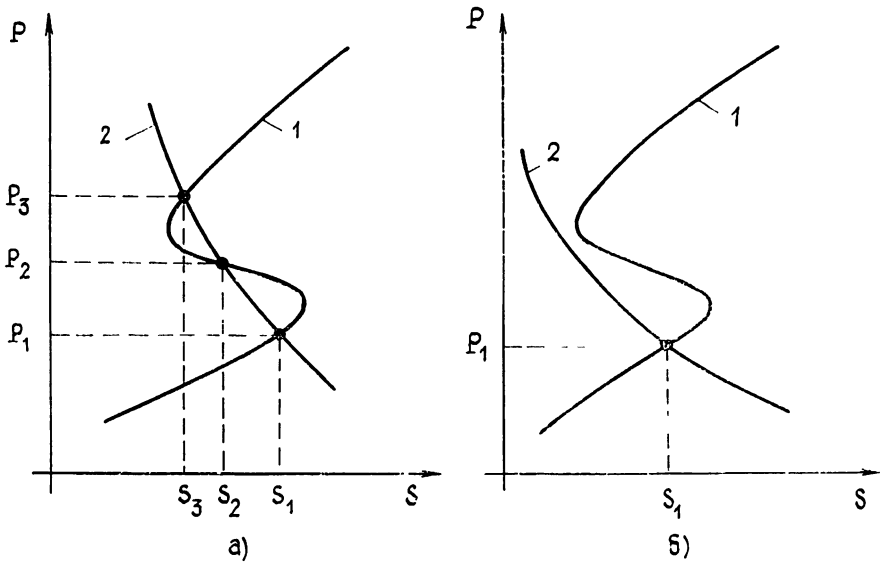


Рис. 1.

В ряде работ [4, 5] было показано, что если  $\tau_p/\tau_s \ll 1$  и  $l_s=0$ , то уравнения содержат решения, описывающие распространение бегущего импульса. При этом задача описания импульса распадается на две части. Первая часть сводится просто к описанию распространения фронта с помощью уравнения (1) при постоянной величине  $S$ . Вторая часть описывает релаксацию медленной переменной  $S$  при условии  $F_p(P, S)=0$ .

С другой стороны, известно [1-4, 6], что если  $l_p < l_s$ , то в системе возможно образование неподвижных пространственно неоднородных структур. Поэтому возникает вопрос: при каком соотношении параметров системы  $\tau_p$ ,  $\tau_s$ ,  $l_p$ ,  $l_s$  существуют бегущие структуры, а при каких неподвижные?

В работе [7] было высказано предположение, что область параметров, при которых существуют бегущие структуры, определяется всего одной универсальной комбинацией  $v_p/v_s$ , где  $v_p=l_p/\tau_p$ , а  $v_s=l_s/\tau_s$ . В ряде последующих сообщений [8, 9] были приведены результаты исследования бегущих структур для случая кусочно-линейных функций  $F_p$  и  $F_s$ . Оказалось, что в этой модели область параметров, при которых существуют бегущие структуры, определяется условием

$$v_p/v_s > 1, \quad (5)$$

что подтверждает выдвинутую в [7] гипотезу.

Цель данной работы — подробный вывод условия (5), исследование устойчивости полученных решений и сравнение теории с результатами численного моделирования.

**Обсуждение модели.** Мы ограничимся рассмотрением только бистабильных систем (рис. 1а). Хорошо известно, что в этом случае в системе возможно распространение фронта, переводящего систему из одного устойчивого однородного состояния в другое\*. Для исследова-

\* Для систем с  $l_s=0$  было показано, что в бистабильных системах возможно существование и единичных решений — бегущего импульса [10].

дования стационарной формы фронта перейдем в уравнениях (1), (2) к автомодельной переменной  $f = z/l_s - v(t/\tau_s)$ , тогда

$$-\varepsilon_1 v \frac{dP}{df} - \varepsilon_2^2 \frac{d^2 P}{df^2} = F_p(P, S); \quad (6)$$

$$-v \frac{dS}{df} - \frac{d^2 S}{df^2} = F_s(P, S). \quad (7)$$

Уравнения (6), (7) необходимо дополнить граничными условиями

$$\begin{aligned} P &\rightarrow P_1 \Big|_{f \rightarrow +\infty}, & P &\rightarrow P_3 \Big|_{f \rightarrow -\infty}, \\ S &\rightarrow S_1 \Big|_{f \rightarrow +\infty}, & S &\rightarrow S_3 \Big|_{f \rightarrow -\infty}, \end{aligned}$$

которые означают, что на минус бесконечности система находится в состоянии 3, а на плюс бесконечности — в состоянии 1. В дальнейшем мы будем исследовать уравнения (6), (7) в предположении

$$\tau_p/\tau_s = \varepsilon_1 \ll 1, \quad l_p/l_s = \varepsilon_2 \ll 1. \quad (8)$$

Как видно из результатов [7-9], бифуркация бегущего решения возникает как раз в области параметров, удовлетворяющих условию (8).

Наличие малых параметров позволяет использовать сингулярную теорию возмущений, развитую в работах [11, 12]. При этом уравнения (6), (7) в области быстрых движений принимают вид

$$-\varepsilon_1 v \frac{dP^*}{df} - \varepsilon_2^2 \frac{d^2 P^*}{df^2} = F_p(P^*, S^*); \quad (9)$$

$$S^* = \text{const}, \quad (10)$$

где звездочкой обозначаются переменные в области быстрых движений. Уравнение (9) удобно записать в символическом виде  $v = (\varepsilon_2/\varepsilon_1)\varphi(S^*)$ , где  $\varphi(S^*)$  — некоторая функция. Если  $F_p(P, S)$  — кусочно-линейная функция или кубический полином, то  $\varphi(S^*)$  находится в явном виде.

В области «медленных» движений уравнения (6), (7) примут вид

$$F_p(P, S) = 0; \quad (11)$$

$$-v \frac{dS}{df} - \frac{d^2 S}{df^2} = F_s(P, S). \quad (12)$$

Решение уравнений (9), (10) из области быстрых движений необходимо затем сшить с решением уравнений (11), (12) в области медленных изменений. В задаче о распространении фронта имеется две области медленных изменений I и II (рис. 2). Вместо того чтобы проводить сшивку решений из областей быстрых и медленных изменений для быстрой переменной  $P$ , мы сформулируем эквивалентную процедуру, но только для медленной переменной. В нулевом порядке теории возмущений решения из области I и из области II сшиваются с помощью следующих условий:

$$S_I|_{f \rightarrow 0^+} = S_{II}|_{f \rightarrow 0^-}; \quad (13)$$

$$\frac{dS_I}{df} \Big|_{f \rightarrow 0^+} = \frac{dS_{II}}{df} \Big|_{f \rightarrow 0^-}. \quad (14)$$

где  $f \rightarrow 0^\pm$  означает стремление переменной к нулю слева и справа от

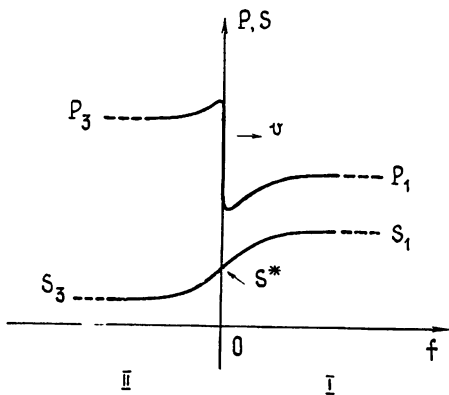


Рис. 2.

области быстрых изменений соответственно.

Уравнения (9)–(12) допускают аналитическое решение, если нелинейные источники  $F_p$  и  $F_s$  являются кусочно-линейными функциями. В качестве этих источников рассмотрим следующие\*:

$$F_p(P, S) = W\Theta(P - P_0) - P + S; \quad (15)$$

$$F_s(P, S) = [1 - \Theta(P - P_0)]J + (P - S) - (S - S_0), \quad (16)$$

где  $\Theta(P)$  — функция единичного скачка,  $P_0, S_0, W, J$  — параметры.

Нуль-изоклины (3), (4) имеют три пересечения при

$$0 < a \leq 2, \quad a \leq b \leq 2, \quad (17)$$

где

$$a \equiv J/W, \quad b \equiv (P_0 - S_0)/W.$$

**Решение.** В области быстрых движений уравнение (9) решается [7], и мы получаем связь между скоростью и величиной  $S^*$ :

$$(W + S^* - P_0)\beta_+ + (P_0 - S^*)\beta_- = 0, \quad (18)$$

где

$$\beta_{\pm} = -v/2v_p \pm \sqrt{(v/2v_p)^2 + 1}.$$

Решение уравнений (11), (12) в области медленных движений также не представляет труда. Подставляя решения в условия сшивки, находим

$$(S_3 - S^*)\gamma_+ + (S^* - S_1)\gamma_- = 0, \quad (19)$$

$$\gamma_{\pm} = -1 \pm \sqrt{1 + (2v_s/v)^2}.$$

Из (18) и (19) следует окончательно уравнение относительно скорости фронта:

$$v[(v^2 + 4v_p^2)^{-1/2} + (1 - a)(v^2 + 4v_s^2)^{-1/2}] = a + 2(1 - b). \quad (20)$$

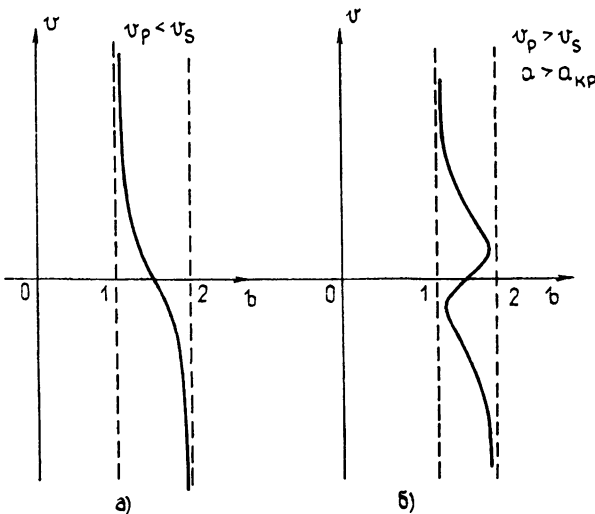


Рис. 3.

На рис. 3 показан вид зависимости скорости от внешних парамет-

\* Функцию  $F_s$  можно было бы выбрать гораздо более простой, например линейной:  $AP + BS + D$ , где  $A, B, D$  — константы, как в [11]. Мы выбрали  $F_s$  в виде (16), так как тогда уравнения (15), (16) описывают реальную физическую систему [7]. Результаты анализа, однако, мы сформулируем в таком виде, что они будут зависеть только от взаимного расположения точек пересечения нуль-изоклин, а не от конкретного вида  $F_s$ .

ров. Покажем, что уравнение (20) действительно имеет три корня, только если  $v_p > v_s$ . Для этого продифференцируем (20) по параметру  $b$ . Если зависимость  $v$  от  $b$  неоднозначна, то при некотором значении  $b$  производная  $dv/db$  стремится к бесконечности. Нетрудно показать, что производная стремится к бесконечности, только если

$$v_p/v_s > 1, \quad a > a_{кр} \equiv 1 + v_s/v_p. \quad (21)$$

Рассмотрим теперь такую область параметров  $a$  и  $b$ , для которой уравнение (20) определяет как движущиеся, так и стационарные фронты. Для существования стационарного фронта, скорость которого  $v=0$ , необходимо выполнение условия (условия Максвелла)

$$2 - 2b + a = 0. \quad (22)$$

При выполнении (22) мы получаем из уравнения (20) при  $v_p/v_s < 1$  одно решение  $v=0$ , а при  $v_p/v_s > 1$  или одно, при  $a < a_{кр}$ , или три решения при  $a > a_{кр}$ :

$$v = 0, \quad v = \pm 2 \sqrt{\frac{v_p^2(a-1) - v_s^2}{1 - (a-1)}}. \quad (23)$$

Кусочно-линейная аппроксимация позволяет проанализировать устойчивость стационарного решения. Оказалось (см. Приложение 1), что инкремент нарастания малых возмущений  $\lambda$  для решения с  $v=0$  меняет знак при увеличении параметра  $a$ :

$$\lambda = -1 + (a-1)(v_p/v_s), \quad (24)$$

и стационарное решение становится неустойчивым. Видно, что условие потери устойчивости стационарного решения совпадает с критерием возникновения бегущего решения (21).

Таким образом, нам удалось доказать на примере кусочно-линейной аппроксимации источников, что бифуркационным параметром, определяющим существование бегущих фронтов, является  $v_p/v_s$ .

**Численное моделирование.** Существование движущегося фронта переключения в зависимости от начальных условий исследовалось нами на модели (1), (2), (15), (16) при значениях параметров, соответствующих условию Максвелла (22),

$$W=6, \quad J=8, \quad P_0=12, \quad S_0=2, \quad \varepsilon_1=10^{-3}, \quad \varepsilon_2=10^{-1},$$

так что  $v_p/v_s = \varepsilon_2/\varepsilon_1 \gg 1$ . При этом реализуется триггерный режим с устойчивыми точками ( $P_1=10, S_1=10$ ) и ( $P_3=14, S_3=8$ ). Для определенности начальные условия выбирались в виде

$$P(z) = P_1 + (P_3 - P_1) \Theta(z_0); \quad (25)$$

$$S(z) = S_1 + (S_3 - S_1) \Theta(z_0 + \Delta z). \quad (26)$$

Вследствие дискретности численной задачи величина  $\Delta z$  кратна расстоянию между соседними узлами равномерной разностной сетки  $\delta z$ . Мы обнаружили, что при каждой величине  $\delta z$  (степени дискретизации) существует некоторое пороговое значение  $\Delta z^*$ . При  $\Delta z \gg \Delta z^*$  начинается устойчивое распространение триггерной волны, при  $\Delta z < \Delta z^*$  устанавливается неподвижная структура. Зависимость  $\Delta z^*$  от  $\delta z$  (изображенная на рис. 4) монотонна и превышает размер моделируемой системы при  $\delta z \gtrsim 0,069$ . При  $\delta z \gtrsim 0,069$  любые начальные условия, относящиеся к классу (25), (26), приводили к установлению неподвижного фронта.

Вид зависимости области притяжения неподвижного решения от дискретизации показывает, что с уменьшением шага разностной сетки величина  $\Delta z^*$  достаточно быстро убывает. Это свидетельствует, с одной стороны, в пользу выводов теории о неустойчивости статических

решений в континуальном пределе и, с другой стороны, говорит о стабилизации этих решений вследствие дискретности. Важно отметить, что дискретность может быть связана как с приемами численного моделирования, так и с природой физического объекта.

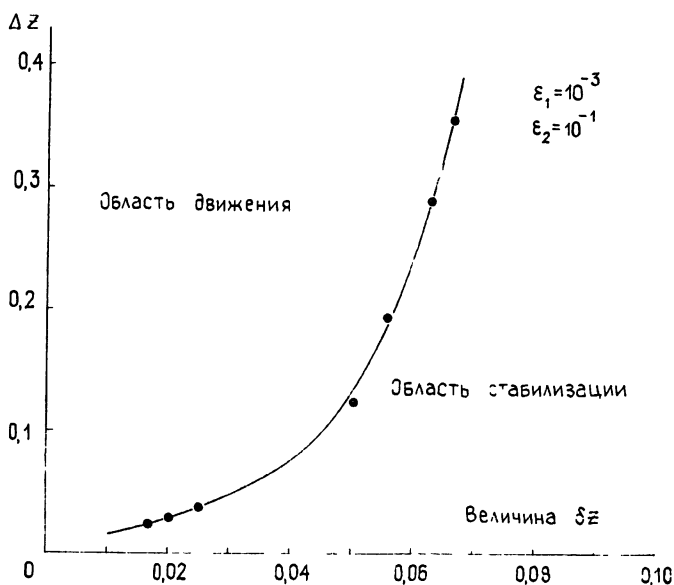


Рис. 4.

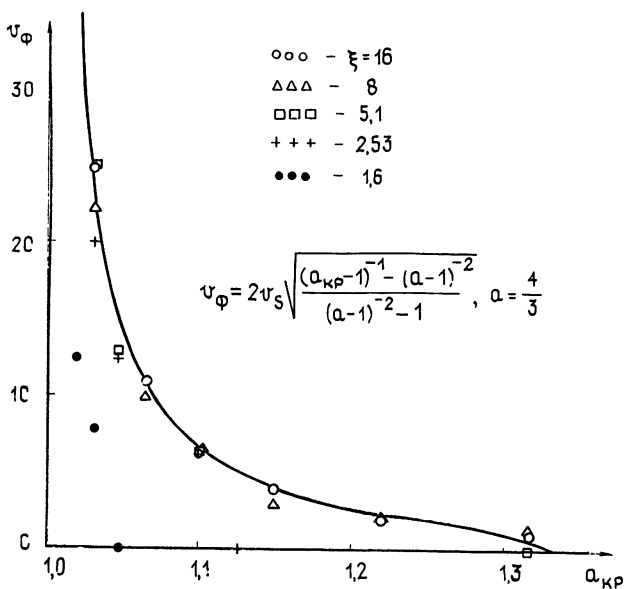


Рис. 5.

Оценить влияние дискретизации на поведение решения можно по сопоставлению теоретических и численных результатов. В рассматриваемой задаче степень дискретизации определяется параметром  $\xi = \epsilon_2/\delta z$ , который можно интерпретировать как число точек разностной сетки, уместающихся в области быстрого изменения переменной. На рис. 5 представлены теоретическая и численные зависимости скорости распространения фронта от параметра  $a_{кр} \equiv 1 + v_s/v_p$ . При  $\xi \gg 5$  наблюдается хорошее согласие теоретических и численных результатов. Из этого следует, что аналитические результаты, полученные в нулевом порядке теории возмущений, не только качественно

предсказывают поведение решений, но и дают их количественную оценку. При параметре  $\xi < 5$  численные значения скорости значительно отличаются от аналитических. По-видимому, дискретизация играет принципиальную роль при моделировании распространения фронта в области параметров, где теория предсказывает существование фронтов, распространяющихся с малой скоростью.

**Обсуждение результатов.** Полученные в работе результаты для фронта можно обобщить на случай распространения импульса. Например, в триггерном режиме существование импульса возможно, если уравнение для скорости фронта (20) имеет три решения, т. е. если выполняется критерий (21). Поэтому можно утверждать, что в системах, описываемых уравнениями (1), (2), бегущие структуры (фронты, импульсы и т. п.) возникают, только если отношение характерных скоростей  $v_p/v_s$  больше некоторого критического значения (в рассматриваемой модели это значение равно единице). Интересно отметить, что в триггерном режиме возможно распространение импульса со сколь угодно малой скоростью. Действительно, если выполняются условия Максвелла (22), то при  $v_p > v_s$  и  $(a - a_{кр})/a_{кр} \ll 1$  появляется возможность запустить с малой скоростью сначала передний, а затем с той же скоростью задний фронт. При этом размер импульса, строго говоря, бесконечен, но при малом отклонении параметров от условия Максвелла он становится конечным.

## ПРИЛОЖЕНИЕ

### Исследование устойчивости неподвижного фронта

Для исследования устойчивости неподвижного фронта перейдем в уравнениях (1), (2) к переменным  $\tau = t/\tau_s$ ,  $f = z/l_s - vt/\tau_s$  и будем искать решение полученных уравнений в виде

$$P(\tau, f) = P^{(st)}(f) + e^{\lambda\tau}\delta P(f); \quad (\text{П.1})$$

$$S(\tau, f) = S^{(st)}(f) + e^{\lambda\tau}\delta S(f), \quad (\text{П.2})$$

где  $P^{(st)}$ ,  $S^{(st)}$  — точные решения, соответствующие фронту,  $\lambda$  — инкремент нарастания малых возмущений. Линеаризованные относительно малых отклонений  $\delta P$ ,  $\delta S$  уравнения примут вид

$$\varepsilon_1 \lambda \delta P - v \varepsilon_1 \frac{d\delta P}{df} - \varepsilon_2^2 \frac{d^2 \delta P}{df^2} = \left( \frac{\delta F_P}{\delta P} \right)_{\substack{P=P^{(st)} \\ S=S^{(st)}}} \delta P + \left( \frac{\delta F_P}{\delta S} \right)_{\substack{P=P^{(st)} \\ S=S^{(st)}}} \delta S; \quad (\text{П.3})$$

$$\lambda \delta S - v \frac{d\delta S}{df} - \frac{d^2 \delta S}{df^2} = \left( \frac{\delta F_S}{\delta P} \right)_{\substack{P=P^{(st)} \\ S=S^{(st)}}} \delta P + \left( \frac{\delta F_S}{\delta S} \right)_{\substack{P=P^{(st)} \\ S=S^{(st)}}} \delta S. \quad (\text{П.4})$$

Уравнения (П.3), (П.4), дополненные граничными условиями  $\delta P \rightarrow 0$  и  $\delta S \rightarrow 0$  при  $f \rightarrow \pm\infty$ , являются уравнениями для собственных значений с потенциалом, зависящим от вида решения, соответствующего фронту. Для кусочно-линейной зависимости источников (15), (16) эти потенциалы являются просто дельта-функциями, и уравнения (П.3), (П.4) решаются аналитически. Окончательно уравнение относительно  $\lambda$  для неподвижного фронта имеет вид

$$\varepsilon_2 \alpha - \alpha_+ (\alpha_+ + \alpha_-) - [1 - \varepsilon_2 (1 - a)] (\lambda + 2 + \alpha_+ \alpha_-) + a = 0, \quad (\text{П.5})$$

где

$$\alpha_{\pm} = \left\{ \left[ \frac{1}{2} \left( \lambda + 2 + \frac{\varepsilon_1 \lambda + 1}{\varepsilon_2^2} \right) \pm \left[ \frac{1}{4} \left( \lambda + 2 + \frac{\varepsilon_1 \lambda + 1}{\varepsilon_2^2} \right)^2 - \frac{(\varepsilon_1 \lambda + 1)(\lambda + 2) - 1}{\varepsilon_2^2} \right]^{1/2} \right]^{1/2} \right\}.$$

Можно убедиться, что с точностью до малых параметров уравнение (П.5) имеет корень

$$\lambda = -1 + (a - 1)(v_p/v_s). \quad (\text{П.6})$$

Из (П.6) следует, что неподвижный фронт может потерять устойчивость, если (поскольку  $a < 2$ )

$$1) v_p/v_s > 1, \quad 2) a > 1 + v_s/v_p,$$

что совпадает с условием возникновения бегущего фронта.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Николис Г., Пригожин И. Самоорганизация в неравновесных системах. — М.: Мир, 1979.
2. Хакен Г. Синергетика. — М.: Мир, 1980. — 406 с.
3. Жаботинский А. М. Концентрационные автоколебания. — М.: Наука, 1974. — 311 с.
4. Васильев В. А., Романовский Ю. М., Яхно В. Г. // УФН, 1979. Т. 128. С. 625.
5. Островский Л. А., Яхно В. Г. // Биофизика. 1975. Т. 20. С. 489.
6. Белинцев Б. Н. // УФН. 1983. Т. 141. С. 55.
7. Қалафати Ю. Д., Сербинов И. А., Рябова Л. А. // ДАН СССР. 1982. Т. 263. С. 862.
8. Қалафати Ю. Д. // Тезисы докл. 12-го Совещания по теории полупроводников. — Киев, 1985. Ч. 1. С. 309.
9. Қалафати Ю. Д., Ржанов Ю. А. // Тезисы докл. Всесоюзного совещания по самоорганизации в физических, химических и биологических системах «Синергетика-86». — Кишинев: Штиинца, 1986. С. 52.
10. Зайкин А. Н. // Биофизика. 1975. Т. 20. С. 772.
11. Koga S., Kuramoto Y. // Progr. Theor. Phys. 1980. V. 63. P. 106.
12. Ortoleva P., Ross J. // J. Chem. Phys. 1975. V. 63. P. 3398.

Институт радиотехники и электроники  
АН СССР

Поступила в редакцию  
12 июня 1987 г.

#### THEORY OF FRONT PROPAGATION IN BISTABLE TWO-COMPONENT SYSTEMS

*Yu. D. Kalafati, Yu. A. Rzhanov*

Front propagation theory in bistable two-component systems with  $\tau_p/\tau_s \ll 1$  and  $l_p/l_s \ll 1$  (where  $\tau_p, \tau_s$  — characteristic relaxation times,  $l_p, l_s$  — characteristic diffusion lengths of activator and inhibitor, respectively) is developed. The methods of singular perturbation theory are used to obtain the equations for front velocity. Piecewise-linear approximation of nonlinear sources makes it possible to solve equations analytically. In the case  $v_p/v_s < 1$ , where  $v_p = l_p/\tau_p$ ,  $v_s = l_s/\tau_s$  — characteristic subsystem velocities, only one solution for the front velocity exists. If  $v_p/v_s > 1$ , then three solutions for the front velocity occur (two of them are stable) in some region of control parameter. In this region the propagation of the sole wave — impulse is also possible. It is supposed that  $v_p/v_s$  is bifurcation parameter which determines whether the moving structures in the reaction-diffusion systems exist or not. The results of numerical modelling of front propagation are in good agreement with theoretical predictions. Some solutions, unstable in the theoretical investigation, are stable in the numerical modelling due to the discretization.