ЖЭТФ, 2010, том 137, вып. 1, стр. 183–190

НЕОБХОДИМОЕ УСЛОВИЕ ВОЗНИКНОВЕНИЯ ДИФФУЗИОННОЙ НЕУСТОЙЧИВОСТИ В СРЕДАХ С НЕКЛАССИЧЕСКОЙ ДИФФУЗИЕЙ

В. П. Шкилев *

Институт химии поверхности Национальной академии наук Украины
03164, Киев, Украина

Поступила в редакцию 31 августа 2009 г.

Выведено необходимое условие возникновения диффузионной неустойчивости в средах, диффузия в которых не подчиняется классическим законам Фика. В качестве уравнений, моделирующих процессы диффузии — реакции, использованы уравнения, выведенные в рамках модели случайных блужданий с непрерывным временем в работе [8]. Функция распределения времени ожидания представлена в виде суммы конечного числа экспонент. Показано, что переход к диффузионному пределу по временно́й переменной является некорректной операцией, если он используется при рассмотрении диффузионной неустойчивости в средах с функцией распределения, отличающейся от пуассоновской.

1. ВВЕДЕНИЕ

В классической работе Тьюринга [1] показано, что пространственно-однородное стационарное состояние реакционно-диффузионной системы при определенных условиях может становиться неустойчивым по отношению к малым возмущениям вследствие взаимодействия нелинейной кинетики реакции с диффузией. Образующиеся в результате такого взаимодействия пространственные структуры (структуры Тьюринга) являются предметом активных теоретических [2] и экспериментальных [3, 4] исследований.

Во многих реальных ситуациях структуры Тьюринга формируются в неоднородных средах, диффузионные процессы в которых могут не подчиняться классическим законам диффузии. В частности, реакционно-диффузионная система, в которой структуры Тьюринга были впервые обнаружены экспериментально, является неоднородной [3]. В связи с этим в последнее время стали появляться теоретические работы, в которых изучается образование структур Тьюринга в средах с аномальными диффузионными свойствами [5–10].

*E-mail: shkilevv@ukr.net

В работе [8] в рамках нелинейной модели случайных блужданий с непрерывным временем (СБНВ) были выведены уравнения субдиффузии — реакции, которые затем использовались в работах [8, 9] при рассмотрении необходимых условий возникновения диффузионной неустойчивости в двухкомпонентной системе. Поскольку при рассмотрении общего случая возникают аналитические сложности, авторы ограничились выводом необходимого условия для частного случая, когда один компонент имеет нормальные диффузионные свойства, а другой — аномальные. При этом аномальное поведение они моделировали стандартным образом — путем введения предположения, что в диффузионном пределе, т. е. при $s \to 0$, лаплас-образ функции распределения времени ожидания представляется в виде

$$\psi(s) \approx 1 - (\eta s)^n, \tag{1}$$

где s — переменная Лапласа, η и n — параметры, удовлетворяющие условиям $\eta > 0$, $0 < n < 1$.

В данной работе необходимое условие возникновения диффузионной неустойчивости в системах, описываемых уравнениями, полученными в [8], выводится для случая, когда оба компонента имеют аномальные диффузионные свойства. Аналитические сложности преодолеваются за счет того, что функция распределения времени ожидания представляется в виде суммы конечного числа экспоненциальных функций:

$$\psi(t) = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i \mu_i \exp(-\mu_i t). \tag{2}$$

Анализ полученного необходимого условия показывает, что возникновение диффузионной неустойчивости существенным образом зависит от таких свойств функции распределения, которые с точки зрения чистой (протекающей в отсутствие химических реакций) диффузии являются несущественными. Поскольку в результате перехода к диффузионному пределу происходит пренебрежение несущественными для диффузии свойствами, полученный результат означает, что при рассмотрении диффузионной неустойчивости в средах с неклассическим поведением переходить к диффузионному пределу по временнóй переменной нельзя.

2. ВЫВОД НЕОБХОДИМОГО УСЛОВИЯ ВОЗНИКНОВЕНИЯ ДИФФУЗИОННОЙ НЕУСТОЙЧИВОСТИ

В работе [8] в рамках нелинейной модели СБНВ, предложенной в работе [11], выведены следующие уравнения субдиффузии-реакции:

$$\begin{gathered} \frac{\partial \rho_i(t,r)}{\partial t} = a_i^2 \Delta \left\{ \int_0^t \Theta_i(t-t')\rho_i(t',r) \times \right. \\ \left. \times \exp\left[-\int_{t'}^{t} \frac{R_i^-(\rho(t'',r))}{\rho_i(t'',r)}\, dt'' \right] dt' \right\} - \\ - R_i^-(\rho(t,r)) + R_i^+(\rho(t,r)), \quad i = 1, 2, \ldots, M. \end{gathered} \tag{3}$$

Здесь $\rho_i(t,r)$ — концентрация i-го компонента реагирующей смеси; a_i^2 — коэффициент, характеризующий среднюю длину скачка частиц i-го компонента; Δ — оператор Лапласа; $\Theta_i(t)$ — функция памяти, которая в пространстве изображений Лапласа представляется в виде

$$\Theta_i(s) = \frac{s\psi_i(s)}{1-\psi_i(s)},$$

где $\psi_i(s)$ — преобразование Лапласа функции распределения времени ожидания частиц i-го компонента, $R_i^-(\rho(t,r))$ и $R_i^+(\rho(t,r))$ — функции, описывающие гибель и рождение частиц i-го компонента; через $\rho(t,r)$ обозначен полный набор концентраций $(\rho_1(t,r), \rho_2(t,r), \ldots, \rho_M(t,r))$; M — общее число компонентов в смеси.

Если функция $\psi_i(t)$ имеет вид суммы N экспонент, то немарковскому уравнению (3) можно поставить в соответствие систему N марковских уравнений, описывающих те же процессы диффузии-реакции, что и уравнение (3) [12]. При выводе необходимого условия неустойчивости будем исходить именно из марковских уравнений, так как в этом случае выкладки оказываются проще. Будем рассматривать двухкомпонентную систему. Концентрацию одного компонента обозначим через $u(t,r)$, а концентрацию другого через $\nu(t,r)$. Исходную систему уравнений запишем в следующем виде:

$$\begin{gathered} \frac{\partial u(t,r)}{\partial t} = a_u^2 \sum_{j=1}^{N} \mu_j \Delta u_j(t,r) + \\ + f^1(u,\nu) - u(t,r) f^2(u,\nu), \end{gathered} \tag{4}$$

$$\begin{gathered} \frac{\partial u_i(t,r)}{\partial t} = -\mu_i u_i(t,r) + \alpha_i F^u(t,r) + \\ + \alpha_i f^1(u,\nu) - u_i(t,r) f^2(u,\nu), \quad i = 1, 2, \ldots, N, \end{gathered} \tag{5}$$

$$\begin{gathered} \frac{\partial \nu(t,r)}{\partial t} = a_\nu^2 \sum_{j=1}^{N} \kappa_j \Delta \nu_i(t,r) + \\ + g^1(u,\nu) - \nu(t,r) g^2(u,\nu), \end{gathered} \tag{6}$$

$$\begin{gathered} \frac{\partial \nu_i(t,r)}{\partial t} = -\kappa_i \nu_i(t,r) + \alpha_i F^\nu(t,r) + \\ + \alpha_i g^1(u,\nu) - \nu_i(t,r) g^2(u,\nu), \quad i = 1, 2, \ldots, N. \end{gathered} \tag{7}$$

Здесь α_i, μ_i, κ_i — наборы параметров, через которые выражаются функции распределения времени ожидания первого компонента

$$\psi_u(t) = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i \mu_i \exp(-\mu_i t)$$

и второго компонента

$$\psi_\nu(t) = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i \kappa_i \exp(-\kappa_i t).$$

Параметры α_i подчиняются условию

$$\sum_{i=1}^{N} \alpha_i = 1.$$

Функции $f^1(u,\nu)$ и $f^2(u,\nu)$ следующим образом выражаются через функции $R_1^-(u(t,r),\nu(t,r))$ и $R_1^+(u(t,r),\nu(t,r))$:

$$f^1(u,\nu) = R_1^+(u(t,r),\nu(t,r)),$$

$$f^2(u,\nu) = \frac{R_1^-(u(t,r),\nu(t,r))}{u(t,r)}.$$

Функции $u_i(t,r)$, $\nu_i(t,r)$ должны кроме уравнений (5) и (7) удовлетворять условиям

$$\sum_{j=1}^{N} u_i(t,r) = u(t,r), \quad \sum_{j=1}^{N} \nu_i(t,r) = \nu(t,r).$$

В работе [12] уравнения (4)–(7) были получены в рамках модели случайных ловушек с использованием приближения среднего поля. В этом случае они допускают наглядную физическую интерпретацию. Параметр N при этом имеет смысл числа различных типов ловушек, параметр α_i является долей ловушек i-го типа, а параметр $\mu_i(\kappa_i)$ равен величине, обратной среднему времени пребывания молекулы первого (второго) компонента в ловушке i-го типа. Функция $u_i(t,r)$ $(\nu_i(t,r))$ представляет собой концентрацию молекул первого (второго) компонента, находящихся в ловушках i-го типа. Если уравнения (3) являются адекватной моделью, а модель случайных ловушек при этом неадекватна, тогда уравнения (4)–(7) должны рассматриваться как формальное марковское представление немарковских уравнений (3). В этом случае параметры α_i, μ_i, κ_i и функции $u_i(t,r)$, $\nu_i(t,r)$ уже не будут иметь ясного физического смысла.

Пространственно-однородное стационарное решение уравнений (4)–(7) имеет вид

$$u_i^0 = \frac{\alpha_i}{\mu_i + f^{20}} \frac{u^0}{\Psi_u(f^{20})}, \tag{8}$$

$$\nu_i^0 = \frac{\alpha_i}{\kappa_i + g^{20}} \frac{\nu^0}{\Psi_\nu(g^{20})}, \tag{9}$$

где

$$f^{20} = f^2(u^0,\nu^0), \quad g^{20} = g^2(u^0,\nu^0),$$

$$\Psi_u(f^{20}) = \sum_{i=1}^{N} \frac{\alpha_i}{\mu_i + f^{20}}, \quad \Psi_\nu(g^{20}) = \sum_{i=1}^{N} \frac{\alpha_i}{\kappa_i + g^{20}},$$

пара u^0, ν^0 является решением системы уравнений

$$f^1(u,\nu) - uf^2(u,\nu) = 0,$$
$$g^1(u,\nu) - \nu g^2(u,\nu) = 0.$$

Вводя малые возмущения

$$U_i(t,r), V_i(t,r), U(t,r) = \sum_{i=1}^{N} U_i(t,r),$$

$$V(t,r) = \sum_{i=1}^{N} V_i(t,r),$$

подставляя в уравнения (4)–(7) выражения

$$u_i(t,r) = u_i^0 + U_i(t,r), \quad \nu_i(t,r) = \nu_i^0 + V_i(t,r),$$
$$u(t,r) = u^0 + U(t,r), \quad \nu(t,r) = \nu^0 + V(t,r)$$

и линеаризуя нелинейные члены, получим следующие уравнения для малых возмущений $U_i(t,r)$, $U(t,r)$ (уравнения для $V_i(t,r)$, $V(t,r)$ будут иметь аналогичный вид):

$$\frac{\partial U(t,r)}{\partial t} = a_u^2 \sum_{j=1}^{N} \mu_j \Delta U_j(t,r) + Df, \tag{10}$$

$$\frac{\partial U_i(t,r)}{\partial t} = -\mu_i U_i(t,r) + \alpha_i G^u(t,r) + \alpha_i Df^1 - \\ - U_i(t,r) f^{20} - u_i^0 Df^2, \quad i = 1,2,\ldots,N, \tag{11}$$

где

$$Df^1 = f_u^1 U(t,r) + f_\nu^1 V(t,r),$$
$$Df^2 = f_u^2 U(t,r) + f_\nu^2 V(t,r),$$
$$Df = f_u U(t,r) + f_\nu V(t,r),$$
$$f_u = f_u^1 - f^{20} - u^0 f_u^2, \quad f_\nu = f_u^1 - u^0 f_\nu^2,$$
$$f_u^1 = \left.\frac{\partial f^1(u,\nu)}{\partial u}\right|_{u^0,\nu^0}, \quad f_\nu^1 = \left.\frac{\partial f^1(u,\nu)}{\partial \nu}\right|_{u^0,\nu^0},$$
$$f_u^2 = \left.\frac{\partial f^2(u,\nu)}{\partial u}\right|_{u^0,\nu^0}, \quad f_\nu^2 = \left.\frac{\partial f^2(u,\nu)}{\partial \nu}\right|_{u^0,\nu^0}.$$

Совершим над уравнениями (10), (11) преобразования Фурье и Лапласа

$$sU(s,k) - U^0(k) = -a_u^2 k^2 \sum_{j=1}^{N} \mu_j U_j(s,k) + Df, \tag{12}$$

$$sU_i(s,k) - U_i^0(k) = -\mu_i U_i(s,k) + \alpha_i G^u(s,k) + \\ + \alpha_i Df^1 - U_i(s,k) f^{20} - u_i^0 Df^2, \quad i = 1,2,\ldots,N. \tag{13}$$

Исключая отсюда переменные $U_i(s,k)$, получаем (см. Приложение)

$$sU(s,k) - U^0(k) = \\ = Df - a_u^2 k^2 \frac{\varphi_u(f^{20}+s) - \psi_u(f^{20}+s)}{1 - \psi_u(f^{20}+s)} U^0(k) - \\ - a_u^2 k^2 \left\{ \Theta_u(f^{20}+s) U(s,k) - \right. \\ \left. - \frac{u^0 Df^2}{s} \left[\Theta_u(f^{20}+s) - \Theta_u(f^{20})\right] \right\}, \tag{14}$$

где $\varphi_u(x)$, $\psi_u(x)$, $\Theta_u(x)$ — следующие функции:

$$\varphi_u(x)=\sum_{i=1}^{N}\frac{\mu_i\beta_i}{\mu_i+x},\quad \psi_u(x)=\sum_{i=1}^{N}\frac{\mu_i\alpha_i}{\mu_i+x},$$

$$\Theta_u(x)=\psi_u(x)/\Psi_u(x).$$

Здесь введено обозначение $\beta_i=U_i^0/U^0$. Уравнение для $V(s,k)$ будет иметь аналогичный вид:

$$\begin{aligned}&sV(s,k)-V^0(k)=\\&=Dg-a_\nu^2k^2\frac{\varphi_\nu(g^{20}+s)-\psi_\nu(g^{20}+s)}{1-\psi_\nu(g^{20}+s)}V_0(k)-\\&-a_\nu^2k^2\left\{\Theta_\nu(g^{20}+s)V(s,k)-\right.\\&\left.-\frac{\nu^0Dg^2}{s}\left[\Theta_\nu(g^{20}+s)-\Theta_\nu(g^{20})\right]\right\},\end{aligned}\qquad(15)$$

где

$$Dg^2=g_u^2U(t,r)+g_\nu^2V(t,r),\quad Dg=g_uU(t,r)+g_\nu V(t,r),$$

$$g_u=g_u^1-g^{20}-\nu^0g_u^2,\quad g_\nu=g_\nu^1-\nu^0g_\nu^2,$$

$$g_u^1=\left.\frac{\partial g^1(u,\nu)}{\partial u}\right|_{u^0,\nu^0},\quad g_\nu^1=\left.\frac{\partial g^1(u,\nu)}{\partial \nu}\right|_{u^0,\nu^0},$$

$$g_u^2=\left.\frac{\partial g^2(u,\nu)}{\partial u}\right|_{u^0,\nu^0},\quad g_\nu^2=\left.\frac{\partial g^2(u,\nu)}{\partial \nu}\right|_{u^0,\nu^0},$$

$$\varphi_\nu(x)=\sum_{i=1}^{N}\frac{\kappa\gamma_i}{\kappa_i+x},\quad \psi_\nu(x)=\sum_{i=1}^{N}\frac{\kappa\alpha_i}{\kappa_i+x},$$

$$\Theta_\nu(x)=\frac{\psi_\nu(x)}{\Psi_\nu(x)},\quad \gamma_i=\frac{V_i^0}{V^0}.$$

Решая уравнения (14), (15), находим

$$U(s,k)=\frac{\Gamma_u(s,k)}{\Delta(s,k)},\quad V(s,k)=\frac{\Gamma_\nu(s,k)}{\Delta(s,k)},$$

где

$$\begin{aligned}&\Gamma_u(s,k)=\\&=U^0(k)\left\{1-a_u^2k^2\frac{\varphi_u(f^{20}+s)-\psi_u(f^{20}+s)}{1-\psi_u(f^{20}+s)}\right\}\times\\&\times\left\{s+a_\nu^2k^2\left\{\Theta_\nu(g^{20}+s)-\right.\right.\\&\left.\left.-\frac{\nu^0g_\nu^2}{s}\left[\Theta_\nu(g^{20}+s)-\Theta_\nu(g^{20})\right]\right\}-g_\nu\right\}+V^0(k)\times\\&\times\left\{f_\nu+a_u^2k^2\left\{\frac{u^0f_\nu^2}{s}\left[\Theta_u(f^{20}+s)-\Theta_u(f^{20})\right]\right\}\right\},\end{aligned}\qquad(16)$$

$$\begin{aligned}&\Gamma_\nu(s,k)=\\&=V^0(k)\left\{1-a_\nu^2k^2\frac{\varphi_\nu(f^{20}+s)-\psi_\nu(f^{20}+s)}{1-\psi_\nu(f^{20}+s)}\right\}\times\\&\times\left\{s+a_u^2k^2\left\{\Theta_u(f^{20}+s)-\right.\right.\\&\left.\left.-\frac{u^0f_u^2}{s}\left[\Theta_u(f^{20}+s)-\Theta_u(f^{20})\right]\right\}-f_u\right\}+U^0(k)\times\\&\times\left\{g_u+a_\nu^2k^2\left\{\frac{\nu^0g_u^2}{s}\left[\Theta_\nu(g^{20}+s)-\Theta_\nu(g^{20})\right]\right\}\right\},\end{aligned}\qquad(17)$$

$$\begin{aligned}&\Delta(s,k)=\left\{s+a_u^2k^2\left\{\Theta_u(f^{20}+s)-\right.\right.\\&\left.\left.-\frac{u^0f_u^2}{s}\left[\Theta_u(f^{20}+s)-\Theta_\nu(f^{20})\right]\right\}-f_u\right\}\times\\&\times\left\{s+a_\nu^2k^2\left\{\Theta_\nu(g^{20}+s)-\right.\right.\\&\left.\left.-\frac{\nu^0g_\nu^2}{s}\left[\Theta_\nu(g^{20}+s)-\Theta_\nu(g^{20})\right]\right\}-g_\nu\right\}-\\&-\left\{g_u+a_\nu^2k^2\left\{\frac{\nu^0g_u^2}{s}\left[\Theta_\nu(g^{20}+s)-\Theta_\nu(g^{20})\right]\right\}\right\}\times\\&\times\left\{f_\nu+a_u^2k^2\left\{\frac{u^0f_\nu^2}{s}\left[\Theta_u(f^{20}+s)-\Theta_u(f^{20})\right]\right\}\right\}.\end{aligned}\qquad(18)$$

Отсюда видно, что U является правильной дробно-рациональной функцией s. Легко можно убедиться в том, что ее полюсами являются только корни уравнения $\Delta(s)=0$. Следовательно, разложение Хевисайда функции $U(t,k)$ будет иметь вид

$$U(t,k)=\sum_{i=1}^{n}\sum_{l=1}^{m_i}H_{il}t^{m_i-l}e^{s_it},$$

где s_i — корни уравнения $\Delta(s)=0$, m_i — их кратности, H_{il} — не зависящие от времени коэффициенты [13]. Таким образом, если все корни s_i имеют отрицательные действительные части, то возмущение $U(t,k)$ будет со временем затухать, а если хотя бы один корень имеет положительную действительную часть, то оно будет расти. То же самое можно сказать о возмущении $V(t,k)$. Переход к неустойчивости (при изменении некоторого параметра) будет происходить, если все корни, кроме одного критического корня, сохраняют отрицательные действительные части, а действительная часть критического корня меняет знак с отрицательного на положительный. В случае неустойчивости Тьюринга мнимая часть критического корня должна быть равна нулю, следовательно, необходимым условием возникновения неустойчивости Тьюринга является условие $\Delta(s\to 0)=0$, т. е.

$$\left\{a_u^2k^2\left[\Theta_u(f^{20})-u^0f_u^2\Omega_u(f^{20})\right]-f_u\right\}\times$$
$$\times\left\{a_\nu^2k^2\left[\Theta_\nu(g^{20})-\nu^0g_\nu^2\Omega_\nu(g^{20})\right]-g_\nu\right\}-$$
$$-\left\{g_u+a_\nu^2k^2\nu^0g_u^2\Omega_\nu(g^{20})\right\}\times$$
$$\times\left\{f_\nu+a_u^2k^2u^0f_\nu^2\Omega_u(f^{20})\right\}=0, \quad (19)$$

где

$$\Omega_u(f^{20})=\left.\frac{\partial\Theta_u(s)}{\partial s}\right|_{s=f^{20}}, \quad \Omega_\nu(g^{20})=\left.\frac{\partial\Theta_\nu(s)}{\partial s}\right|_{s=g^{20}}.$$

3. ОБСУЖДЕНИЕ

В условие (19) входят величины $\Theta_u(f^{20})$ и $\Omega_u(f^{20})$, которые выражаются через функцию распределения $\psi_u(s)$ и ее первую производную в точке f^{20}, а также величины $\Theta_\nu(g^{20})$ и $\Omega_\nu(g^{20})$, которые выражаются через функцию распределения $\psi_\nu(s)$ и ее первую производную в точке g^{20}. Поскольку на устойчивость исследуется состояние, отличное от тривиального, значения f^{20} и g^{20} должны быть конечными величинами. Таким образом, при исследовании устойчивости требуется знать поведение функции распределения в окрестности некоторого конечного значения аргумента. В то же время на практике обычно используются уравнения диффузии-реакции, полученные в результате перехода к диффузионному пределу, т. е. к пределу бесконечно малых значений аргумента функций $\psi_u(s)$ и $\psi_\nu(s)$. Покажем, что при заданной кинетике реакции критическое отношение коэффициентов диффузии, найденное из условия (19), может принципиальным образом отличаться от критического отношения, найденного с использованием операции перехода к диффузионному пределу.

Поскольку в условие (19) входят значения функций $\Theta_i(s)$ и $\Omega_i(s)$ лишь в одной точке, разные функции будут давать одинаковые критические отношения коэффициентов диффузии, если они принимают одинаковые значения в этой точке. Используя этот факт, мы можем, не проводя вычислений, воспользоваться результатами расчетов, проведенных в работе [9]. В этой работе предполагалось, что один компонент обладает аномальными диффузионными свойствами, а второй — нормальными. Для первого компонента функции $\Theta_i(s)$ и $\Omega_i(s)$ имели следующий вид:

$$\Theta_u(s)=\frac{s^{1-\alpha}}{\eta_1^\alpha}, \quad \Omega_u(s)=\frac{1-\alpha}{(s\eta_1)^\alpha}, \qquad (20)$$

а для второго — следующий:

$$\Theta_\nu(s)=\frac{1}{\eta_2}, \quad \Omega_\nu(s)=0. \qquad (21)$$

Мы будем предполагать, что для первого компонента функции $\Theta_i(s)$ и $\Omega_i(s)$ имеют вид, соответствующий функции (2) при $N=2$:

$$\Theta_u(s)=\frac{1}{\xi}\,\frac{1+bs\tau}{1+s\tau}, \qquad (22)$$

$$\Omega_u(s)=\frac{\tau}{\xi}\,\frac{b-1}{(1+s\tau)^2}, \qquad (23)$$

где

$$\tau=\tau_1\tau_2/\xi, \quad \tau\in(0,\infty), \qquad (24)$$

$$b=\xi(\alpha_1/\tau_1+\alpha_2/\tau_2), \quad b\in(1,\infty), \qquad (25)$$

$$\xi=\alpha_1\tau_1+\alpha_2\tau_2, \quad \xi\in(0,\infty), \qquad (26)$$

$$\tau_i=1/\mu_i, \quad i=1,2. \qquad (27)$$

Для второго компонента функции (21) оставим без изменения. Отметим, что функция (22) при переходе к диффузионному пределу превращается в константу, и, следовательно, в результате такого перехода будет описывать нормальную диффузию с коэффициентом диффузии, равным a_u^2/ξ.

Таким образом, если параметры ξ, τ и b удовлетворяют уравнениям

$$\frac{1}{\xi}\,\frac{1+bx}{1+x}=\frac{(f^{20})^{1-\alpha}}{\eta_1^\alpha}, \qquad (28)$$

$$\frac{\tau}{\xi}\,\frac{b-1}{(1+x)^2}=\frac{1-\alpha}{(f^{20}\eta_1)^\alpha}, \qquad (29)$$

то необходимое условие возникновения диффузионной неустойчивости, соответствующее функциям (22), (23), будет совпадать с необходимым условием, найденным в работе [9]. Здесь введено обозначение $x=f^{20}\tau$.

Рассмотрим случай, когда первый компонент является активатором, а второй — ингибитором. При выполнении условий (28), (29) критическое отношение коэффициента диффузии ингибитора к обобщенному коэффициенту диффузии активатора, рассчитанное в работе [9], выразится через параметры ξ, τ, b следующим образом:

$$\theta_{\gamma,c}=\frac{a_\nu^2}{\eta_2}\,\frac{\xi}{a_u^2\lambda}, \qquad (30)$$

где

$$\lambda=\frac{1+bx}{1+x}, \quad \lambda\in(1,\infty). \qquad (31)$$

Отсюда следует, что критическое отношение коэффициента диффузии ингибитора к истинному (соответствующему диффузионному пределу) коэффициенту диффузии активатора равно $\lambda\theta_{\gamma,c}$. В работе [9] установлено, что в рассматриваемом случае величина $\theta_{\gamma,c}$ всегда превышает величину $\theta_{0,c}$, равную критическому отношению для классического случая (см. рис. 1, 2 в работе [9]). Следовательно, поскольку $\lambda > 1$, величина $\lambda\theta_{\gamma,c}$ также будет превышать величину $\theta_{0,c}$, и мы можем сделать вывод, что при неклассически диффундирующем активаторе переход к неустойчивости Тьюринга затрудняется по сравнению с классическим случаем. Этот результат совпадает с результатом работы [9]. Но в ней рассматривалась асимптотическая аномальная диффузия, удовлетворяющая предположению (1). Здесь же рассматривается диффузия, которая может быть либо переходной аномальной, либо, по существу, нормальной — в зависимости от значений параметров ξ, τ, b. В любом случае в диффузионном пределе рассматриваемая диффузия является нормальной, и если бы мы в исходных уравнениях перешли к диффузионному пределу, то пришли бы к выводу, что критическое отношение для данного вида диффузии равно $\theta_{0,c}$. На самом же деле, как мы видим, оно может существенно превышать эту величину.

Если первый компонент является ингибитором, а второй — активатором, то, рассуждая аналогично, находим, что критическое отношение истинного коэффициента диффузии ингибитора к коэффициенту диффузии активатора равно $\theta_{\gamma,c}/\lambda$. Поскольку в этом случае величина $\theta_{\gamma,c}$ всегда меньше величины $\theta_{0,c}$ (см. рис. 3, 4, 5 в работе [9]), а λ, как и в предыдущем случае, больше единицы, мы получаем неравенство $\theta_{\gamma,c}/\lambda < \theta_{0,c}$, которое означает, что неклассическая диффузия ингибитора облегчает переход к неустойчивости Тьюринга.

Приведем числовой пример. На рис. 3 в работе [9] изображена зависимость $\theta_{\gamma,c}$ от γ ($\gamma = 1-\alpha$) для модели Лендьела – Эпштейна (Lengyel–Epstein) в случае, когда первый компонент (аномально диффундирующий) является ингибитором. При $\alpha = 0.5$ ($\gamma = 0.5$) величина $\theta_{\gamma,c}$ равна примерно 5. Зададим произвольно значение λ. Возьмем, например, $\lambda = 5$, чтобы иметь критическое отношение коэффициентов диффузии равным единице. Параметры ξ, x, b могут быть найдены из соотношений

$$\lambda = \frac{1}{1-(1-\alpha)(1+x)}, \tag{32}$$

$$b = \frac{x+(1-\alpha)(1+x)}{x-(1-\alpha)(1+x)x}, \tag{33}$$

$$\xi = \lambda \frac{\eta_1^\alpha}{(f^{20})^{1-\alpha}}. \tag{34}$$

(Соотношение (33) получается в результате деления (28) на (29), а соотношение (32) — в результате подстановки выражения (33) в выражение (31).) Для x и b получаем значения $x = 0.6$, $b = 11.67$. Используя выражения

$$u^0 = \frac{a}{5}, \quad \nu^0 = 1 + \frac{a^2}{25}, \quad f^{20} = 1 + 4\frac{\nu^0}{1+(u^0)^2},$$

справедливые в модели Лендьела – Эпштейна, находим $f^{20} = 5$. Следовательно, $\tau = 0.12$. Поскольку параметр η_1 не фиксирован, параметр ξ в действительности нельзя найти из соотношения (34). В принципе, он может быть задан произвольно. При этом, однако, должен учитываться тот факт, что перемешивание реагентов происходит за счет диффузии, поэтому при заданной скорости диффузии скорость реакции должна быть ограничена сверху. Если, например, использовать формулу Смолуховского для бимолекулярной реакции, то можно получить условие $\xi f^{20} < \mathrm{const}$, где безразмерная константа по порядку величины равна единице. В этом случае параметр ξ должен находиться в пределах от 0 до 0.2. Среднеквадратичное смещение в чистом диффузионном процессе выражается через параметры ξ, τ, b следующим образом [14]:

$$\langle r^2 \rangle = 6\frac{a_u^2}{\xi}\left(t + (b-1)\tau\left[1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right)\right]\right). \tag{35}$$

Если для некоторой среды параметры τ и b имеют найденные выше значения, а параметр ξ сравним по величине с параметром τ, либо на несколько порядков меньше его, то, как следует из этого выражения, чистый диффузионный процесс не будет проявлять отклонений от классического поведения в макроскопических масштабах. Тем не менее условие возникновения диффузионной неустойчивости будет существенно отличаться от классического. В рассматриваемом здесь случае критическое отношение коэффициентов диффузии равно единице, в то время как в классическом случае при данной кинетике оно равно примерно 12 (см. рис. 3 в [9]). Если для какой-то другой среды при тех же значениях параметров τ и b параметр ξ будет намного порядков меньше параметра τ, то критическое отношение останется прежним, но чистый диффузионный процесс будет переходным аномальным. Задавая другие значения параметра λ (из соотношения (32) и условия положительности параметра x следует, что при заданном α параметр λ должен удовлетворять условию $\lambda > 1/\alpha$), можно получить другие значения критического отношения коэффициентов диффузии, в том числе и меньшие единицы.

Параметры функции (2) при заданных параметрах ξ, τ, b можно найти, обращая соотношения (24)–(26):

$$\tau_1 = \frac{\xi + b\tau}{2} - \sqrt{\frac{\xi^2 + 2\xi b\tau + b^2\tau^2 - 4\xi\tau}{4}}, \qquad (36)$$

$$\tau_2 = \frac{\xi + b\tau}{2} + \sqrt{\frac{\xi^2 + 2\xi b\tau + b^2\tau^2 - 4\xi\tau}{4}}, \qquad (37)$$

$$\alpha_1 = \frac{\tau_2 - \xi}{\tau_2 - \tau_1}, \qquad (38)$$

$$\alpha_2 = \frac{\xi - \tau_1}{\tau_2 - \tau_1}. \qquad (39)$$

При $\tau = 0.12$, $b = 11.67$, $\xi = \tau$ получаем следующие значения: $\mu_1 \approx 100$, $\mu_2 \approx 0.7$, $\alpha_1 \approx 0.93$, $\alpha_2 \approx 0.07$. При малых ξ, линеаризуя соотношения (36)–(39), находим

$$\mu_1 \approx \frac{b}{\xi}, \quad \mu_2 \approx \frac{1}{b\tau}, \quad \alpha_1 = 1 - \alpha_2, \quad \alpha_2 \approx \left(1 - \frac{1}{b}\right)\frac{\xi}{b\tau}.$$

Стационарные пространственные структуры в модели (4)–(7) будут описываться уравнениями

$$a_u^2 \Delta \left[\Theta_u \left(f^2(u,\nu)\right) u(t,r)\right] + f^1(u,\nu) - u(t,r) f^2(u,\nu) = 0, \qquad (40)$$

$$a_\nu^2 \Delta \left[\Theta_\nu \left(g^2(u,\nu)\right) \nu(t,r)\right] + g^1(u,\nu) - \nu(t,r) g^2(u,\nu) = 0, \qquad (41)$$

которые отличаются от уравнений, получающихся в результате перехода к диффузионному пределу, тем, что на месте постоянных частот стоят функции Θ_i, зависящие от концентраций. В работе [15] численно решались подобные уравнения с членами, соответствующими бимолекулярной реакции. Расчеты показали, что присутствие функций Θ_i качественно меняет вид получающихся профилей концентрации. Хотя в работе [16] использовалась функция распределения вида $\psi(t) = \mathrm{const}/t^{1+n}$, все найденные там профили концентрации могут быть получены также при помощи функции распределения вида (2), так как функцию const/t^{1+n} можно с любой степенью точности на любом ограниченном интервале времени аппроксимировать экспоненциальными функциями. Нельзя получить только результат, касающийся отсутствия предельного профиля. Отсюда следует, что переход в уравнениях (3) к диффузионному пределу при изучении диффузионной неустойчивости может существенно исказить не только необходимое условие перехода к неустойчивости, но и вид образующихся пространственных структур.

Частный результат работы, касающийся конкретного влияния неклассической диффузии одного из компонентов на величину критического отношения коэффициентов диффузии, основан на том факте, что функция $\Theta_u(s)$ в рассматриваемой модели монотонно возрастает. Можно показать, что это справедливо при любом N, а не только при $N = 2$. Однако возникает вопрос — не ограничен ли этот факт рамками приближения среднего поля. В этой связи можно сослаться на работу [16], в которой диффузия в неоднородной среде изучалась в рамках приближения эффективной среды, являющегося более точным, чем приближение среднего поля. Там было показано, что в этом приближении функция памяти имеет вид

$$\Theta(t) = \langle f\rangle \delta(t) - Q(t), \qquad (42)$$

где f — частота, а $Q(t)$ — положительная функция, удовлетворяющая условию

$$\int_0^\infty Q(t)\,dt = \langle f\rangle - \left\langle \frac{1}{f}\right\rangle^{-1}. \qquad (43)$$

Поскольку среднее арифметическое всегда больше среднего гармонического, преобразование Лапласа функции (42) будет монотонно возрастающей функцией при любом распределении частот.

4. ВЫВОДЫ

В данной работе выведено необходимое условие возникновения диффузионной неустойчивости в среде, чистая диффузия в которой описывается моделью СБНВ с функцией распределения времени ожидания, имеющей вид суммы экспоненциальных функций. Из полученного условия следует, что переход к неустойчивости не зависит от поведения функции распределения в диффузионном пределе. На конкретных примерах показано, что критическое отношение коэффициентов диффузии, найденное без использования перехода к диффузионному пределу может существенным образом отличаться от критического отношения, найденного с использованием такого перехода. В частности, рассмотрена двухкомпонентная система активатор – ингибитор, в которой один компонент диффундирует классически, а другой — неклассически. Установлено, что если неклассически диффундирует активатор, то переход к неустойчивости затрудняется, а если неклассически диффундирует ингибитор, то облегчается. Основной вывод заключается в том, что при рассмотрении диффузионной неустойчивости в средах с функцией распределения, отличающейся от пуассоновской, переходить к диффузионному пределу по временнóй переменной нельзя.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Из уравнения (13) находим

$$U_i = \frac{\beta_i}{\mu_i + s + f^{20}} U^0 + \frac{\alpha_i}{\mu_i + s + f^{20}} (Df^1 + G^u) + \\ + \frac{u_i^0}{\mu_i + s + f^{20}} Df^2. \quad (A.1)$$

Суммируя эти равенства и разрешая получающееся в результате уравнение относительно $Df^1 + G^u$ при использовании соотношений $U = \sum_{i=1}^N U_i$ и

$$\sum_{i=1}^N \frac{\alpha_i}{(\mu_i + s)(\mu_i + s + f^{20})} = \\ = \frac{1}{s}\left[\Psi_u(f^{20}) - \Psi_u(s + f^{20})\right], \quad (A.2)$$

получаем

$$Df^1 + G^u = \frac{U - \Phi_u(s + f^{20})U^0}{\Psi_u(s + f^{20})} - \\ - \frac{u^0 Df^2}{s\Psi_u(f^{20})}\left[\frac{\Psi_u(f^{20})}{\Psi_u(s + f^{20})} - 1\right]. \quad (A.3)$$

Далее умножаем равенства (A.1) на μ_i и суммируем:

$$\sum_{i=1}^N \mu_i U_i = \varphi_u(s+f^{20})U^0 + \psi_u(s+f^{20})(Df^1 + G^u) + \\ + \frac{u^0 Df^2}{s\Psi_u(f^{20})} \sum_{i=1}^N \frac{\alpha_i \mu_i}{(\mu_i + s)(\mu_i + s + f^{20})}. \quad (A.4)$$

Подставляя сюда (A.3) и (A.5),

$$\sum_{i=1}^N \frac{\alpha_i \mu_i}{(\mu_i + s)(\mu_i + s + f^{20})} = \Psi_u(s + f^{20}) - \\ - \frac{f^{20}}{s}\left[\Psi_u(f^{20}) - \Psi_u(s + f^{20})\right], \quad (A.5)$$

и проводя преобразования с использованием соотношения $\Psi_u(x) = (1 - \psi_u(x))/x$, находим окончательное выражение

$$\sum_{i=1}^N \mu_i U_i = \\ = \frac{\varphi_u(f^{20} + s) - \psi_u(f^{20} + s)}{1 - \psi_u(f^{20} + s)} U^0 + \Theta_u(f^{20} + s)\, U - \\ - \frac{u^0 Df^2}{s}\left[\Theta_u(f^{20} + s) - \Theta_u(f^{20})\right], \quad (A.6)$$

подстановка которого в выражение (12) дает уравнение (14).

ЛИТЕРАТУРА

1. A. M. Turing, Phil. Trans. R. Soc. B **237**, 37 (1952).
2. D. Walgraef, *Spatio-Temporal Pattern Formation*, Springer, New York (1996).
3. V. Castets, E. Dulos, J. Boissonade, and P. De Kepper, Phys. Rev. Lett. **64**, 2953 (1990).
4. P. K. Maini, K. J. Painter, and H. N. P. Chau, J. Chem. Soc., Faraday Trans. **93**, 3601 (1997).
5. T. A. M. Langlands, B. I. Henry, and S. I. Wearne, J. Phys.: Condens. Matter **19**, 065115 (2007).
6. V. V. Gafiychuk and B. Y. Datsko, Phys. Rev. E **77**, 066210 (2008).
7. Y. Nec and A. A. Nepomnyashchy, Eur. J. Appl. Math. **19**, 329 (2008).
8. A. Yadav and W. Horsthemke, Phys. Rev. E **74**, 066118 (2006).
9. A. Yadav, S. M. Milu, and W. Horsthemke, Phys. Rev. E **78**, 026116 (2008).
10. D. Hernandez, C. Varea, and R. A. Barrio, Phys. Rev. E **79**, 026109 (2009).
11. M. O. Vlad and J. Ross, Phys. Rev. E **66**, 061908 (2002).
12. В. П. Шкилев, ЖЭТФ **135**, 403 (2009).
13. Г. Корн, Т. Корн, *Справочник по математике*, Наука, Москва (1984), с. 234.
14. В. П. Шкилев, ЖЭТФ **128**, 655 (2005).
15. D. Froemberg and I. M. Sokolov, Acta Physica Polonica B **12**, 1199 (2008).
16. V. M. Kenkre, Z. Kalay, and P. E. Parris, Phys. Rev. E **79**, 011114 (2009).