

Задача автокаталитической химической реакции, происходящей на поверхности катализатора.

$$\begin{aligned}\frac{\partial y_1}{\partial t} &= D_1 \frac{\partial^2 y_1}{\partial x^2} k_1 z - k_{-1} x - k_3 y_1 z + k_{-3} y_2 - k_2 z^2 y_1, \\ \frac{\partial y_2}{\partial t} &= D_2 \frac{\partial^2 y_2}{\partial x^2} k_3 y_1 z - k_{-3} y_2, \\ z &= 1 - y_1 - 2y_2, \\ \frac{\partial y_j}{\partial x} \Big|_{x=0} &= \frac{\partial y_j}{\partial x} \Big|_{x=L_x} = 0, \quad j = 1, 2, \\ 0 &\leq y_1 \leq 1, \quad 0 \leq y_2 \leq 1, \quad 0 \leq y_1 + 2y_2 \leq 1.\end{aligned}$$

За основу был выбран двухпараметрический портрет точечной системы относительно параметров k_1, k_2 при значениях других параметров системы $k_{-1} = 0.01, k_3 = 0.0032, k_{-3} = 0.002$ (Рис. 1). Затем было выбрано значение параметра $k_1 = 0.12$ так, что разрез пересекает область автоколебаний. На Рис. 2 можно видеть однопараметрический анализ системы, на котором также отмечены нули следа матрицы Якоби. После этого были установлены области значений параметра k_2 , для которых элементы Якобиана a_{11} и a_{22} имеют разные знаки (Рис. 3). Также был найден $d_{max} = \frac{|a_{11}|}{|a_{22}|}$. Затем были заданы коэффициенты диффузии D_1 и D_2 такие, что $\frac{D_1}{D_2} < d_{max}$: $D_1 = 0.001, D_2 = 1$. С целью исследования стационарного решения была рассмотрена матрица линеаризации:

$$B = A - k^2 D,$$

где k – волновое число, D – диагональная матрица, составленная из коэффициентов диффузии. Была построена граница области тьюринговской неустойчивости на плоскости (k_2, k) (Рис. 4), затем было выбрано значение параметра $k_2 = 0.92$, принадлежащее области тьюринговской неустойчивости, но лежащее вне области автоколебаний точечной системы. После этого была построена зависимость $\det B(k)$ (Рис. 5) и исследованы собственные значения матрицы линеаризации (Рис. 6). Затем был найден минимальный размер области $L_{min} = \frac{\pi}{\sqrt{k_c}}$, где k_c – значение волнового числа на котором достигается граница области тьюринговской неустойчивости для данного k_2 . Была выбрана длина области $L > 10L_{min}$. Далее приведён график зависимости собственных чисел матрицы линеаризации от номера гармоники (Рис. 7). Для подтверждения возникновения структур Тьюринга было произведено численное моделирование со следующими начальными распределениями:

$$\begin{aligned}y_1(x, 0) &= y_1^s + 0.1 \cos\left(\frac{\pi n}{L} x\right), \\ y_2(x, 0) &= y_2^s,\end{aligned}$$

где y_j^s – стационарные решения точечной системы, n – номер гармоники. На Рис. 8–10 приведены структуры Тьюринга для $n = 3, n = 5, n = 7$, соответственно. Программная реализация была выполнена на языке программирования Python.

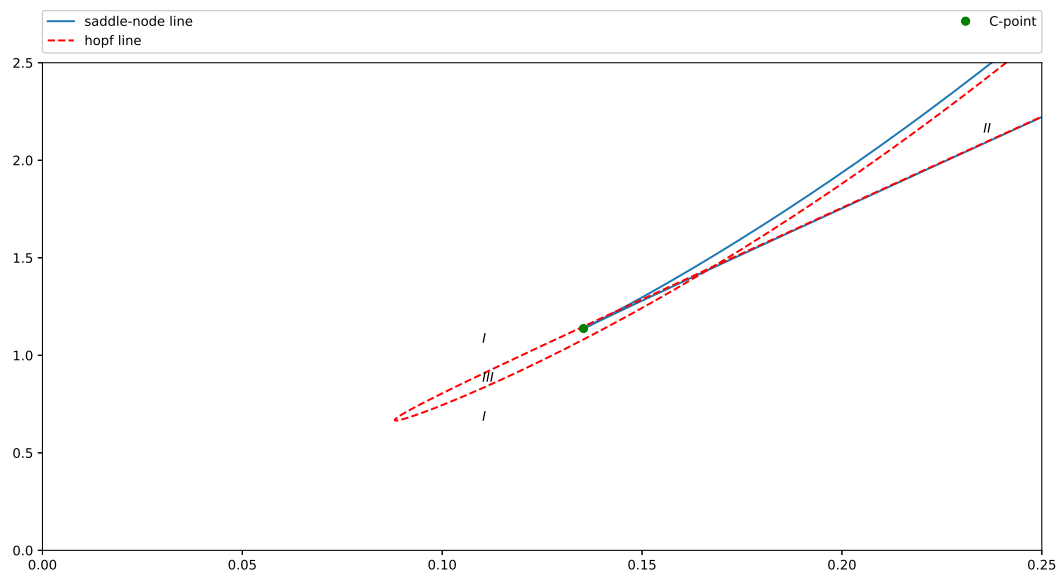


Рис. 1. Параметрический портрет системы.

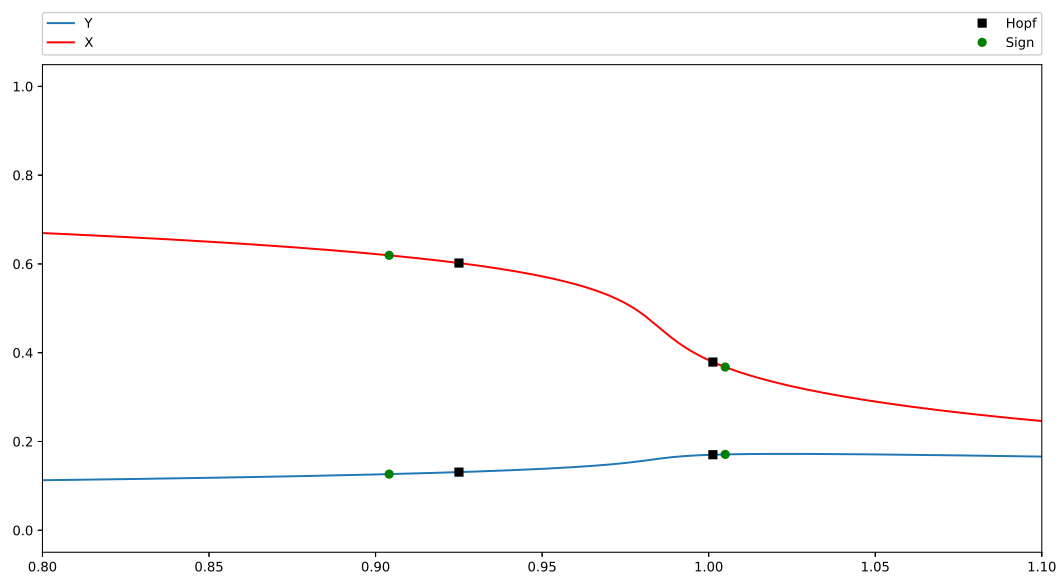


Рис. 2. Однопараметрический анализ

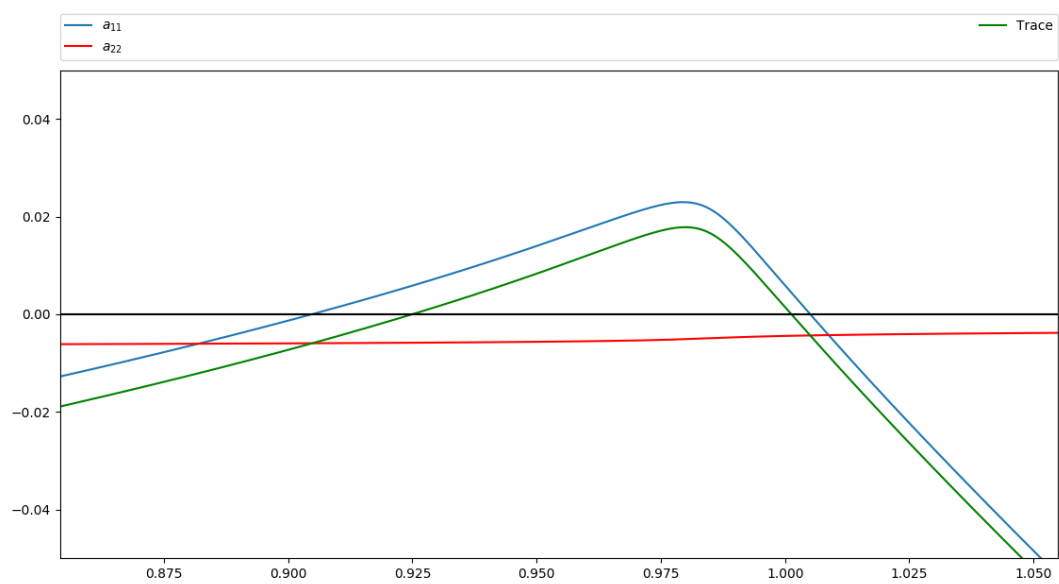


Рис. 3. Поведение коэффициентов Якобиана.

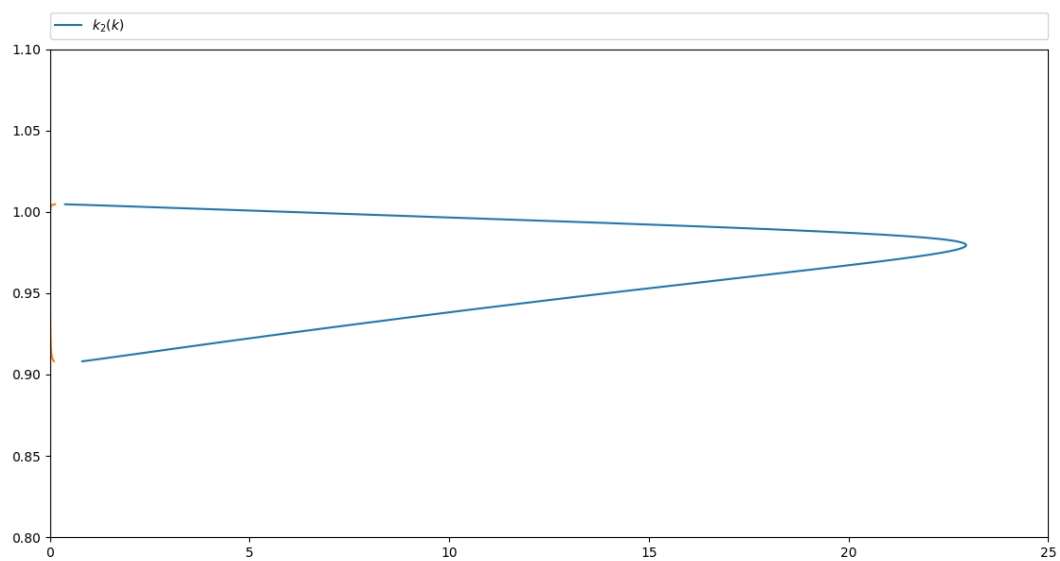


Рис. 4. Зависимость параметра k_2 от волнового числа

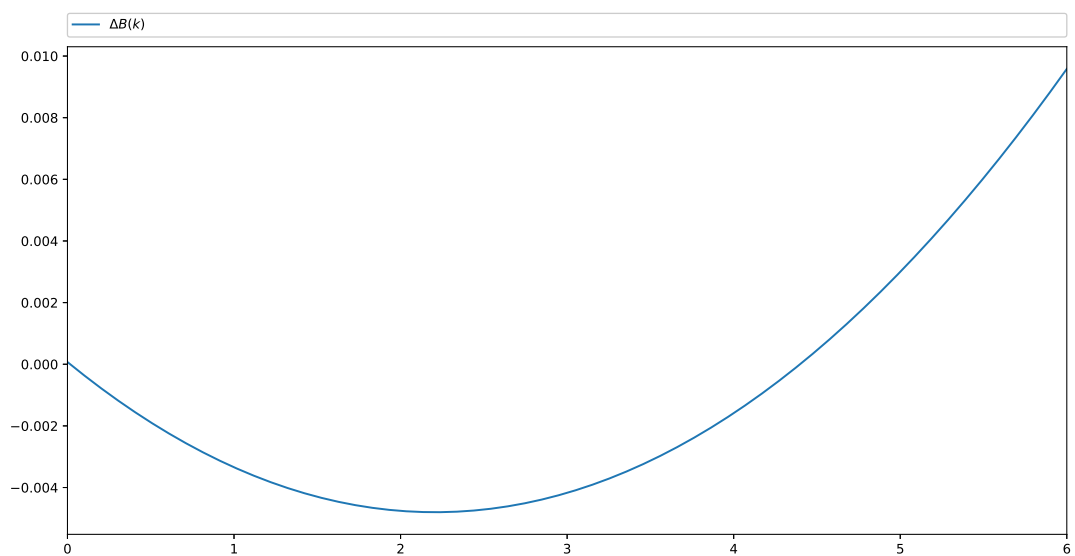


Рис. 5. Зависимость определителя матрицы линеаризации от волнового числа

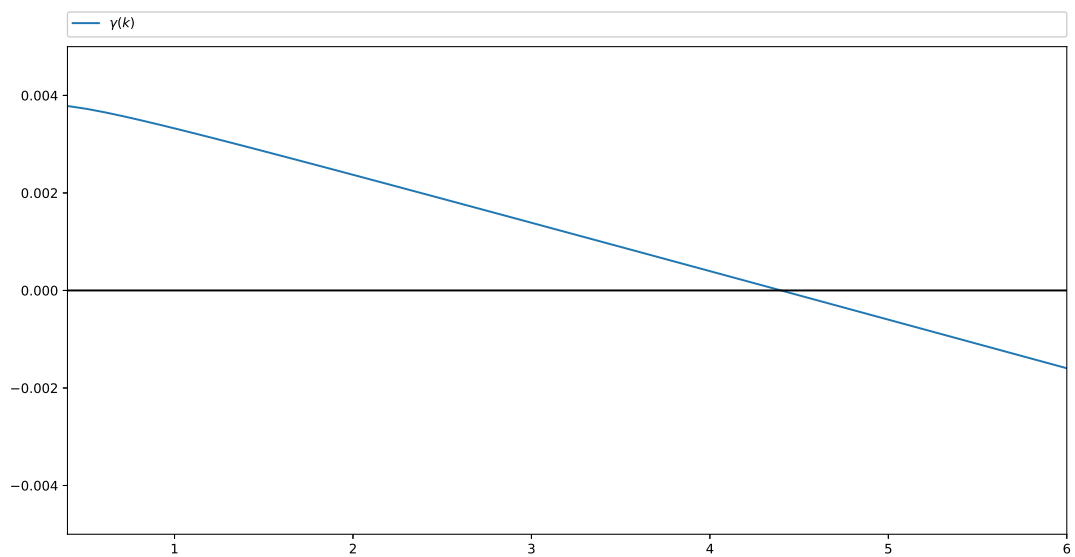


Рис. 6. Зависимость собственных значений матрицы линеаризации от волнового числа

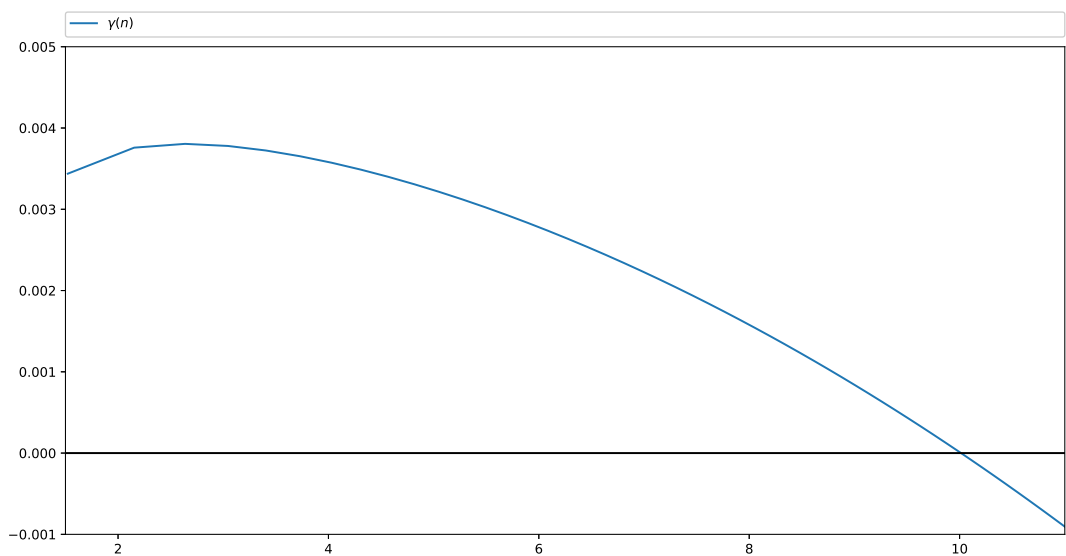


Рис. 7. Зависимость собственных значений матрицы линеаризации от номера гармоники

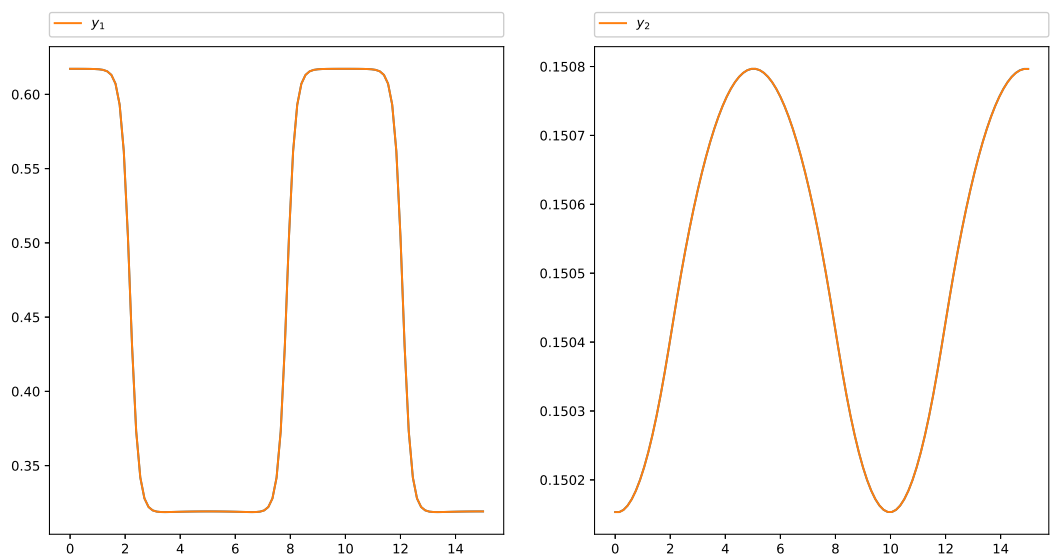


Рис. 8. Структура Тьюринга при $n = 3$

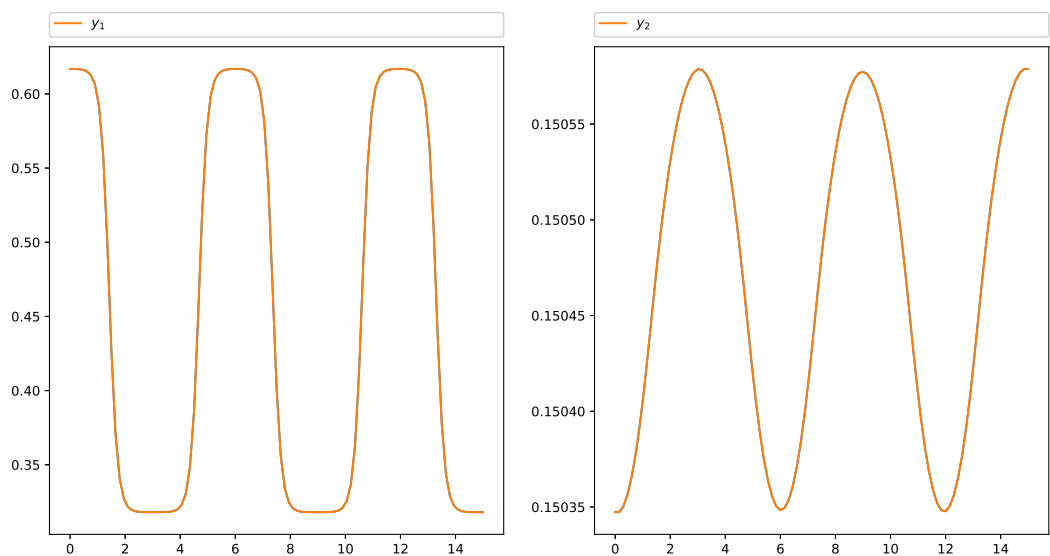


Рис. 9. Структура Тьюринга при $n = 5$

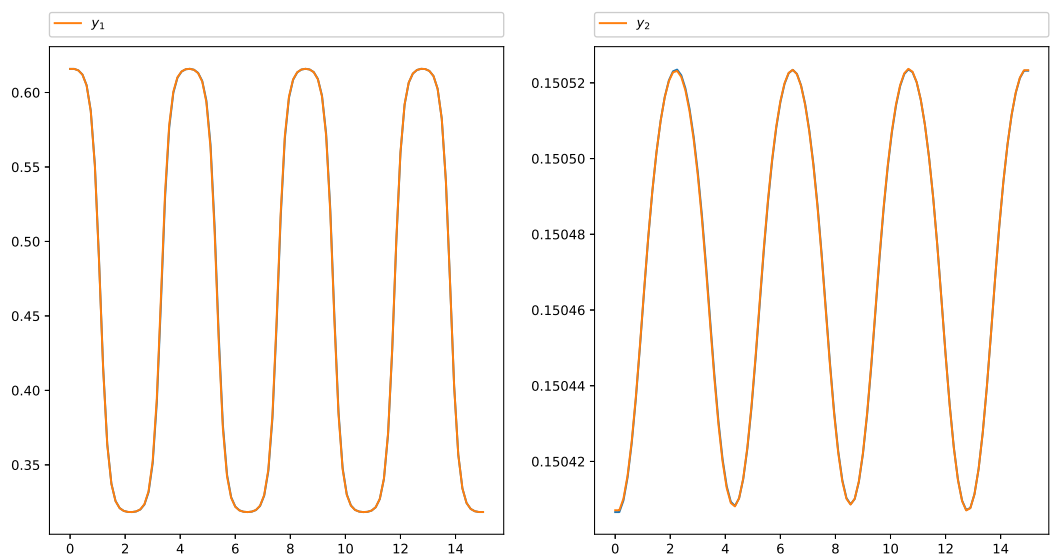


Рис. 10. Структура Тьюринга при $n = 7$