



ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • [Электронная библиотека](#)

[Препринты ИПМ](#) • [Препринт № 85 за 2020 г.](#)



ISSN 2071-2898 (Print)
ISSN 2071-2901 (Online)

[Д.А. Зенюк](#), [Г.Г. Малинецкий](#)

Механизмы формирования
паттернов в одномерном
брюсселяторе с
производными нецелого
порядка

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Зенюк Д.А., Малинецкий Г.Г. Механизмы формирования паттернов в одномерном брюсселяторе с производными нецелого порядка // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2020. № 85. 24 с.
<https://doi.org/10.20948/prepr-2020-85>
<https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2020-85>

**Ордена Ленина
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М. В. Келдыша
Российской академии наук**

Д. А. Зенюк, Г. Г. Малинецкий

**Механизмы формирования паттернов
в одномерном брюсселяторе
с производными нецелого порядка**

Москва — 2020

УДК 517.968.7

Зенюк Д. А., Малинецкий Г. Г.

Механизмы формирования паттернов в одномерном брюсселяторе с производными нецелого порядка

Работа посвящена изучению механизмов формирования нетривиальной пространственно-временной упорядоченности в двухкомпонентной среде с аномальной диффузией и нелинейными химическими реакциями. Показано, что такие среды могут быть описаны с помощью системы дифференциальных уравнений с производными нецелого порядка. С помощью линейного анализа неустойчивостей были рассмотрены две модельные задачи: супердиффузия с одинаковыми показателями дробных производных и субдиффузия с разными показателями. Аналитические построения дополнены серией вычислительных экспериментов.

Ключевые слова: дробное исчисление, системы реакция—диффузия.

Dmitry Alexeyevich Zenyuk, Georgiy Gennadiyevich Malinetskiy

Pattern formation mechanisms in one-dimensional Brusselator with fractional derivatives

The paper summarizes results on the formation of nontrivial space-time patterns in two component medium with anomalous diffusion and nonlinear reaction kinetics. It is shown that such medium might be formalized as systems of fractional differential equations. Two model problems — superdiffusion with the same order of fractional derivatives and subdiffusion of mixed order — are studied by means of linear theory. Analytical derivations are accompanied by the series of numerical experiments.

Key words: fractional calculus, reaction—diffusion systems.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, проект 19-01-00602А.

Оглавление

Введение. Уравнения аномальной диффузии с источниками	3
Супердиффузия с одинаковыми показателями: линейный анализ	11
Смешанная субдиффузия: линейный анализ	16
Смешанная субдиффузия: вычислительный эксперимент	18
Заключение	22

Введение. Уравнения аномальной диффузии с источниками

В последние десятилетия большой интерес привлекают т.н. аномальные диффузионные процессы, для которых среднеквадратичное отклонение положения частиц растет со временем не линейно, а согласно степенному закону, т.е. $\langle x^2(t) \rangle \sim t^\gamma$. Режимы с $0 < \gamma < 1$ называются субдиффузионными, с $1 < \gamma < 2$ — супердиффузионными. Обширную библиографию, посвященную экспериментальному наблюдению транспорта такого рода, можно найти, например, в [1]. Считается [2], что для корректного математического описания этих процессов удобно использовать аппарат дифференциальных уравнений с производными нецелого порядка. В строгом смысле эти уравнения являются интегро-дифференциальными, причем интеграл в них имеет форму свертки со слабосингулярным степенным ядром. Уравнения такого типа уже достаточно хорошо изучены, см., например, [3–5], и теперь основным объектом исследования являются их различные обобщения, например, системы с аномальной диффузией во внешнем поле, в неоднородных средах (где коэффициент диффузии может зависеть от пространственных переменных) или с нелинейными источниками. Настоящая работа будет посвящена именно последним.

Подробное изложение интегро-дифференциального исчисления нецелого порядка можно найти в [4, 6]. Ниже будут кратко описаны лишь те конструкции, которые необходимы для дальнейшего изложения. Левосторонние дробные интегралы Римана—Лиувилля порядка $\alpha > 0$ на полуоси $[a, +\infty)$ вводятся выражением

$$(I_{a+}^\alpha f)(t) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_a^t f(\tau)(t - \tau)^{\alpha-1} d\tau, \quad t > a.$$

Существует также правосторонний аналог этого дробного интеграла. Основные свойства этих операторов ничем не отличаются, и далее в тексте будут использоваться только левосторонние операторы. Если под переменным t понимать время, то только левосторонние интегралы (и производные) нецелого порядка могут иметь понятную физическую интерпретацию.

Левосторонней производной Римана—Лиувилля порядка $\alpha > 0$ называется конструкция:

$$(D_{a+}^\alpha f)(t) = \frac{d^n}{dt^n} (I_{a+}^{n-\alpha} f)(t) = \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \frac{d^n}{dt^n} \int_a^t f(\tau)(t - \tau)^{n-\alpha-1} d\tau,$$

где $n = [\alpha] + 1$ и $[x]$ означает целую часть числа x . Левосторонняя производ-

ная Капуто представляет собой оператор

$$\begin{aligned} (\mathcal{D}_{a+}^{\alpha} f)(t) &= \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \int_a^t \frac{f^{(n)}(\tau)}{(t-\tau)^{\alpha-n+1}} d\tau, \quad \alpha \notin \mathbb{N} \cup \{0\}, \\ (\mathcal{D}_{a+}^{\alpha} f)(t) &= f^{(n)}(t), \quad \alpha \in \mathbb{N} \cup \{0\}. \end{aligned}$$

Производные Римана—Лиувилля и Капуто связаны между собой соотношением

$$(\mathcal{D}_{a+}^{\alpha} f)(t) = (D_{a+}^{\alpha} f)(t) - \sum_{k=0}^{n-1} \frac{f^{(k)}(a)}{\Gamma(k-\alpha+1)} (x-a)^{k-\alpha}.$$

Легко видеть, что эти производные совпадают при условии $f^{(k)} = 0$, $k = 0, 1, \dots, n-1$. По причинам, которые пояснялись в [7], для описания эволюционных процессов с памятью обычно используются операторы Капуто. Далее в тексте мы всюду будем считать, что $a = 0$, и если дробные операторы применяются к функции нескольких переменных, то они действуют по временному переменному t .

Удобным инструментом для работы с операторами дробного исчисления являются интегральные преобразования Лапласа и Фурье. Введем для них следующие обозначения

$$\mathbb{L}[f(x, t)|t] = \check{f}(x, q), \quad \mathbb{F}[f(x, t)|x] = \hat{f}(\omega, t).$$

Образ f под действием обоих преобразований (Лапласа по временному переменному и Фурье по пространственному) будем обозначать \check{f} . Для обозначения действия преобразования Лапласа также будем использовать упрощенную нотацию $f(t) \doteq \check{f}(q)$. Если $\alpha > 0$ и на функцию f удовлетворяет дополнительным условиям гладкости, то [4]

$$(\mathcal{D}_{a+}^{\alpha} f)(t) \doteq q^{\alpha} \check{f}(q) - \sum_{k=0}^{n-1} q^{\alpha-k-1} f^{(k)}(0), \quad (1)$$

$$(\mathcal{D}_{a+}^{\alpha} f)(t) \doteq q^{\alpha} \check{f}(q) - \sum_{k=0}^{n-1} q^{n-k-1} y^{(k)}(0+), \quad (2)$$

где $y(t) = (I_{0+}^{n-\alpha} f)(t)$. При выполнении $f \in L_1(\mathbb{R}_+)$ справедливо также

$$(I_{0+}^{\alpha} f)(t) \doteq q^{-\alpha} \check{f}(q). \quad (3)$$

Для дальнейшего изложения нам также понадобится двухпараметрическая функция Миттаг-Леффлера [4, 8]. Это степенной ряд вида

$$E_{\alpha, \beta}(z) = \sum_{k=0}^{+\infty} \frac{z^k}{\Gamma(\alpha k + \beta)}, \quad z \in \mathbb{C}, \quad \operatorname{Re} \alpha > 0, \quad \beta \in \mathbb{C},$$

который сходится на всей комплексной плоскости. Для удобства будем также использовать общепотребительное обозначение $E_\alpha(z) = E_{\alpha,1}(z)$.

Известно [4, 8], что $t^{\beta-1}E_{\alpha,\beta}(\lambda t^\alpha) \doteq q^{\alpha-\beta}/(q^\alpha - \lambda)$ при $t > 0$, $\lambda \in \mathbb{C}$ и $|\lambda q^{-\alpha}| < 1$. Функции $E_\alpha(\lambda t^\alpha)$ являются собственными функциями оператора Капуто \mathcal{D}_{0+}^α . В этом можно убедиться, используя преобразование Лапласа:

$$(\mathcal{D}_{0+}^\alpha [E_\alpha(\lambda x^\alpha)])(t) \doteq q^\alpha \frac{q^{\alpha-1}}{q^\alpha - \lambda} - q^{\alpha-1} \cdot 1 = \lambda \frac{q^{\alpha-1}}{q^\alpha - \lambda} \doteq \lambda E_\alpha(\lambda t^\alpha).$$

В некоторых случаях необходимо рассматривать обычные производные от $E_{\alpha,\beta}(\lambda t^\alpha)$ по параметру λ :

$$\frac{\partial^m}{\partial \lambda^m} E_{\alpha,\beta}(\lambda t^\alpha) = t^{\alpha m} E_{\alpha,\beta}^{(m)}(\lambda t^\alpha) = \sum_{k=0}^{+\infty} \frac{(m+k)! \lambda^k t^{\alpha(m+k)}}{k! \Gamma(\alpha(m+k) + \beta)}.$$

Используя свойства преобразования Лапласа, можно легко получить

$$\frac{\partial^m}{\partial \lambda^m} [t^{\beta-1} E_{\alpha,\beta}(\lambda t^\alpha)] = t^{\alpha m + \beta - 1} E_{\alpha,\beta}^{(m)}(\lambda t^\alpha) \doteq \frac{m! q^{\alpha-\beta}}{(q^\alpha - \lambda)^{m+1}}. \quad (4)$$

Обстоятельное изложение свойств функций Миттаг-Леффлера и их приложений с обширной библиографией можно найти в [8]. Нам же потребуются лишь их асимптотические свойства. Если $0 < \alpha < 2$ и μ таково, что

$$\frac{\alpha\pi}{2} < \mu < \min\{\pi, \alpha\pi\},$$

то при $m > 1$ и $|z| \rightarrow +\infty$ справедливы следующие соотношения [4, 8]:

$$E_{\alpha,\beta}(z) = \frac{1}{\alpha} z^{(1-\beta)/\alpha} e^{z^{1/\alpha}} - \sum_{k=1}^m \frac{1}{\Gamma(\beta - \alpha k)} \frac{1}{z^k} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{z^{m+1}}\right), \quad |\text{Arg } z| \leq \mu,$$

$$E_{\alpha,\beta}(z) = - \sum_{k=1}^m \frac{1}{\Gamma(\beta - \alpha k)} \frac{1}{z^k} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{z^{m+1}}\right), \quad \mu \leq |\text{Arg } z| \leq \pi,$$

где $\text{Arg } z$ — главное значение аргумента z .

Хорошо известно (см., например, [9]), что стандартное уравнение диффузии может быть получено с помощью предельного перехода для некоторого класса случайных блужданий, обладающих марковским свойством. Аналогичный подход справедлив и для аномальной диффузии. Будем рассматривать случайные процессы следующего вида. Последовательность независимых и одинаково распределенных случайных величин θ_k задает времена ожидания между последовательными смещениями блуждающей частицы. Другими словами, перемещение происходит в моменты времени $t_n = \theta_1 + \dots + \theta_n$.

Сами смещения также являются случайными величинами ξ_k , независимыми и имеющими одинаковое распределение. В начальный момент времени t_0 частица почти наверное находится в точке x_0 . Таким образом, рассматриваемый случайный процесс может быть представлен как

$$X_t = x_0 + \sum_{k=1}^{n-1} \xi_k, \quad t \in [t_{n-1}, t_n), \quad n \in \mathbb{N}.$$

Плотности распределений величин θ_k и ξ_k обозначим соответственно $\phi(t)$ и $w(x)$. Всюду далее будем предполагать, что θ_k и ξ_k независимы в совокупности. Случайные процессы такого типа называются процессами восстановления с «вознаграждением» (*renewal-reward process*) и применяются для описания различных стохастических систем [10,11]. В контексте исследования физико-химических процессов они также известны под названием случайных блужданий с непрерывным временем (*continuous time random walk*) [9]. Разумеется, эта простая конструкция может быть обобщена различными способами для описания более сложной стохастической динамики — подробнее см. в [9]. Чтобы адаптировать эту схему к моделям реакции—диффузии, необходимо правильно учесть возможность появления и исчезновения частиц в результате химических реакций. Мы будем использовать для этого подход, подробно изложенный в [12].

Пусть $p(x, t)$ — плотность вероятности нахождения блуждающей частицы в точке x в момент времени t , при условии, что в момент t_0 она находилась в точке x_0 . Пусть также $s(x, t)$ — мощность источников и стоков в точке x в момент времени t . Будем считать, что частицы появляются и исчезают мгновенно до того, как совершается скачок. Если при всех значениях аргументов $s(x, t) \geq 0$, то s можно интерпретировать как плотность распределения, при условии выбора надлежащего нормировочного множителя. Если же $s(x, t) < 0$, то на нее должны быть наложены дополнительные ограничения, гарантирующие корректность всей схемы, поскольку частицы не могут удаляться из системы в точке x до того, как они туда «прибудут».

Из общих соображений функция p должна удовлетворять интегральному уравнению

$$p(x, t) = \Phi(t)\delta(x - x_0) + \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{t_0}^t p(z, \tau)w(x - z)\phi(t - \tau)dzd\tau + \\ + \int_{t_0}^t \Phi(t - \tau)s(x, \tau)d\tau, \quad \Phi(t) = \int_t^{+\infty} \phi(\tau)d\tau. \quad (6)$$

Здесь $\Phi(t)$ равно вероятности того, что на временном интервале длины t не произошло ни одного скачка. Первое слагаемое в (6) равно вероятности того,

что частица, изначально помещенная в x_0 , так и не переместилась. Второе слагаемое представляет собой суперпозицию всевозможных способов перемещения одним скачком из x_0 в x через промежуточное положение z . Если $s > 0$, то третье слагаемое соответствует полной вероятности того, что в точке x появилась частица, которая затем не смещалась. Если же $s < 0$, то это выражение описывает вклад, связанный с частицами, которые были удалены из системы, но в противном случае оставались бы там же вплоть до момента времени t . Всюду далее для удобства будем считать, что x_0 и t_0 равны нулю.

Из свойств преобразования Лапласа следует, что

$$\Phi(t) = 1 - \int_0^t \phi(\tau) d\tau \doteq \frac{1}{q} - \frac{\check{\phi}}{q}.$$

С учетом принятых обозначений из (6) следует

$$\tilde{p} = \frac{1 - \check{\phi}}{q} + \tilde{p}\check{\phi}\hat{w} + \frac{1 - \check{\phi}}{q}\tilde{s}. \quad (7)$$

Наложим теперь некоторые дополнительные ограничения на плотности ϕ и w . Будем считать, что $\phi(t) = -E'_\beta(-t^\beta)$, $0 < \beta < 1$, так что $\check{\phi}(q) = (1 + q^\beta)^{-1}$. Доказательство того, что выбранная таким образом функция действительно является плотностью, вместе с доказательством свойства полной монотонности, можно найти в [8]. После несложных манипуляций получим

$$\tilde{p}q(1 + q^\beta) = q^\beta + q\tilde{p}\hat{w} + q^\beta\tilde{s} \iff q^\beta\tilde{p} - q^{\beta-1} = -\tilde{p} + \tilde{p}\hat{w} + q^{\beta-1}\tilde{s}.$$

Обращение преобразования Лапласа с учетом (1) и (3) приводит к

$$\left(\mathcal{D}_{0+}^\beta \hat{p}\right)(\omega, t) = -\hat{p} + \hat{p}\hat{w} + \left(I_{0+}^{1-\beta} \hat{s}\right)(\omega, t). \quad (8)$$

Положим теперь также, что плотность w симметрична относительно нуля и имеет второй конечный момент. Тогда в окрестности $\omega = 0$ справедливо

$$\hat{w}(\omega) = 1 - \frac{\sigma^2}{2}\omega^2 + \mathcal{O}(\omega^4),$$

и после подстановки в (8) мы получим

$$\left(\mathcal{D}_{0+}^\beta \hat{p}\right)(\omega, t) = \frac{\sigma^2}{2}(i\omega)^2\hat{p} + \left(I_{0+}^{1-\beta} \hat{s}\right)(\omega, t),$$

откуда, наконец, следует

$$\left(\mathcal{D}_{0+}^\beta p\right)(x, t) = D\frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + \left(I_{0+}^{1-\beta} s\right)(x, t), \quad D = \frac{\sigma^2}{2}. \quad (9)$$

Существует еще один способ получения интегро-дифференциальной связи между p и s . Комбинируя слагаемые в (6), можно получить тождество

$$q\tilde{p} - 1 = \tilde{s} + q^{1-\beta} \frac{\sigma^2}{2} (i\omega)^2 \tilde{p}$$

из которого следует

$$\frac{\partial p}{\partial t} = s + D \left({}_t D_{0+}^{1-\beta} \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} \right) (t, x) + DL^{-1} \left[\left({}_t I_{0+}^{\beta} \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} \right) (x, 0+) \right]. \quad (10)$$

Здесь мы воспользовались соотношениями (2). Напомним, что операторы нецелого порядка действуют по временному переменному. Следует подчеркнуть, что (9) и (10) эквивалентны друг другу. Мы далее будем использовать первую форму.

Открытым остается вопрос о том, какую форму в этих уравнениях должны иметь члены, описывающие кинетику реакций. Здесь возможны два подхода. Первый соответствует системе, в которой механизмы, вызывающие замедление диффузии, в равной мере действуют и на химическую кинетику, делая аномально медленной и ее. Считается, что такое поведение характерно для диффузионно-контролируемых реакций (*diffusion-limited reactions*). В этом случае второе слагаемое в правой части (9) должно быть таким же, как и в обычных уравнениях химической кинетики. Второй подход, напротив, предписывает считать, что химические реакции протекают в обычном временном масштабе, а среда замедляет лишь диффузионный транспорт — такой вариант, предположительно, соответствует реакциям с пороговой активацией (*activation-limited reactions*). Более подробно эта проблема обсуждается в [13, 14] и цитированной там литературе. Мы будем рассматривать лишь модели первого типа.

Уравнение (9) пока справедливо лишь при определенном выборе плотности ϕ . Можно, однако, показать, что любая плотность, изображение Лапласа которой в окрестности $q = 0$ ведет себя как

$$\check{\phi}(q) = 1 - \lambda q^{\beta} + o(q^{\beta}), \quad (11)$$

приводит к тем же самым соотношениям. Для этого заменим $\check{\phi}\hat{w}$ в (7) выражением

$$1 - \frac{\sigma^2}{2} \omega^2 - \lambda q^{\beta}, \quad (12)$$

что приводит к

$$\lambda q^{\beta+1} \tilde{p} = \lambda q^{\beta} (1 + \tilde{s}) + q \frac{\sigma^2}{2} (i\omega)^2 \tilde{p}, \quad D = \frac{\sigma^2}{2\lambda},$$

откуда после обращения интегральных преобразований получим то же самое уравнение (9).

Интегро-дифференциальное уравнение (9) было получено в предположении, что ω и q стремятся к нулю, что в исходных переменных соответствует асимптотическому режиму больших времен и координат в силу Тауберовых теорем (см., например, гл. 13 в [11]). Этому предельному переходу можно придать смысл, масштабируя случайные величины θ_k и ξ_k : положим $\xi_k^* = h\xi_k$ и $\theta_k^* = T\theta_k$, где h и T неотрицательны. Если h и T малы, то новый процесс X_t^* , построенный с помощью θ_k^* и ξ_k^* , будет совершать частые небольшие скачки. Поскольку $w^*(x) = w(x/h)/h$, то $\check{w}^*(\omega) = w(h\omega)$. Аналогичные соотношения верны для ϕ^* . Предположения о поведении плотностей ϕ и w остаются неизменными. В результате мы получим то же самое соотношение (9), в котором $D = h^2\sigma^2/(2\lambda T^\beta)$. Если теперь устремить h и T к нулю так, чтобы $h^2T^{-\beta} \rightarrow 1$, придем к уравнению, которое будет верно уже при любых x и t .

Покажем теперь, что уравнение типа (9) действительно описывает характерное для аномальных диффузионных процессов поведение. Рассмотрим задачу Коши

$$(\mathcal{D}_{0+}^{2\nu} p)(x, t) = D \frac{\partial^2 p}{\partial x^2}, \quad p(x, 0) = p_0(x),$$

где $0 < \nu < 1$, и $D > 0$. Применяя к нему, как обычно, преобразования Лапласа и Фурье, получим

$$\tilde{p} = \hat{p}_0(\omega) \frac{q^{2\nu-1}}{q^{2\nu} + D\omega^2}.$$

Обращение преобразования Лапласа приводит к

$$\hat{p} = \hat{p}_0(\omega) E_{2\nu}(-\omega^2 Dt^{2\nu}),$$

откуда в силу теоремы о преобразовании свертки следует

$$p(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} p_0(x-z)G(t, z)dz, \quad G(x, t) = \mathbb{F}^{-1} [E_{2\nu}(-\omega^2 Dt^{2\nu})].$$

Для дальнейшего анализа введем функцию Маинарди—Райта (*Mainardi—Wright*)

$$M_\nu(z) = \frac{1}{\pi} \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{(-z)^{n-1}}{(n-1)!} \Gamma(\nu\pi) \sin(\nu\pi n).$$

Известно [5], что $M_\nu(z) \doteq E_\nu(-q)$. Тогда из

$$\begin{aligned} \hat{G}(\omega, t) = E_{2\nu}(-\omega^2 Dt^{2\nu}) &= \frac{1}{2} \left[E_\nu(+i\omega\sqrt{Dt}^\nu) + E_\nu(-i\omega\sqrt{Dt}^\nu) \right] = \\ &= \check{G}(\sqrt{Dt}^\nu, q) \Big|_{q=+i\omega} + \check{G}(\sqrt{Dt}^\nu, q) \Big|_{q=-i\omega} \end{aligned}$$

следует $G(x, t) = (2\sqrt{D}t^\nu)^{-1} M_\nu \left(|x| / (\sqrt{D}t^\nu) \right)$.

Функция $M_\nu(t)$, $t \leq 0$, имеет моменты любого порядка:

$$\begin{aligned} \int_0^{+\infty} t^n M_\nu(t) dt &= \int_0^{+\infty} t^n M_\nu(t) e^{-qt} dt \Big|_{q=0} = \text{L} [t^n M_\nu(t) | t] \Big|_{q=0} = \\ &= (-1)^n \frac{d^n}{dq^n} E_\nu(-q) \Big|_{q=0} = \frac{n!}{\Gamma(\nu n + 1)}. \end{aligned}$$

Используя этот факт, можно показать, что моменты функции Грина G четного порядка равны $D^n t^{2\nu n} (2n)! / \Gamma(2\nu n + 1)$. Это означает, что если интерпретировать решение $p(x, t)$ как плотность распределения положений блуждающей частицы в момент времени t , то при $\beta = 2\nu$ дисперсия будет пропорциональна t^β , а это именно то поведение, которое и называется аномальной диффузией.

Подчеркнем, что хотя решение и было получено для $0 < \beta < 2$, само уравнение (9) справедливо лишь при $\beta < 1$, так что обоснование его применения для описания супердиффузии можно считать лишь феноменологическим. Заметим в заключение, что известен другой подход (см., например, [8]) к описанию супердиффузии с помощью предельных переходов для случайных блужданий, как было рассмотрено выше. Для этого требуется в качестве w выбирать плотности α -устойчивых распределений Леви, а возникающие уравнения будут содержать т.н. дробные производные Рисса—Феллера по пространственному переменному.

Мы в настоящей работе будем исследовать следующую двухкомпонентную систему реакции—диффузии

$$(\mathcal{D}_{0+}^{\alpha_1} x_1)(t, z) = \frac{D_1}{L^2} \frac{\partial^2 x_1}{\partial z^2} + A - (B + 1)x_1 + x_1^2 x_2, \quad (13a)$$

$$(\mathcal{D}_{0+}^{\alpha_2} x_2)(t, z) = \frac{D_2}{L^2} \frac{\partial^2 x_2}{\partial z^2} + Bx_1 - x_1^2 x_2. \quad (13b)$$

Здесь $0 < \alpha_i < 2$, L — размер расчетной области, $z \in [0, 1]$ — безразмерные пространственные координаты, A, B, D_1 и D_2 — неотрицательные коэффициенты. Химическая кинетика здесь соответствует хорошо известной модели Пригожина—Лефевра, или брюсселятора [15]. Для определенности будем рассматривать однородные граничные условия Неймана

$$\frac{\partial x_1}{\partial z} \Big|_{z \in \{0,1\}} = 0, \quad \frac{\partial x_2}{\partial z} \Big|_{z \in \{0,1\}} = 0.$$

Будем считать основным бифуркационным параметром B . Введем также обозначение $\theta = D_1/D_2$ для отношения коэффициентов диффузии. Легко показать, что единственным положением равновесия системы является решение

$\mathbf{x} = (A, B/A)^\top$. Отклонения \mathbf{y} от этого пространственно однородного и стационарного решения подчиняются уравнениям

$$(\mathcal{D}_{0+}^{\alpha_1} y_1)(t, z) = \frac{D_1}{L^2} \frac{\partial^2 y_1}{\partial z^2} + (B - 1)y_1 + A^2 y_2 + \frac{B}{A} y_1^2 + 2A y_1 y_2 + y_1^2 y_2, \quad (14a)$$

$$(\mathcal{D}_{0+}^{\alpha_2} y_2)(t, z) = \frac{D_2}{L^2} \frac{\partial^2 y_2}{\partial z^2} - B y_1 - A^2 y_2 - \frac{B}{A} y_1^2 - 2A y_1 y_2 - y_1^2 y_2. \quad (14b)$$

Граничные условия остаются неизменными. Если $1 < \alpha_i < 2$, то начальные условия также должны включать в себя значения $y_1'(0)$ и $y_2'(0)$.

Некоторые точные результаты можно получить с помощью линейного анализа, считая, что отклонения от положения равновесия малы по абсолютной величине. Это позволяет отбросить нелинейные члены в (14). Решения возникающих линейных уравнений будем искать в виде $\mathbf{y}(z, t) = \mathbf{u}(t) \cos \pi k z$, $k \in \mathbb{N}$, что приводит к системе линейных уравнений для амплитуд $u_i(t)$ с матрицей

$$M(k) = \begin{pmatrix} a(k) & A^2 \\ -B & -b(k) \end{pmatrix}, \quad a(k) = B - 1 - k^2 \pi^2 D_1 / L^2, \quad b(k) = A^2 + k^2 \pi^2 D_2 / L^2.$$

Устойчивость решений определяется спектральными свойствами $M(k)$. Ее характеристический полином имеет вид $\sigma^2 + \sigma[b(k) - a(k)] + A^2 B - a(k)b(k)$, а его корни равны

$$\sigma_{\pm}(k) = \frac{1}{2} \left\{ a(k) - b(k) \pm \sqrt{\Delta(k)} \right\}, \quad \Delta(k) = [b(k) + a(k)]^2 - 4A^2 B.$$

В рамках такого подхода можно рассматривать также периодические граничные условия. В этом случае пространственная зависимость решений будет иметь вид $e^{2\pi i k z}$, $k \in \mathbb{N} \cup \{0\}$, и все остальные результаты будут такими же, как и для условий Неймана, с той лишь разницей, что волновое число нужно будет увеличить вдвое (т.е. заменить всюду k на $2k$).

Супердиффузия с одинаковыми показателями: линейный анализ

Хотя уравнение супердиффузии с производными нецелого порядка по времени и не имеет строгого обоснования, мы тем не менее проведем линейный анализ устойчивости системы (14) с $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha$, где $1 < \alpha < 2$, дополняя результаты, полученные ранее в [7] для субдиффузии. Начнем со случая, когда характеристический полином имеет двукратный действительный корень. Решение можно получить, выполнив замену переменных $\mathbf{u} = P\mathbf{v}$, где P —

матрица, первым столбцом которой является собственный вектор \mathbf{e}_1 матрицы M , соответствующий σ , а вторым столбцом — присоединенный вектор \mathbf{e}_2 , т.е. $M\mathbf{e}_2 = \sigma\mathbf{e}_2 + \mathbf{e}_1$. В новых переменных система имеет вид $(\mathcal{D}_{0+}^\alpha \mathbf{v})(t) = J\mathbf{v}$, где J — жорданова клетка с σ на главной диагонали. Применяв к этой системе преобразование Лапласа и выполнив простые алгебраические манипуляции, после обращения получим

$$\begin{aligned} v_2(t) &= v_2(0)E_\alpha(\sigma t^\alpha) + v_2'(0)tE_{\alpha,2}(\sigma t^\alpha), \\ v_1(t) &= v_1(0)E_\alpha(\sigma t^\alpha) + v_1'(0)tE_{\alpha,2}(\sigma t^\alpha) + v_2(0)t^\alpha E_\alpha'(\sigma t^\alpha) + v_2'(0)t^{\alpha+1}E_{\alpha,2}'(\sigma t^\alpha). \end{aligned}$$

Асимптотические представления для производных функций Миттаг-Леффлера неизвестны, однако здесь также можно использовать Тауберовы теоремы, что приводит к простому условию: если $\sigma < 0$, то решения будут устойчивыми. Таким образом, потеря устойчивости может произойти только при переходе σ через 0.

Кратному нулевому корню соответствует одновременное выполнение

$$b(k) = a(k), \quad a(k)b(k) = A^2B.$$

Из этих условий следует $b^2(k) = A^2B$, что эквивалентно

$$B = A^2 + 2\frac{k^2D_2\pi^2}{L^2} + \left(\frac{k^2D_2\pi^2}{AL^2}\right)^2 = \left(A + \frac{k^2D_2\pi^2}{AL^2}\right)^2.$$

Подстановка этого соотношения в первое условие должна привести к тождеству. Это возможно, только если существует такое значение волнового числа k , при котором $c(k) = (k^2D_2\pi^2/AL^2)^2$, где

$$c(k) = 1 + \frac{k^2\pi^2}{L^2}(D_1 - D_2).$$

Такие k действительно существуют. Положим для удобства $L = \pi$. Тогда

$$D_2^2k^4 - A^2(D_1 - D_2)k^2 - A^2 = 0.$$

Из теоремы Виета немедленно следует $k_1^2k_2^2 = -A^2/D_2^2$ и $k_1^2 + k_2^2 = A^2(D_1 - D_2)/D_2^2$. Отсюда, в свою очередь, получим $D_1 = D_2^2k_1^2/A^2 - k_1^{-2} + D_2$. Мы можем положить k_1 равным любому натуральному числу, если только выполняется $k_1^2 \geq A/D_2$, поскольку в таком случае гарантированно $D_1 > 0$. Например, при $A = 2, D_2 = 1$ выберем $k_1 = 2$, так что $D_1 = 7/4$, и легко убедиться, что характеристическое уравнение действительно будет иметь двукратный нулевой корень. Отметим здесь также, что наборы параметров, при которых возможно вырождение нулевого корня, достаточно редки.

Пусть теперь характеристический полином имеет два различных действительных корня. Условие существования действительных корней получим из неравенства $\Delta(k) \geq 0$: оно квадратично по B и эквивалентно выполнению одно из неравенств

$$0 < B \leq B_-(k) = \left[A - \sqrt{c(k)} \right]^2, \quad B \geq B_+(k) = \left[A + \sqrt{c(k)} \right]^2.$$

Отметим, что если $\theta < 1$, то существует критическое значение k , такое что $c(k) = 0$, после которого корни всегда будут действительными (при фиксированном B). Переход к новым переменным $\mathbf{u} = P\mathbf{v}$, где P — матрица, столбцы которой являются собственными векторами $M(k)$, соответствующими собственным значениям σ_{\pm} , приводит систему к двум независимым уравнениям, решения которых имеют вид

$$v_i(t) = v_i(0)E_{\alpha}(\sigma_i t^{\alpha}) + v_i'(0)tE_{\alpha,2}(\sigma_i t^{\alpha}).$$

В силу асимптотических выражений (5) потеря устойчивости здесь происходит при переходе одного из корней σ через 0 при условии, что второй остается отрицательным. Обращение одного из корней в ноль соответствует выполнению $a(k)b(k) = A^2B$. Будем считать сейчас, что волновое число k может меняться непрерывно. Тогда после некоторых преобразований получим, что для параметра B критическим будет значение

$$B_T(k) = 1 + \frac{k^2\pi^2 D_1}{L^2} + A^2 \left[\frac{L^2}{k^2\pi^2 D_2} + \theta \right]^2.$$

Кривая B_T всегда лежит не ниже B_+ . Действительно,

$$\begin{aligned} B_T(k) - B_+(k) &= A^2 \left[\frac{L^2}{k^2\pi^2 D_2} + \theta - 1 \right]^2 - 2A\sqrt{c(k)} + \frac{k^2\pi^2 D_1}{L^2} = \\ &= \left[A\sqrt{\frac{L^2}{k^2\pi^2 D_2} + \theta - 1} - \frac{k\pi\sqrt{D_2}}{L} \right]^2 \geq 0. \end{aligned}$$

В области $0 < B < B_-$ справедливо

$$a(k) - b(k) = B - A^2 - 1 - \frac{k^2\pi^2}{L^2}(D_1 + D_2) < B - A^2 \geq 0,$$

так что сумма корней там всегда отрицательна. Простые, но громоздкие вычисления показывают, что в этой области корни имеют одинаковый знак, т.е. решения там всегда устойчивы. В точке k_0 , где B_T касается B_+ , нулевой действительный корень становится двукратным (но само k_0 при этом не

обязательно будет целым, так что противоречия с предыдущим изложением здесь нет). В области $B_+ < B < B_T$, $0 \leq k < k_o$, сумма корней характеристического полинома положительна:

$$a(k) - b(k) = B - A^2 - 1 - \frac{k^2\pi^2}{L^2}(D_1 - D_2) = B - A^2 - c(k) - 2\frac{k^2\pi^2 D_2}{L^2} > B_+ - A^2 - c(k) - 2\frac{k^2\pi^2 D_2}{L^2} = \frac{2}{A} \left[\sqrt{c(k)} - \frac{k^2\pi^2 D_2}{AL^2} \right]^2. \quad (15)$$

При любом θ кривая $\sqrt{c(k)}$ лежит выше второго слагаемого в самой правой части (15) с учетом ограничения $0 \leq k < k_o$, поскольку при $k = k_o$ выполняется $\sqrt{c(k)} = k^2\pi^2 D_2 A^{-1} L^{-2}$. Аналогично можно показать, что в области $B_+ < B < B_T$, $k > k_o$ сумма корней отрицательна. Минимум кривой B_T достигается в точке $\kappa_T = \left(A + \sqrt{\theta} \right)^2$. Поскольку в строгом смысле волновые числа могут быть лишь целочисленными, истинным будет минимум в точке k_T , такой что $B_T(k_T) - B_T(\kappa_T)$ является наименьшим.

Наконец, рассмотрим случай двух комплексных корней. Они возникают при $B_- < B < B_+$. Решение линейной системы строится так же, как и для двух различных действительных корней, с той лишь разницей, что теперь необходимо будет использовать функции Миттаг-Леффлера комплексного аргумента. Из асимптотического представления (5) следует, что это решение теряет устойчивость при выполнении равенства $|\text{Arg } \sigma_{\pm}| = \alpha\pi/2$, или эквивалентного ему (будем для определенности рассматривать корень σ_+)

$$\arctg \left(\frac{\sqrt{|\Delta(k)|}}{a(k) - b(k)} \right) + \pi = \frac{\alpha\pi}{2}.$$

Положим $\gamma = \text{tg}(\pi(2 - \alpha)/2)$. Тогда это условие можно привести к виду

$$B^2(1 + \gamma^2) - 2B(A^2 + c(k) + \gamma^2 B_H(k, 1)) + [(A^2 - c(k))^2 + \gamma^2 B_H^2(k, 1)] = 0, \quad (16)$$

где $B_H(k, 1) = 1 + A^2 + k^2\pi^2(D_1 + D_2)/L^2$ — критическое значение параметра B для неустойчивости Хопфа при $\alpha = 1$. Решения этого квадратичного по B уравнения будут определять две ветви кривой $B_H(k, \alpha)$. Верхняя из этих ветвей касается B_+ — в этом можно убедиться, подставив в (16) $k = k_o$ и $B = B_+(k)$, что приводит к тождеству.

Критические значения соответствуют дуге O_1R (см. рис. 1). Выше дуги O_2R модуль аргумента комплексных корней будет заведомо меньше $\pi/2$, т.е. при переходе через нее асимптотика решений линейной системы не меняется — они неустойчивы. Появление этой побочной дуги связано с периодичностью тангенса и тем, что в самом уравнении стоит γ^2 , так что информация о знаке

теряется:

$$\operatorname{tg}^2\left(\frac{\alpha\pi}{2}\right) = \operatorname{tg}^2\left(\frac{\pi(2-\alpha)}{2}\right).$$

При $\alpha \rightarrow 1 + 0$ обе ветви стремятся к $B_H(k, 1)$.

На рис. 1 показано взаимное расположение всех основных кривых, определяющих устойчивость решений в линейном приближении при различном выборе параметров. Неустойчивость Тьюринга возникает в тех случаях, когда минимальное значение на кривой B_T будет меньше, чем любое значение на дуге O_1R . При $\theta > 1$ это заведомо невозможно, поскольку B_T должна лежать выше кривой B_+ , которая монотонно возрастает по k в этом случае. Минимальное значение на кривой B_H (с учетом обеих ветвей) достигается при $k = 0$. Положение критической кривой B_T не зависит от α и остается точно таким же, как и для модели с обычными производными по времени. Более того, уравнение для критической кривой B_H по форме совпадает с таковым для случая субдиффузии (см. [7]). Диаграммы на рис. 1 отличаются от субдиффузионной модели лишь тем, что увеличивается область неустойчивости комплексных корней: при $\alpha < 1$ устойчивые корни лежат выше дуги O_2R , а при $1 < \alpha < 2$ — выше дуги O_1R . В точке R происходит касание кривых B_T и B_+ с верхней ветвью кривой B_H — оно соответствует двукратному нулевому корню характеристического уравнения.

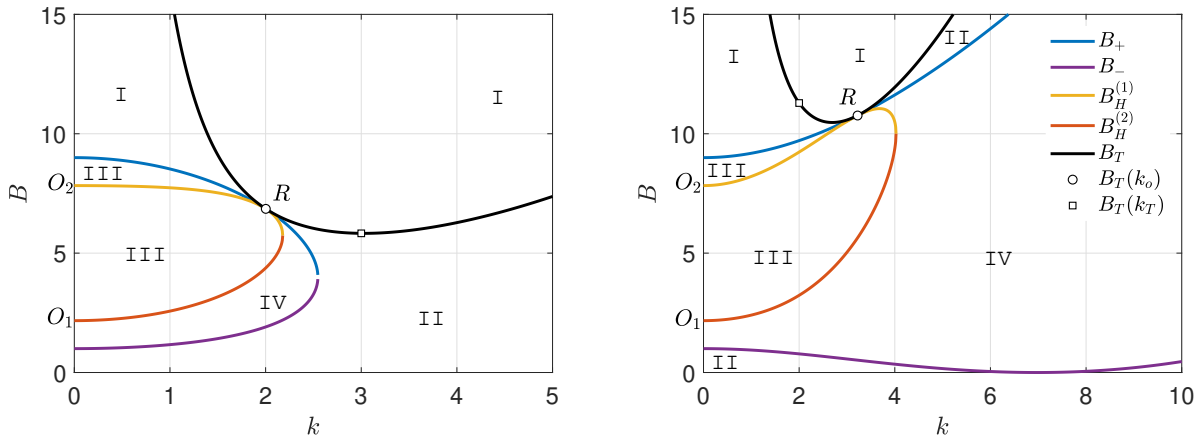


Рис. 1. Устойчивость в линейном приближении при $\alpha = 1.5$ и $A = 2$. Область I — неустойчивые действительные корни, II — устойчивые действительные, III — неустойчивые комплексные корни, IV — устойчивые комплексные корни. Слева: $D_1 = 1, \theta = 0.5$ и $L = 8$. Справа: $D_1 = 0.5, \theta = 1.25$ и $L = 4$

Возможна ситуация, при которой $B_T(k_T) = B_H(0, \alpha)$. В этом случае устойчивость теряют одновременно две моды, одна из которых является периодической по времени, а вторая — по пространственному переменному. На рис. 2 показаны зависимости величины θ_* , при которой происходит эта бифуркация

коразмерности 2, от параметра A при различном выборе D_1 и L . Это критическое значение отношения коэффициентов диффузии вычислялось как решение нелинейного уравнения

$$1 + A^2 - \frac{2A}{\sqrt{1 + \gamma^2}} = B_T(k_T),$$

где правая часть получена из (16) подстановкой $k = 0$. При этом нужно учитывать, что k_T может принимать только целочисленные значения, поэтому зависимости не являются непрерывными. При $\theta < \theta_*$ первой всегда происходит бифуркация Тьюринга, при $\theta > \theta_*$ — бифуркация Хопфа. Наиболее важное наблюдение, которое можно сделать с помощью рис. 2, заключается в том, что существует область параметров, в которой наблюдение пространственно периодических паттернов Тьюринга невозможно — величина θ_* там не определена. При исследовании субдиффузионной модели мы отмечали, что в них более вероятным становится наблюдение паттернов Тьюринга. Здесь же, напротив, поощряется формирование неустойчивостей периодических по времени решений.

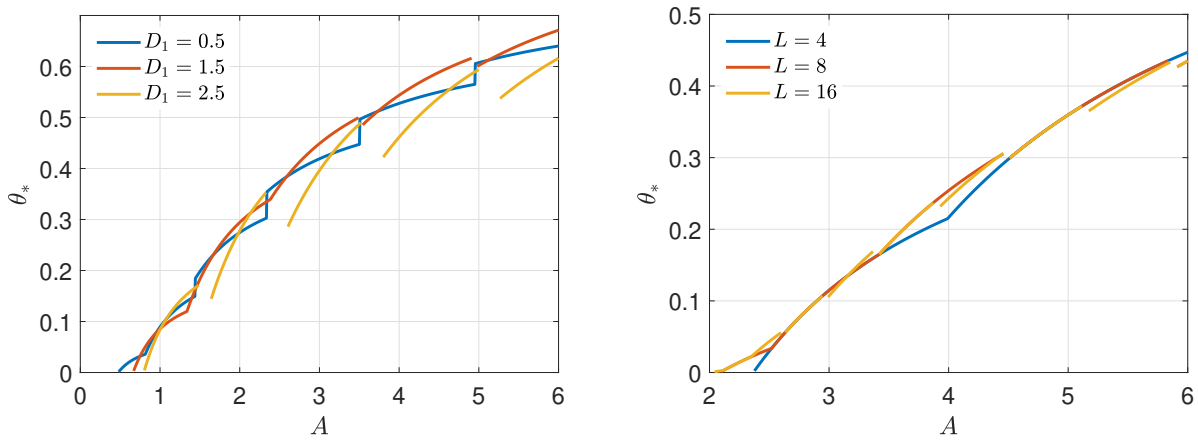


Рис. 2. Критические значения отношения коэффициентов диффузии θ_* как функции A при $\alpha = 1.1$, $L = 8$ и нескольких D_1 (слева), а также при $\alpha = 1.9$, $D_1 = 1.5$ и нескольких L (справа)

Смешанная субдиффузия: линейный анализ

Перейдем теперь к рассмотрению более общей модели с $\alpha_1 \neq \alpha_2$. Поскольку из предыдущего раздела видно, что супердиффузия в целом не привносит в модель ничего качественно нового, мы ограничимся лишь субдиффузионными режимами. Будем по-прежнему исследовать отклонения от равновесного решения в линейном приближении. Преобразование Лапласа приводит

к системе уравнений

$$\begin{pmatrix} q^{\alpha_1} - M_{11}(k) & -M_{12}(k) \\ -M_{21}(k) & q^{\alpha_2} - M_{22}(k) \end{pmatrix} \check{\mathbf{u}} = \begin{pmatrix} q^{\alpha_1-1}u_1(0) \\ q^{\alpha_2-1}u_2(0) \end{pmatrix},$$

решение которой имеет вид

$$\begin{aligned} \check{u}_1(q) &= \frac{q^{\alpha_1+\alpha_2-1}u_1(0) - q^{\alpha_1-1}M_{22}u_1(0) + q^{\alpha_2-1}M_{12}u_2(0)}{q^{\alpha_1+\alpha_2} - q^{\alpha_1}M_{22} - q^{\alpha_2}M_{11} + M_{11}M_{22} - M_{12}M_{21}}, \\ \check{u}_2(q) &= \frac{q^{\alpha_1+\alpha_2-1}u_2(0) - q^{\alpha_2-1}M_{11}u_2(0) + q^{\alpha_1-1}M_{21}u_1(0)}{q^{\alpha_1+\alpha_2} - q^{\alpha_1}M_{22} - q^{\alpha_2}M_{11} + M_{11}M_{22} - M_{12}M_{21}}. \end{aligned}$$

В общем случае оригиналы, соответствующие этим изображениям, неизвестны. Дальнейшие аналитические построения возможны, если положить, что α_i являются рациональными числами, причем $\alpha_1 = r/m < 1$ и $\alpha_2 = p/m < 1$. Для определенности будем рассматривать \check{u}_1 . Можно ввести новое переменное $w = q^{1/m}$, так что $q^{\alpha_1} = w^r$, $q^{\alpha_2} = w^p$ и

$$\check{u}_1(q) = \frac{q^{\alpha_1-1}P_1(w) + q^{\alpha_2-1}P_2(w)}{Q(w)},$$

где P_1 , P_2 и Q — полиномы со степенями p , 0 и $p+r$ соответственно. Рациональные функции P_i/Q могут быть разложены в сумму простейших, что позволяет выполнить обращение преобразования Лапласа, используя соотношение (4):

$$\begin{aligned} \frac{P_i(w)}{Q(w)} &= \sum_{j=1}^K \sum_{n=1}^{s_j} \frac{C_{i,j,n}}{(w - \sigma_j)^n}, & \check{u}_1(q) &= \sum_{j=1}^K \sum_{n=1}^{s_j} \frac{q^{\alpha_1-1}C_{1,j,n} + q^{\alpha_2-1}C_{2,j,n}}{(q^{1/m} - \sigma_j)^n}, \\ u_1(t) = L^{-1}[\check{u}_1(q)] &= \sum_{i=1}^2 C_{i,j,n} \sum_{j=1}^K \sum_{n=1}^{s_j} \frac{t^{n/m-\alpha_i}}{(n-1)!} E_{1/m, 1+1/m-\alpha_i}^{(n)} \left(\sigma_j t^{1/m} \right). \end{aligned}$$

Здесь σ_j и s_j соответственно корень полинома $Q(w)$ и его кратность. Решение u_2 будет отличаться лишь коэффициентами $C_{i,j,n}$. Таким образом, устойчивость решений линейной системы, описывающей отклонения от однородного стационарного состояния, определяется величинами σ_j : если $|\text{Arg } \sigma_j| > \pi/(2m)$ сразу для всех j , то решения устойчивы.

Отметим, что механизм формирования пространственно периодических паттернов в результате неустойчивости Тьюринга остается точно таким же, как и в случае $\alpha_1 = \alpha_2$. Действительно, если один из корней (возможно, кратный) полинома Q равен нулю, то свободный член этого полинома должен также обращаться в ноль. Это, в свою очередь, означает, что критическая

кривая задается соотношением $\det M(k) = 0$, точно таким же, как и в рассмотренном выше случае супердиффузии. Такой результат вполне ожидаем: при неустойчивости Тьюринга решения зависят только от пространственного переменного, поэтому выбор α_i не оказывает никакого влияния на критические значения B_T .

Провести более детальный анализ зависимости корней от параметров даже для случая $m = 2$, когда полином Q имеет степень не больше 3 ($r = p = 2$ не представляет для нас интереса, т.к. сводится к обычному брюсселятору), достаточно трудно: возникающие выражения столько громоздки, что не несут никакой пользы. Поэтому мы ограничимся численным анализом. Здесь для вычисления всех корней полинома использовался простой метод, сводящий эту задачу к задаче вычисления собственных чисел сопровождающей матрицы Фробениуса (*companion matrix*). На рис. 3 показаны результаты вычислений при $A = 2, L = 8, D_1 = 1, m = 19$ и нескольких различных θ . Разным цветам соответствуют типы бифуркаций, которые наблюдаются первыми при увеличении параметра B , начиная с нуля.

Наиболее важной здесь является возможность возникновения бифуркации Хопфа с ненулевым волновым числом, когда комплексно сопряженные корни теряют устойчивость при $k \neq 0$. Потенциальная возможность такого механизма упоминалась нами еще в [7], хотя в исследованном там случае она никогда не реализовывалась. Бифуркация этого типа становится возможной из-за того, что ветви критической дуги кривой B_H могут быть немонотонными функциями k и при определенном соотношении параметров достигать минимума при $k > 0$.

Смешанная субдиффузия: вычислительный эксперимент

Более глубокое понимание характерных особенностей формирующихся в рассматриваемой системе паттернов требует прямого численного решения (13). Для этого сначала выполним разностную аппроксимацию диффузионного слагаемого в правой части, что приводит к системе связанных дифференциальных уравнений

$$(\mathcal{D}_{0+}^\alpha \mathbf{X}_1)(t) = d_1 H \mathbf{X}_1 + A - (B + 1) \mathbf{X}_1 + \mathbf{X}_1 \circ \mathbf{X}_1 \circ \mathbf{X}_2, \quad (17a)$$

$$(\mathcal{D}_{0+}^\alpha \mathbf{X}_2)(t) = d_2 H \mathbf{X}_2 + B \mathbf{X}_1 - \mathbf{X}_1 \circ \mathbf{X}_1 \circ \mathbf{X}_2, \quad (17b)$$

$$\mathbf{X}_i(t) = (x_{i,0}, x_{i,1}, \dots, x_{i,N_z})^\top, \quad d_i = \frac{D_i N_z^2}{L^2}.$$

Здесь $x_{i,j} = x_i(t, z_j)$, $z_j = j/N_z$, $j = 0, 1, \dots, N_z$, $\mathbf{U} \circ \mathbf{V}$ обозначает покомпонентное умножение векторов одинаковой формы, а H — квадратная матрица.

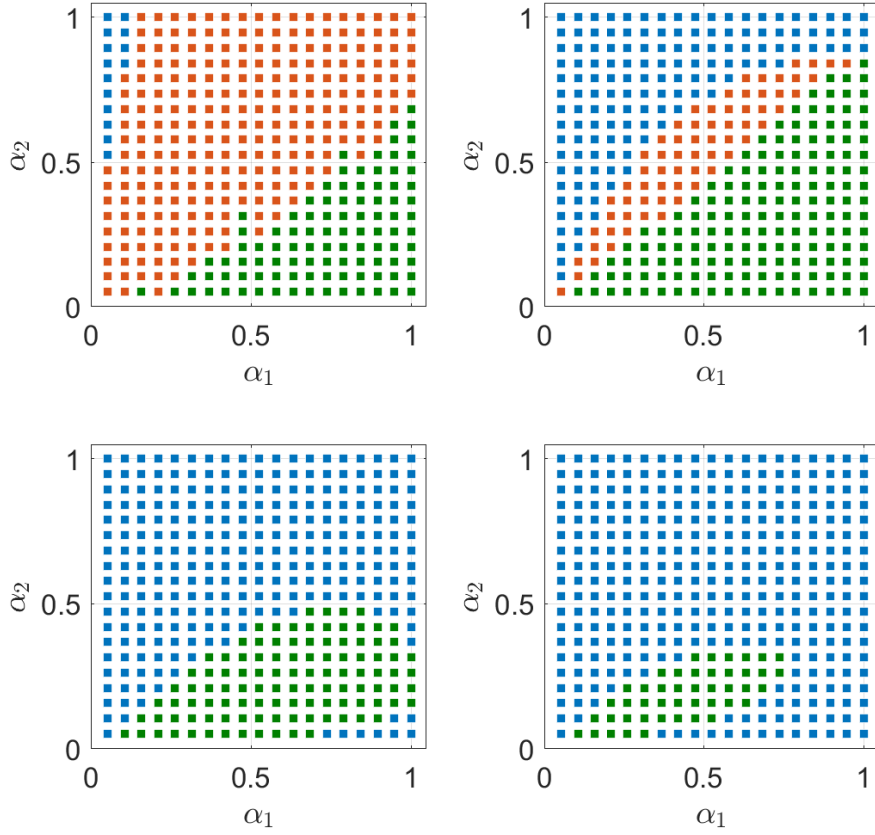


Рис. 3. Типы бифуркаций для различных r и p при $A = 2$, $D_1 = 1$, $L = 8$ и нескольких θ : 0.1 (слева сверху), 0.5 (справа сверху), 1.0 (слева внизу) и 1.25 (справа внизу). Красным показаны бифуркации Тьюринга, синим — бифуркации Хопфа с $k = 0$, зеленым — бифуркации Хопфа с $k \neq 0$

Для периодических граничных условий в крайних точках расчетной области формально должно выполняться

$$\left. \frac{\partial^2 x_i}{\partial z^2} \right|_{z=0} \approx \frac{x_{i,-1} - 2x_{i,0} + x_{i,1}}{N_z^{-2}}, \quad \left. \frac{\partial^2 x_i}{\partial z^2} \right|_{z=1} \approx \frac{x_{i,N_z-1} - 2x_{i,N_z} + x_{i,N_z+1}}{N_z^{-2}}. \quad (18)$$

Поскольку $x_{i,0} = x_{i,N_z}$, то естественно положить $x_{i,-1} = x_{i,N_z-1}$ и $x_{i,N_z+1} = x_{i,1}$. Легко видеть, что при таком выборе выражения в правых частях (18) совпадают, т.е. дифференциальные уравнения для $x_{i,0}$ и x_{i,N_z} будут одинаковыми, как того и требуют периодические граничные условия. Если заданы однородные граничные условия Неймана, то, используя для их аппроксимации центральные разности, получим

$$\left. \frac{\partial x_i}{\partial z} \right|_{z=0} \approx \frac{x_{i,1} - x_{i,-1}}{N_z^{-1}} = 0, \quad \left. \frac{\partial x_i}{\partial z} \right|_{z=1} \approx \frac{x_{i,N_z+1} - x_{i,N_z-1}}{N_z^{-1}} = 0,$$

откуда следуют соотношения $x_{i,-1} = x_{i,1}$ и $x_{i,N_z+1} = x_{i,N_z-1}$, которые затем нужно подставить в (18).

Для решения систем вида (17) известно множество различных подходов. Мы использовали схему, основанную на сведениях уравнений с производными Капуто к интегральным уравнениям Вольтерра и использовании линейной интерполяции. Более подробно класс этих разностных схем описан в [16]. Для удобства мы подробно рассмотрим одномерный случай. Известно [4], что решение задачи Коши $(\mathcal{D}_{0+}^\alpha y)(t) = f(t, y)$, $y(0) = y_0$ эквивалентно нахождению решения интегрального уравнения

$$y(t) = y(0) + \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_0^t (t - \tau)^{\alpha-1} f(\tau, y(\tau)) d\tau.$$

Пусть $t_n = nh$, $n \in \mathbb{N} \cup \{0\}$, $h > 0$ и $y_n = y(t_n)$. Аппроксимируем подынтегральную функцию f на каждом интервале $[t_n, t_{n+1}]$ линейной зависимостью

$$f(\tau, y) \approx f(t_{n+1}, y_{n+1}) + \frac{\tau - t_n}{h} [f(t_{n+1}, y_{n+1}) - f(t_n, y_n)].$$

Интегрирование по τ и нетрудные преобразования приводят к неявной схеме

$$\begin{aligned} y_n &= y_0 + h^\alpha \left[f_0 c_n(\alpha) + \sum_{s=1}^{n-1} a_{n-s}(\alpha) f_s + a_0(\alpha) f_n \right], \\ c_n(\alpha) &= \frac{(n-1)^{\alpha+1} - n^\alpha(n-\alpha-1)}{\Gamma(\alpha+2)}, \quad a_0(\alpha) = \frac{1}{\Gamma(\alpha+2)}, \\ a_s(\alpha) &= \frac{(s+1)^{\alpha+1} - 2s^{\alpha+1} + (s-1)^{\alpha+1}}{\Gamma(\alpha+2)}, \quad s = 1, 2, \dots, \quad f_n = f(t_n, y_n). \end{aligned}$$

Возвращаясь к интересующей нас системе уравнений (17), получим разностные соотношения

$$\begin{aligned} \mathbf{X}_i^{(n)} - h^{\alpha_i} a_0(\alpha_i) f_i(\mathbf{X}_1^{(n)}, \mathbf{X}_2^{(n)}) &= \mathbf{b}_i^{(n)}, \quad \mathbf{X}_i^{(n)} = \mathbf{X}_i(t_n), \\ f_1(\mathbf{X}_1^{(n)}, \mathbf{X}_2^{(n)}) &= d_1 H \mathbf{X}_1^{(n)} + A - (B+1) \mathbf{X}_1^{(n)} + \mathbf{X}_1^{(n)} \circ \mathbf{X}_1^{(n)} \circ \mathbf{X}_2^{(n)}, \\ f_2(\mathbf{X}_1^{(n)}, \mathbf{X}_2^{(n)}) &= d_2 H \mathbf{X}_2^{(n)} + B \mathbf{X}_1^{(n)} - \mathbf{X}_1^{(n)} \circ \mathbf{X}_1^{(n)} \circ \mathbf{X}_2^{(n)}, \\ \mathbf{b}_i^{(n)} &= \mathbf{X}_i^{(0)} + h^{\alpha_i} \left[f_i(\mathbf{X}_1^{(0)}, \mathbf{X}_2^{(0)}) c_n(\alpha_i) + \sum_{s=1}^{n-1} a_{n-s}(\alpha_i) f_i(\mathbf{X}_1^{(s)}, \mathbf{X}_2^{(s)}) \right]. \end{aligned}$$

Матрица Якоби левой части имеет разреженную блочно-диагональную структуру

$$J = \underbrace{\begin{pmatrix} d_1 H - (B+1) & O \\ O & d_2 H \end{pmatrix}}_{=J_0} + \begin{pmatrix} 2 \text{diag}(\mathbf{X}_1^{(n)} \circ \mathbf{X}_2^{(n)}) & \text{diag}(\mathbf{X}_1^{(n)} \circ \mathbf{X}_1^{(n)}) \\ -2 \text{diag}(\mathbf{X}_1^{(n)} \circ \mathbf{X}_2^{(n)}) & -\text{diag}(\mathbf{X}_1^{(n)} \circ \mathbf{X}_1^{(n)}) \end{pmatrix}.$$

Здесь оператор diag преобразует вектор в диагональную матрицу соответствующего размера.

Для решения системы нелинейных уравнений использовался метод Пауэлла (*Powell dogleg algorithm*, см. [17]). Матрица J_0 вычисляется один раз, векторы $\mathbf{b}_i^{(n)}$ следует вычислять лишь один раз на каждом временном слое. В качестве начального приближения используется решение с предыдущего временного слоя. Начальные условия представляют собой сумму пространственно однородного стационарного решения и гауссовского белого шума магнитуды $5 \cdot 10^{-2}$.

Полученные решения показаны на рис. 4 и хорошо иллюстрируют типичные сценарии формирования паттернов. Более темные цвета на них соответствуют более высокой концентрации. Неустойчивость Тьюринга (рис. 4а) приводит к формированию стационарных пространственно периодических решений, похожих на полосы. Количество этих полос определяется волновым числом k_T , при котором происходит потеря устойчивости. Неустойчивость Хопфа с $k = 0$ (рис. 4б), напротив, приводит к формированию однородного периодического по времени решения, также похожего на узкие полосы. Неустойчивость Хопфа с отличным от нуля волновым числом (рис. 4с) приводит к появлению бипериодического паттерна, больше всего похожего на шахматную доску: области высокой и низкой концентрации чередуются и во времени, и в пространстве.

Известно [18], что для обычного брюсселятора поведение в окрестности бифуркации коразмерности 2 является весьма сложным: здесь две неустойчивые моды конкурируют друг с другом, и в зависимости от соотношения параметров можно наблюдать один из чистых паттернов (Тьюринга или Хопфа); бистабильные паттерны, где расчетная область распадается на несколько доменов, в каждом из которых формируется чистый паттерн; бипериодические паттерны; наконец, хаотические режимы, для которых нельзя выделить какую-либо строгую структуру. В проведенном вычислительном эксперименте для системы (17) репертуар наблюдаемых решений оказался более скудным: это были либо чистые паттерны, либо бипериодические, как на рис. 4д. Субдиффузионные системы также допускают формирование хаотических паттернов: например, когда D_i малы по сравнению с L^2 , система фактически распадается на независимые нелинейные осцилляторы — см. рис. 4е. Наконец, возможно формирование паттернов, представляющих нечто среднее между хаотическими решениями и решениями с регулярной структурой. Один из таких паттернов показан на рис. 4ф. Заметим, что линейный анализ не может предсказать появление таких решений.

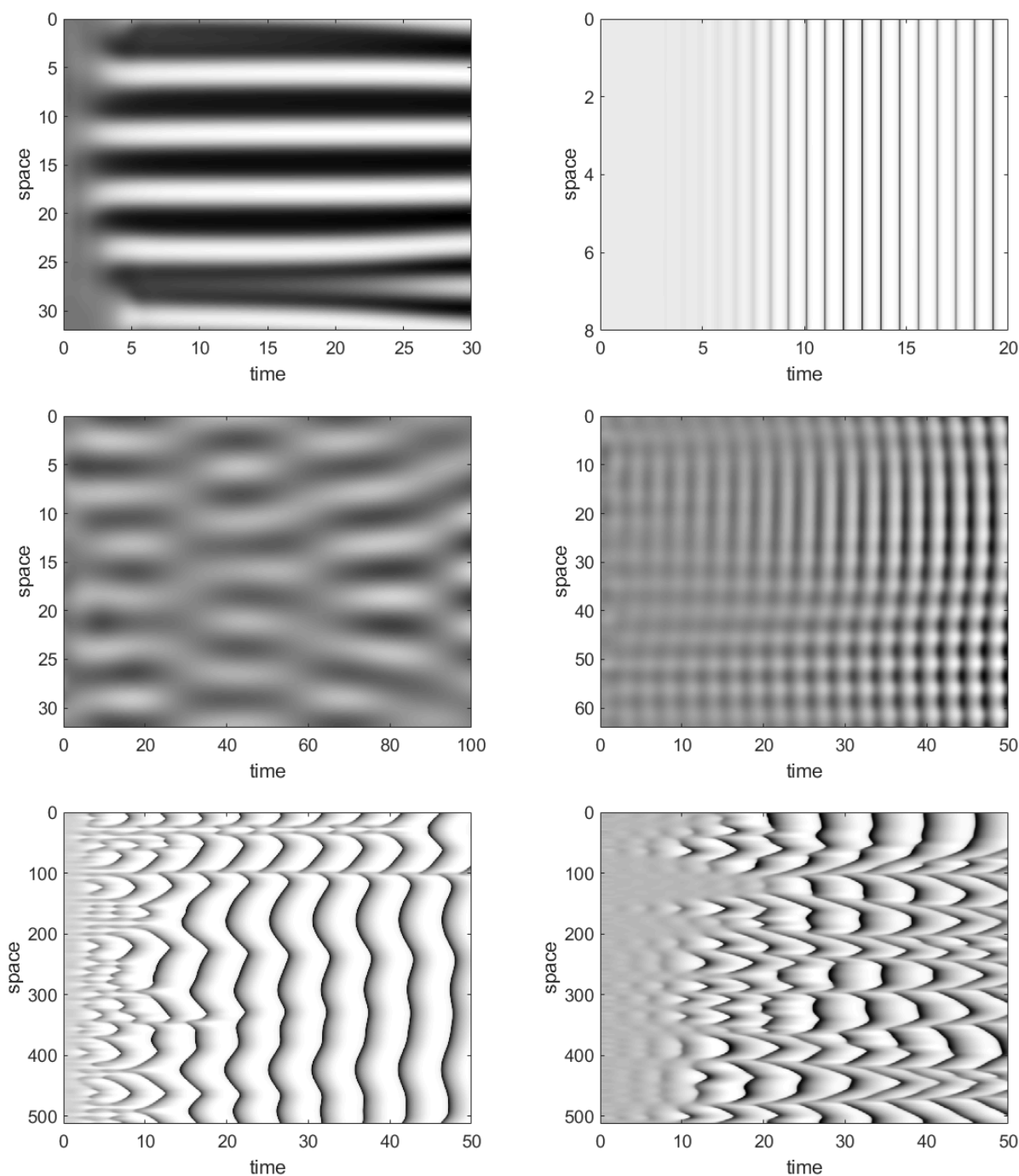


Рис. 4. Решения x_1 с периодическими краевыми условиями и $A = 2$: $r = 10, p = 11, B = 7, D_1 = 1, \theta = 0.5, L = 32$ (a); $r = 9, p = 17, B = 4.5, D_1 = 1, \theta = 1.25, L = 8$ (b); $r = 19, p = 9, B = 5.536, D_1 = 1, \theta = 0.5, L = 32$ (c); $r = p = 15, B = 6.4, D_1 = 1, \theta = 0.57, L = 64$ (d); $r = 17, p = 18, B = 7, D_1 = 4, \theta = 0.5, L = 512$ (e); $r = 18, p = 16, B = 6.5, D_1 = 2, \theta = 1, L = 512$ (f)

Заключение

Техника линейного анализа неустойчивостей позволяет сформулировать несколько важных выводов об особенностях формирования паттернов в си-

стемах с аномальной диффузией. В первую очередь, нужно отметить, что субдиффузия «поощряет» неустойчивость Тьюринга, расширяя по сравнению со стандартными системами область параметров, где могут наблюдаться пространственно периодические паттерны; супердиффузия, напротив, делает более вероятным развитие неустойчивости Хопфа.

В системе, где диффузионный транспорт имеет разные рациональные показатели «аномальности» для разных компонентов системы, неустойчивость Хопфа может возникать при отличных от нуля волновых числах, формируя бипериодические паттерны. Такой механизм невозможен при нормальной диффузии и обусловлен характерными свойствами операторов нецелого порядка. Наблюдение неустойчивостей того или иного типа зависит от обоих показателей — не удастся сконструировать из них такой скалярный параметр, который бы однозначно указывал тип возникающей неустойчивости при фиксированных значениях всех остальных параметров.

Мощным инструментом исследования систем реакции—диффузии являются амплитудные уравнения, которые дают универсальное описание их поведения в окрестности бифуркации. Для уравнений с производными Капуто такой формализм пока еще не развит в достаточной мере, что значительно препятствует пониманию основных закономерностей, управляющих формирование сложных упорядоченных структур в них. На текущий момент линейный анализ и прямое численное решение являются, по всей видимости, единственными способами изучения систем нецелого порядка.

Список литературы

- [1] Anomalous transport / Ed. by R. Klages, G. Radons and I. M. Sokolov. Weinheim: Wiley-VCH, 2008. 594 p.
- [2] Metzler R., Klafter J. The random walk's guide to anomalous diffusion: a fractional dynamics approach // Physics reports. 2000. Vol. 339, no. 1. P. 1–77.
- [3] Metzler R., Klafter J. Boundary value problems for fractional diffusion equations // Physica A: Statistical Mechanics and its Applications. 2000. Vol. 278, no. 1-2. P. 107–125.
- [4] Kilbas A. A., Srivastava H. M., Trujillo J. J. Theory and applications of fractional differential equations. Amsterdam: Elsevier, 2006. 541 p.
- [5] Mainardi F., Paradisi P., Gorenflo R. Probability distributions generated by fractional diffusion equation // arXiv:0704.0320. 2007. 46 p.

- [6] Самко С. Г., Килбас А. А., Маричев О. И. Интегралы и производные дробного порядка и некоторые их приложения. Минск: Наука и техника, 1987. 688 с.
- [7] Зенюк Д. А., Малинецкий Г. Г. Одномерный брюсселятор с дробными производными по времени // Препринты ИПМ им. М. В.Келдыша. 2019. по 98. 32 с.
- [8] Gorenflo R. et al. Mittag-Leffler functions, related topics and applications. Berlin: Springer, 2014. 441 p.
- [9] Weiss G. H. Aspects and applications of random walks. Amsterdam: Elsevier, 1994. 361 p.
- [10] Ross S. M. Introduction to probability models. Amsterdam: Elsevier, 2010. 784 p.
- [11] Феллер В. Введение в теорию вероятностей и ее приложения. Том 2. М.: Мир. 1984. 753 с.
- [12] Langlands T. A. M., Henry B. I., Wearne S. L. Turing pattern formation with fractional diffusion and fractional reactions // Journal of Physics: Condensed Matter. 2007. Vol. 19. no. 6. P. 065115.
- [13] Yuste S. B., Abad E., Lindenberg K. Reactions in subdiffusive media and associated fractional equations // Fractional dynamics / Ed. by J. Klafter, S. C. Lim and R. Metzler. Singapore: World Scientific, 2012. P. 78–103.
- [14] Volpert V. A., Nec Y., Nepomnyashchy A. A. Fronts in anomalous diffusion—reaction systems // Philosophical Transactions of the Royal Society A. 2013. Vol. 371, no. 1982. P. 20120179.
- [15] Николис Г., Пригожин И. Самоорганизация в неравновесных системах. М.: Мир, 1979. 512 с.
- [16] Garrappa R. Trapezoidal methods for fractional differential equations: Theoretical and computational aspects // Mathematics and Computers in Simulation. 2015. Vol. 110. P. 96–112.
- [17] Powell M. J. D. A hybrid method for nonlinear equations / Numerical methods for nonlinear algebraic equations, ed. by P. Robinowitz. London: Gordon and Breach Science. P. 87–144.
- [18] De Wit A. et al. Spatiotemporal dynamics near a codimension-two point // Physical Review E. 1996. Vol. 54, no. 1. P. 261.