

МЕТОДИЧЕСКИЕ ЗАМЕТКИ

Тьюринговы структуры и амплитудное уравнение Ньюэлла – Уайтхеда – Сегела

Е.П. Земсков

Рассматриваются двумерные системы типа реакция – диффузия с линейными и нелинейными диффузионными членами при возникновении неустойчивости Тьюринга и образовании стационарных пространственных структур. Показано, что в случае тьюринговых структур типа полос двумерный нелинейный анализ системы непосредственно приводит к уравнению Ньюэлла – Уайтхеда – Сегела, в котором вид вклада с пространственными производными определяется только линеаризованным диффузионным членом исходной модели. В отсутствие этого вклада, т.е. для нормальных форм, выражения для коэффициентов уравнения вычисляются стандартным образом.

PACS numbers: 05.45. – a, 47.54. – r, 82.40.Bj, 82.40.Ck

DOI: 10.3367/UFNr.0184.201410j.1149

Содержание

1. Введение (1149).
 2. Структуры типа полос и уравнение Ньюэлла – Уайтхеда – Сегела (1149).
 - 2.1. Линейная диффузия. 2.2. Нелинейная диффузия.
 3. Заключение (1151).
- Список литературы (1151).

1. Введение

Структурообразование в нелинейных реакционно-диффузионных системах встречается во многих областях физики, химии, биологии и других наук [1 – 6]. Классический подход к определению механизма образования структур был развит Тьюрингом [7] в 1952 г. Согласно Тьюрингу структурообразование обусловлено связью диффузии и кинетики реакции. В рамках данного подхода анализ устойчивости системы позволяет найти значения модельных параметров, при которых возникает неустойчивость, приводящая к образованию пространственных структур. Анализ устойчивости системы включает в себя также слабонелинейный анализ, в результате которого исходное математическое описание редуцируется к так называемым амплитудным уравнениям, представляющим по форме реальные части уравнений Гинзбурга – Ландау.

Предметом настоящей статьи является реакционно-диффузионная система. В результате её слабонелиней-

ного анализа получается амплитудное уравнение для комплексной амплитуды W , в котором коэффициенты зависят от параметров исходной реакционно-диффузионной модели. Ранее [8 – 10] нами были получены амплитудные уравнения для систем с перекрёстной [8] и нелинейной [9, 10] диффузией, при этом были исследованы лишь одномерные модели. Цель данной статьи — показать применимость слабонелинейного анализа в двумерном случае для получения амплитудного уравнения Ньюэлла – Уайтхеда – Сегела, которое в монографии [3] было выведено из соображений симметрии.

2. Структуры типа полос и уравнение Ньюэлла – Уайтхеда – Сегела

В этом разделе рассматривается реакционно-диффузионная система при возникновении неустойчивости Тьюринга и образовании стационарных пространственных структур типа полос в случаях, когда коэффициент диффузии является постоянным (классическая линейная диффузия) и когда он зависит от компонента системы (нелинейная диффузия).

2.1. Линейная диффузия

Исходная система описывается следующим векторным уравнением:

$$\frac{\partial \mathbf{Z}}{\partial t} = \mathbf{F}(\mathbf{Z}) + \nabla(\mathbf{D}\nabla\mathbf{Z}), \quad \nabla = \left(\frac{\partial}{\partial r_x}, \frac{\partial}{\partial r_y} \right), \quad (2.1)$$

где $\mathbf{F}(\mathbf{Z})$ — векторная реакционная функция, $\mathbf{Z}$ — n -мерный вектор с компонентами $u, v, \dots$, а $\mathbf{D}$ обозначает диагональную матрицу коэффициентов диффузии, элементы которой считаются постоянными.

Возмущение в виде отклонения $\mathbf{X} = \mathbf{Z} - \mathbf{Z}_0$ от положения равновесия $\mathbf{Z}_0$, удовлетворяющего уравнению $\mathbf{F}(\mathbf{Z}_0) = 0$, определяет разложение уравнения (2.1) в ряд

Е.П. Земсков. Вычислительный центр им. А.А. Дородницына РАН, отдел механики сплошных сред, ул. Вавилова 40, 119333 Москва, Российская Федерация
E-mail: zemskov@ccas.ru

Статья поступила 25 декабря 2013 г.,
после доработки 11 февраля 2014 г.

по $\mathbf{X}$ следующим образом:

$$\frac{\partial \mathbf{X}}{\partial t} = \mathbf{L}\mathbf{X} + \mathbf{M}\mathbf{X}\mathbf{X} + \mathbf{N}\mathbf{X}\mathbf{X}\mathbf{X} + \dots \quad (2.2)$$

с линейным оператором $\mathbf{L} = \mathbf{J} + \mathbf{D}\Delta$, где $\mathbf{J}$ — якобиан, $\Delta = \partial^2/\partial r_x^2 + \partial^2/\partial r_y^2$ — двумерный лапласиан, а квадратичные (гессииан) $\mathbf{M}\mathbf{X}\mathbf{X}$ и кубичные $\mathbf{N}\mathbf{X}\mathbf{X}\mathbf{X}$ формы имеют стандартный вид [11].

Введение новых переменных по времени (T) и пространству (R_x, R_y) модифицирует соответствующие производные следующим образом [12]:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rightarrow \frac{\partial}{\partial T} + \mu \frac{\partial}{\partial T}, \quad (2.3)$$

$$\frac{\partial}{\partial r_x} \rightarrow \frac{\partial}{\partial r} + \mu^{1/2} \frac{\partial}{\partial R_x}, \quad \frac{\partial}{\partial r_y} \rightarrow \mu^{1/4} \frac{\partial}{\partial R_y}. \quad (2.4)$$

В формуле (2.4) принято во внимание, что $\partial \mathbf{X}/\partial r_y = 0$ [12]. Также введены обозначение $r_x \equiv r$ и мера $\mu = (\phi - \phi_{\text{crit}})/\phi_{\text{crit}}$, характеризующая отклонение управляющего параметра ϕ от его критического значения ϕ_{crit} , при котором система теряет устойчивость. При этом имеют место следующие стандартные [11] разложения: $\mathbf{X} = \mu^{1/2}\mathbf{X}_1 + \mu\mathbf{X}_2 + \mu^{3/2}\mathbf{X}_3 + \dots$ и $\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 + \mu\mathbf{H}_1 + \mu^2\mathbf{H}_2 + \dots$ для операторов $\mathbf{H} = \{\mathbf{J}, \mathbf{M}, \mathbf{N}\}$.

Подстановка вышеприведённых разложений в ряд (2.2) даёт систему уравнений, отвечающих комбинациям членов при одинаковых степенях μ . Для $\mu^{1/2}$, μ и $\mu^{3/2}$ имеем уравнения $(\partial_t - \mathbf{L}_0)\mathbf{X}_l = \mathbf{B}_l$ с $l = 1, 2, 3$, где $\mathbf{L}_0 = \mathbf{L}(\mathbf{J} \rightarrow \mathbf{J}_0)$, $\mathbf{J}_0$ — якобиан нулевого порядка, $\mathbf{J}_0 = \mathbf{J}|_{\mu=0}$, $\partial_t \equiv \partial/\partial t$. Правые части $\mathbf{B}_l$ этих уравнений записываются в виде $\mathbf{B}_l = 0$,

$$\mathbf{B}_2 = 2\mathbf{D} \frac{\partial^2 \mathbf{X}_1}{\partial r \partial R_x} + \mathbf{D} \frac{\partial^2 \mathbf{X}_1}{\partial R_y^2} + \mathbf{M}_0 \mathbf{X}_1 \mathbf{X}_1, \quad (2.5)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{B}_3 = & -\frac{\partial \mathbf{X}_1}{\partial T} + \mathbf{J}_1 \mathbf{X}_1 + \mathbf{D} \frac{\partial^2 \mathbf{X}_1}{\partial R_x^2} + 2\mathbf{D} \frac{\partial^2 \mathbf{X}_2}{\partial r \partial R_x} + \mathbf{D} \frac{\partial^2 \mathbf{X}_2}{\partial R_y^2} + \\ & + 2\mathbf{M}_0 \mathbf{X}_1 \mathbf{X}_2 + \mathbf{N}_0 \mathbf{X}_1 \mathbf{X}_1 \mathbf{X}_1. \end{aligned} \quad (2.6)$$

Здесь введено обозначение $\mathbf{J}_1 = (d\mathbf{J}/d\mu)|_{\mu=0}$.

В случае двухкомпонентной системы

$$\frac{\partial u}{\partial t} = F_1(u, v) + D_{11}\Delta u, \quad (2.7)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = F_2(u, v) + D_{22}\Delta v \quad (2.8)$$

правый $\mathbf{U}$ (столбец) и левый $\mathbf{U}^*$ (строка) собственные векторы матрицы $\mathbf{L}_0$ имеют вид

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} 1 \\ \alpha \end{pmatrix} \exp(ik_c r), \quad \mathbf{U}^* = \frac{1}{1 + \alpha\beta} (1, \beta) \exp(ik_c r), \quad (2.9)$$

где k_c — критическое значение волнового вектора, при котором возникает неустойчивость Тьюринга,

$$\alpha = -\frac{L_{11}^0}{L_{12}^0} = -\frac{L_{21}^0}{L_{22}^0}, \quad \beta = -\frac{L_{11}^0}{L_{21}^0} = -\frac{L_{12}^0}{L_{22}^0}. \quad (2.10)$$

Здесь $L_{mn}^0 = J_{mn}^0 - k_c^2 D_{mn} \delta_{mn}$, $m, n = 1, 2$, J_{mn}^0 — элементы якобиана $\mathbf{J}_0$, $\delta_{mn} = 1$ при $m = n$ и $\delta_{mn} = 0$ при $m \neq n$.

Для структур типа полос возмущения первого и второго порядков, $\mathbf{X}_1$ и $\mathbf{X}_2$, записываются следующим

образом [1, 13]:

$$\mathbf{X}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ \alpha \end{pmatrix} [W \exp(ik_c r) + \bar{W} \exp(-ik_c r)], \quad (2.11)$$

$$\mathbf{X}_2 = \begin{pmatrix} a_0 \\ b_0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \end{pmatrix} \exp(ik_c r) + \begin{pmatrix} a_2 \\ b_2 \end{pmatrix} \exp(2ik_c r) + \text{с.с.}, \quad (2.12)$$

где $a_s, b_s, s = 0, 1, 2$ — коэффициенты, зависящие от модельных параметров и амплитуды W , с.с. обозначает комплексно сопряжённые члены. Выражения для возмущений (2.11) и (2.12) подставляются в двухкомпонентную форму уравнений $(\partial_t - \mathbf{L}_0)\mathbf{X}_l = \mathbf{B}_l$. Тогда из уравнения для второго порядка ($l = 2$) следует, что коэффициенты a_1 и b_1 связаны между собой соотношением

$$\alpha a_1 - b_1 = \frac{D_{11}}{J_{12}^0} \left(2ik_c \frac{\partial}{\partial R_x} + \frac{\partial^2}{\partial R_y^2} \right) W, \quad (2.13)$$

что даёт следующее кубическое амплитудное уравнение¹:

$$(1 + \alpha\beta) \frac{\partial W}{\partial T} = \eta W + g|W|^2 W + \frac{D_{11}^2}{\alpha J_{12}^0} \left(2ik_c \frac{\partial}{\partial R_x} + \frac{\partial^2}{\partial R_y^2} \right)^2 W, \quad (2.14)$$

называемое уравнением Ньюэлла — Уайтхеда — Сегела (Newell — Whitehead — Segel) [14, 15]. Различный вид членов с пространственными x - и y -производными в уравнении является следствием выбора системы координат, в которой структуры (полосы) ориентированы перпендикулярно к оси абсцисс [3]. Уравнение (2.14) имеет общий для системы (2.7), (2.8) вид, детали динамического поведения, обусловленные формой реакционных функций $F_{1,2}$, зависят от коэффициентов g и η , которые могут быть вычислены стандартным способом [1, 13]. Выражения для коэффициентов g и η содержат критические значения волнового вектора k_c и управляющего параметра ϕ_{crit} (в якобиане $\mathbf{J}_0$), при этом знак коэффициента g определяет тип неустойчивости: отрицательный при сверхкритической бифуркации и положительный при подкритической. Критические значения параметров могут быть найдены из линейного анализа устойчивости; в ходе этого анализа определяется также область в пространстве параметров (как, например, это сделано в работе [10]), при значениях которых возможно образование структур.

2.2. Нелинейная диффузия

В ряде случаев [2, 4, 16] коэффициент диффузии не является постоянной величиной, а зависит от концентрации реагентов, участвующих в реакции [4, 17]. Поскольку неустойчивость Тьюринга является диффузионной, такие системы требуют отдельного рассмотрения.

В простейшем случае нелинейной диффузии [17], когда матрицу коэффициентов диффузии можно представить в виде $\mathbf{D} + \mathbf{Q}\mathbf{Z}$ [9], при этом предполагая, что диагональные матрицы $\mathbf{D}$ и $\mathbf{Q}$ не зависят от $\mathbf{Z}$, т.е.

¹ Кубическое амплитудное уравнение представляет собой условие разрешимости для третьего порядка разложения [11], $\mathbf{U}^* \mathbf{B}_3^1 = 0$, где $\mathbf{U}^*$ — левый собственный вектор матрицы $\mathbf{L}_0$, а верхний индекс 1 у $\mathbf{B}_3$ указывает на то, что удерживаются лишь вклады с первой гармоникой.

являются постоянными, система описывается следующим уравнением:

$$\frac{\partial \mathbf{Z}}{\partial t} = \mathbf{F}(\mathbf{Z}) + \nabla[(\mathbf{D} + \mathbf{QZ})\nabla \mathbf{Z}], \quad (2.15)$$

и разложение (2.2) принимает вид

$$\frac{\partial \mathbf{X}}{\partial t} = \mathbf{LX} + \mathbf{MXX} + \mathbf{NXXX} + \mathbf{QV}(\mathbf{XVX}) + \dots, \quad (2.16)$$

где $\mathbf{L} = \mathbf{J} + \hat{\mathbf{D}}\Delta$ и $\hat{\mathbf{D}} = \mathbf{D} + \mathbf{QZ}_0$. Тогда выражения (2.5) и (2.6) преобразуются соответственно в следующие:

$$\begin{aligned} \mathbf{B}_2 = & 2\hat{\mathbf{D}} \frac{\partial^2 \mathbf{X}_1}{\partial r \partial R_x} + \hat{\mathbf{D}} \frac{\partial^2 \mathbf{X}_1}{\partial R_y^2} + \mathbf{M}_0 \mathbf{X}_1 \mathbf{X}_1 + \\ & + \mathbf{Q} \left(\frac{\partial \mathbf{X}_1}{\partial r} \right)^2 + \mathbf{QX}_1 \frac{\partial^2 \mathbf{X}_1}{\partial r^2}, \end{aligned} \quad (2.17)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{B}_3 = & -\frac{\partial \mathbf{X}_1}{\partial T} + \mathbf{J}_1 \mathbf{X}_1 + \hat{\mathbf{D}} \frac{\partial^2 \mathbf{X}_1}{\partial R_x^2} + 2\hat{\mathbf{D}} \frac{\partial^2 \mathbf{X}_2}{\partial r \partial R_x} + \hat{\mathbf{D}} \frac{\partial^2 \mathbf{X}_2}{\partial R_y^2} + \\ & + 2\mathbf{M}_0 \mathbf{X}_1 \mathbf{X}_2 + \mathbf{N}_0 \mathbf{X}_1 \mathbf{X}_1 \mathbf{X}_1 + 2\mathbf{Q} \frac{\partial \mathbf{X}_1}{\partial r} \frac{\partial \mathbf{X}_2}{\partial r} + \\ & + 2\mathbf{Q} \frac{\partial \mathbf{X}_1}{\partial r} \frac{\partial \mathbf{X}_1}{\partial R_x} + \mathbf{Q} \left(\frac{\partial \mathbf{X}_1}{\partial R_y} \right)^2 + \mathbf{QX}_1 \frac{\partial^2 \mathbf{X}_2}{\partial r^2} + \\ & + \mathbf{QX}_2 \frac{\partial^2 \mathbf{X}_1}{\partial r^2} + 2\mathbf{QX}_1 \frac{\partial^2 \mathbf{X}_1}{\partial r \partial R_x} + \mathbf{QX}_1 \frac{\partial^2 \mathbf{X}_1}{\partial R_y^2}, \end{aligned} \quad (2.18)$$

и в случае двухкомпонентной системы,

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} = & F_1(u, v) + D_{11}\Delta u + Q_{11}\nabla(u\nabla u), \\ \frac{\partial v}{\partial t} = & F_2(u, v) + D_{22}\Delta v + Q_{22}\nabla(v\nabla v), \end{aligned} \quad (2.19)$$

процедура, описанная в разделе 2.1, даёт результат, совпадающий с уравнением (2.14) при замене $D_{11} \rightarrow \hat{D}_{11}$. Здесь $\hat{D}_{11} = D_{11} + Q_{11}u_0$ и $\hat{D}_{22} = D_{22} + Q_{22}v_0$, где u_0 и v_0 удовлетворяют $F_1(u_0, v_0) = F_2(u_0, v_0) = 0$. Выражения для вычисления коэффициентов η и g могут быть найдены в работе [9].

3. Заключение

Представленное в настоящей статье уравнение Ньюэлла–Уайтхеда–Сегела получено с помощью стан-

дартного нелинейного анализа, что позволяет показать общность этого метода для анализа неустойчивостей и возникающих структур в реакционно-диффузионных системах. Включение в рассмотрение системы с нелинейной диффузией обусловлено использованием подобных систем в современных исследованиях [17, 18] по структурообразованию. Отметим, что влияние нелинейной диффузии проявляется в том, что образование тьюринговских структур происходит легче, чем в случае классической линейной диффузии [18], что может иметь практическое значение при проведении экспериментальных исследований.

Автор благодарит В.К. Ванага за введение в предмет. Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (грант № 13-01-00333А).

Список литературы

1. Walgraef D *Spatio-Temporal Pattern Formation* (New York: Springer, 1997)
2. Murray J D *Mathematical Biology* 3rd ed. (New York: Springer, 2002, 2003)
3. Cross M, Greenside H *Pattern Formation and Dynamics in Non-equilibrium Systems* (Cambridge, UK: Cambridge Univ. Press, 2009)
4. Ванаг В К *Диссипативные структуры в реакционно-диффузионных системах* (М.–Ижевск: Инст. компьют. исслед., РХД, 2008)
5. Ванаг В К *УФН* **174** 991 (2004); Vanag V K *Phys. Usp.* **47** 923 (2004)
6. Медвинский А Б и др. *УФН* **172** 31 (2002); Medvinskii A B et al. *Phys. Usp.* **45** 27 (2002)
7. Turing A M *Phil. Trans. R. Soc. Lond. B* **237** 37 (1952)
8. Zemskov E P, Vanag V K, Epstein I R *Phys. Rev. E* **84** 036216 (2011)
9. Земсков Е П *ЖЭТФ* **142** 824 (2012); Zemskov E P *JETP* **115** 729 (2012)
10. Земсков Е П *ЖЭТФ* **144** 878 (2013); Zemskov E P *JETP* **117** 764 (2013)
11. Kuramoto Y *Chemical Oscillations, Waves, and Turbulence* (Berlin: Springer-Verlag, 1984)
12. Hoyle R B *Pattern Formation: An Introduction to Methods* (Cambridge, UK: Cambridge Univ. Press, 2006)
13. De Wit A, Ph.D. Thesis (Bruxelles: Univ. Libre de Bruxelles, 1993)
14. Newell A C, Whitehead J A J *J. Fluid Mech.* **38** 279 (1969)
15. Segel L A *J. Fluid Mech.* **38** 203 (1969)
16. Mendéz V, Fedotov S, Horsthemke W *Reaction-Transport Systems* (Heidelberg: Springer, 2010)
17. Kumar N, Horsthemke W *Physica A* **389** 1812 (2010)
18. Gambino G et al. *Phys. Rev. E* **88** 042925 (2013)

Turing patterns and Newell–Whitehead–Segel amplitude equation

E.P. Zemskov

Department of Continuum Mechanics, A.A. Dorodnitsyn Computing Centre, Russian Academy of Sciences,
ul. Vavilova 40, 119333 Moscow, Russian Federation
E-mail: zemskov@ccas.ru

Two-dimensional (2D) reaction–diffusion systems with linear and nonlinear diffusion terms are examined for their behavior when a Turing instability arises and stationary spatial patterns form. It is shown that a 2D nonlinear analysis for striped patterns leads to the Newell–Whitehead–Segel amplitude equation in which the contribution from spatial derivatives depends only on the linearized diffusion term of the original model. In the absence of this contribution, i.e., for the normal forms, standard methods are used to calculate the coefficients of the equation.

PACS numbers: **05.45.–a**, **47.54.–r**, 82.40.Bj, 82.40.Ck

DOI: 10.3367/UFNr.0184.201410j.1149

Bibliography — 18 references

Received 25 December 2013, revised 11 February 2014

Uspekhi Fizicheskikh Nauk **184** (10) 1149–1151 (2014)

Physics–Uspekhi **57** (10) (2014)