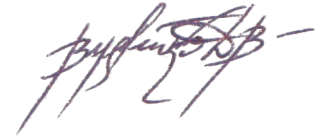


На правах рукописи



**ВЕРВЕЙКО Дарья Вячеславовна**

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭФФЕКТОВ  
КОНЕЧНОГО ОБЪЁМА ПРИ АВТОВОЛНОВЫХ  
ПРОЦЕССАХ В ХИМИЧЕСКОМ РЕАКТОРЕ**

Специальность 05.13.18

Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ

**АВТОРЕФЕРАТ**

диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Воронеж – 2014

Работа выполнена в ФГБОУ ВПО «Курский государственный университет».

Научный руководитель: доктор физико-математических наук, доцент,  
Постников Евгений Борисович

Официальные оппоненты: Постнов Дмитрий Энгелевич,  
доктор физико-математических наук, профессор,  
ФГБОУ ВПО «Саратовский государственный  
университет имени Н.Г. Чернышевского», кафедра  
радиофизики и нелинейной динамики, профессор,  
лаборатория биодинамики, руководитель

Лебедева Елена Александровна,  
кандидат физико-математических наук,  
ФГАОУ ВО НИУ «Санкт-Петербургский государственный  
политехнический университет», кафедра  
высшей математики, доцент

Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное учреждение  
науки Институт теоретической и экспериментальной биофизики  
Российской академии наук

Защита состоится «19» ноября 2014 г. в 15:10 на заседании диссертационного  
совета Д 212.038.20 при ФГБОУ ВПО «Воронежский государственный университет»  
по адресу: 394006, г. Воронеж, Университетская пл., д. 1, ауд. 335.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ФГБОУ ВПО «Воронежский  
государственный университет», полный текст размещён по адресу  
<http://www.science.vsu.ru>.

Автореферат разослан «11» сентября 2014 г.

Ученый секретарь  
диссертационного совета



Шабров Сергей Александрович

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

**Актуальность темы.** Одним из важных типов динамических структур, возникающих в распределенных активных средах (т.е. открытых системах, далёких от равновесия), являются автоволны. Они возникают в разнообразных физических, химических и биологических процессах (например, в реакции Белоусова – Жаботинского, процессах горения, распространении нервного импульса, живых тканях при морфогенезе) в виде бегущих, спиральных, стоячих волн, синхронных автоколебаний в пространстве и т.п. Универсальность данного явления обуславливает актуальность математического моделирования автоволновых процессов, создания численных методов анализа и их программную реализацию актуальной задачей.

Существующие математические модели, описывающие бегущие волны, обычно не учитывают толщину реактора, что в частности связано со сложностью численного моделирования трехмерных систем. Однако точное описание химических реакций должно учитывать конечность объёма, доступного для протекания реакции (P. De Kepper), так как причиной возникновения автоволн могут служить возмущения концентраций реагентов в объёме или изменения формы реактора (J. Voissonade), а также обмен реагентами с внешней средой на его границе (O. Nekhamkina). Поэтому необходима разработка новых математических моделей, наиболее точно описывающих процесс возникновения и динамику распространения автоволн с учётом эффектов конечного объёма, численных методов и создание на их основе комплексов программ имитационного моделирования, имеющих практический выход для решения современных биофизических задач.

Характерным свойством нелинейных моделей типа «реакция-диффузия» является возникновение пространственных периодичностей (механизм Тьюринга) при существенно различных коэффициентах диффузии. Однако ряд современных экспериментов (S. Baguau, T. Mair) детектирует подобное структурообразование при равенстве, что делает актуальной задачу разработки математической теории нетьюринговских неустойчивостей и разработки численных методов для их идентификации.

Работа соответствует тематическому плану 1.1.10 Курского государственного университета на 2010–2013 гг. по заданию Минобрнауки РФ (№ гос. рег. 01201151424) и направлению исследований Курского государственного университета в рамках выполнения государственного задания Минобрнауки РФ № 2014/349 на 2014 г. (проект № 1391).

**Цель диссертационной работы.** Разработка методики исследования математической модели формирования автоволн и их пространственной динамики для трёхмерной аксиально-симметричной системы типа «реакция-диффузия» с кубическим автокаталитическим однонаправленным реакционным членом в открытом пространственном химическом реакторе и алгоритмов

исследования структурообразования на основе адаптированных к данной задаче численных методов и программного обеспечения.

В рамках данной цели выделены следующие задачи:

1) развитие качественных аналитических и приближенных аналитических методов исследования математических моделей гликолитической реакции в открытом пространственном реакторе;

2) комплексные исследования научных и технических проблем, связанных с изучением диффузионных механизмов в сочетании с геометрическими характеристиками химического реактора конечного объёма, приводящих к возникновению бегущих автоволн, с применением современной технологии математического моделирования и вычислительного эксперимента, включая проверку адекватности математической модели данного объекта на основе данных натурального эксперимента;

3) разработка эффективных численных методов и алгоритмов и их реализация в виде имитационной компьютерной модели и комплекса проблемно-ориентированных программ для проведения вычислительного эксперимента, связанного с решениями задачи п.2.

**Методы исследования** основаны на использовании математического моделирования, теории динамических систем, математической физики, спектрального анализа, а также теории численных методов.

**Область исследования** соответствует п. 2 «Развитие качественных и приближенных аналитических методов исследования математических моделей», п. 4 «Реализация эффективных численных методов и алгоритмов в виде комплексов проблемно-ориентированных программ для проведения вычислительного эксперимента», п. 5 «Комплексные исследования научных и технических проблем с применением современной технологии математического моделирования и вычислительного эксперимента», п. 7 «Разработка новых математических методов и алгоритмов интерпретации натурального эксперимента на основе его математической модели» паспорта специальности 05.13.18 — «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

### **Результаты, выносимые на защиту, и их научная новизна**

В работе получены следующие результаты, характеризующиеся научной новизной:

1. Комплексное численное и аналитическое исследование трёхмерной аксиально-симметричной модели типа «реакция-диффузия» с кубическим автокаталитическим однонаправленным реакционным членом, включающее: а) анализ особенностей динамики распространения реагентов по объёму моделируемой области, обосновывающий кинематический характер наблюдаемых в натурном эксперименте автоволн; б) аналитические редукции исходной системы уравнений в частных производных к ОДУ для среднеполевого случая с распределённым параметром и бесконечно тонкого слоя, доказывающие существование предельного перехода к классическим автоколебательным систе-

мам.

2. Новая математическая модель процесса структурообразования нетьюринговского типа в виде фазовых кластеров.

3. Программный комплекс для имитационного моделирования автоволн в открытом химическом реакторе, основанный на предложенном алгоритме описания задачи на основе концепции семантического программирования.

4. Новый численный метод вейвлет-бифуркационного анализа структурообразования в пространственно-распределённых системах, позволяющий выявлять точки отклонения от линейной пространственной параметризации вдоль предельного цикла при временной эволюции системы.

5. Комплекс программ для реализации предложенного метода вейвлет-бифуркационного анализа, осуществляющий решение системы дифференциальных уравнений в частных производных и вейвлет-анализ его фазового распределения.

**Практическая значимость.** Результаты исследования моделей возникновения бегущих автоволн в открытом пространственном реакторе, алгоритмы и программное обеспечение, прошедшее процесс государственной регистрации библиотеки программ для ЭВМ, а также предложенный численный вейвлет-бифуркационный метод могут быть использованы для теоретического анализа процессов, протекающих в открытых реакторах, и планирования дальнейших биофизических экспериментов и разработки биотехнологических процессов.

Результаты диссертационной работы используются в ФГБОУ ВПО «Курский государственный университет» как в научной работе (методы анализа математических моделей и программное обеспечение используются в исследованиях, проводимых в НИЦ физики конденсированного состояния КГУ), так и в учебном процессе – при чтении специальных дисциплин и выполнении курсовых и выпускных квалификационных работ.

**Апробация работы.** Результаты по теме диссертации были лично доложены автором на научных конференциях: 3rd IEEE Multi-conference on Systems and Control 2009 (Saint-Petersburg, July 8–10, 2009); The 8th AIMS Conference on Dynamical Systems, Differential Equations and Applications (Germany, Dresden, May 25–28, 2010); всероссийская конференция «Необратимые процессы в природе и технике» (Москва, 26–28 января 2011); 2nd International Symposium on Rare Attractors and Rare Phenomena in Nonlinear Dynamics RA'11 (Latvia, Riga–Jurmala, May 16–20, 2011); Turing Centenary Conference: Computability in Europe 2012 – How the World Computes (United Kingdom, Cambridge, June 18–23, 2012) (*грант Elsevier «Women in Computability»*, *грант РФФИ 12-01-09260-моб\_з*); XX Международная конференция «Математика. Компьютер. Образование» (Пушино, 28 января – 2 февраля 2013); BIOMATH 2013 – an International Conference on Mathematical Methods and Models in Biosciences (Bulgaria, Sofia, June 16–21, 2013) (*грант ESMTB*

*Financial Support of Travels to Mathematical/Theoretical Biology Meetings 2013*).

Помимо этого, результаты работы докладывались на семинарах кафедры статистической физики, нелинейной динамики и стохастических процессов Берлинского университета имени Гумбольдтов (Германия), сектора информатики и биофизики сложных систем кафедры биофизики биологического факультета МГУ, лаборатории информационных технологий Объединенного института ядерных исследований г. Дубна.

**Публикации.** Материалы диссертации опубликованы в 12 печатных работах, из них 6 статей в рецензируемых журналах, рекомендованных ВАК [1–6]; статья в сборнике трудов конференции [8], которая проиндексирована в Web of Science, 4 тезиса докладов [9–12] и свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ [7].

В работах, опубликованных в соавторстве, лично соискателю принадлежит: [2] — проведено комплексное численное и аналитическое исследование трехмерной аксиально-симметричной модели типа «реакция-диффузия» с кубическим автокаталитическим однонаправленным реакционным членом; [5] — предложена новая математическая модель процесса структурообразования нетьюринговского типа в виде фазовых кластеров; [1, 8] — на основе численного моделирования выявлены особенности динамики распространения реагентов по объему моделируемой области; [3, 4, 9, 10, 12] — предложен новый численный метод вейвлет-бифуркационного анализа структурообразования в пространственно-распределённых системах, позволяющий выявлять точки отклонения от линейной пространственной параметризации вдоль предельного цикла при временной эволюции системы; [6] — показаны существенные различия скоростей распространения возмущений концентраций от границы области в ее объем и средних по сечениям этого объема отклонений функций распределения концентраций от линейности в вертикальном и латеральном направлениях; [11] — алгоритм описания исследуемой задачи на основе концепции семантического программирования.

**Структура и объём работы.** Диссертация состоит из введения, трёх глав, заключения и трёх приложений. Текст изложен на 127 страницах, включая 40 рисунков и 1 таблицу. Список цитируемой литературы состоит из 88 наименований.

## ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

**Во введении** обоснована актуальность диссертационной работы, сформулирована цель и аргументирована научная новизна исследований, показана практическая значимость полученных результатов, представлены выносимые на защиту научные положения.

**В первой главе** дан общий обзор основных автоволновых процессов, методов их математического моделирования и актуальных задач в данной области, в частности, существующие теоретические математические модели, описывающие динамику автоволн при гликолизе. Рассмотрены требующие

интерпретации современные натурные эксперименты по исследованию гликолиза в экстракте дрожжей в открытом пространственном реакторе, на основе чего сформулированы основные задачи математического моделирования эффектов конечного объёма при автоволновых процессах в химическом реакторе, в том числе обоснована необходимость разработки специализированного программного обеспечения, реализующего новые численные методы.

**Во второй главе** проведен анализ математической модели образования бегущих волн, возникающих в открытом цилиндрическом пространственном реакторе в процессе гликолитической реакции. Исследована модель процесса возникновения и распространения бегущих волн при неоднородном входе субстрата и предложен численный метод и его программная реализация в среде FlexPDE. Проанализирован характер автоволн и исследовано влияние параметров впуска и оттока на динамику процесса.

В основе математической модели лежит система нелинейных дифференциальных уравнений на плоскости, представляющая собой распределенную путём добавления диффузионных членов модификацию модели Селькова фосфофруктокиназной фазы гликолиза

$$\begin{aligned}\partial_t x &= D_1 \nabla^2 x + \nu(r, \phi) - xy^2, \\ \partial_t y &= D_2 \nabla^2 y + xy^2 - wy.\end{aligned}\tag{1}$$

при граничных (в полярных координатах, аксиально-симметричный случай)

$$\partial_r x|_{r=R} = \partial_r y|_{r=R} = 0\tag{2}$$

и начальных условиях  $x(r, \phi, z, 0) = x_0(r)$ ,  $y(r, \phi, z, 0) = y_0(r)$ . Здесь  $x$  и  $y$  — концентрации субстрата (АТФ) и продукта (АДФ) реакции соответственно. Параметр  $\nu(r, \phi)$  определяет впуск субстрата, а  $w$  — величину оттока продукта. Коэффициенты диффузии  $D_1$  и  $D_2$  в дальнейшем считаются равными —  $D_1 = D_2 = D$ . В правых частях уравнений содержатся как члены, описывающие процессы обмена с внешней средой, так и члены, описывающие непосредственно реакцию, т.е. система не учитывает эффекты конечного объёма — реакцию в толщине реактора и обмен веществ на границе с внешней средой.

Чтобы корректно учесть указанные эффекты для открытого цилиндрического реактора высоты  $h$  и радиуса  $R$ , предложено заменить систему (1) системой:

$$\begin{aligned}\partial_t x &= D_1 \nabla^2 x - xy^2, \\ \partial_t y &= D_2 \nabla^2 y + xy^2,\end{aligned}\tag{3}$$

удовлетворяющей граничным условиям на нижнем основании области решения в направлении внешней нормали к реактору (см. рис. 1а)

$$\partial_z x|_{z=0} = -\nu(r), \partial_z y|_{z=0} = w(r)y.\tag{4}$$

На полуинтервале  $r \in [0, R - \varepsilon)$ , где  $\varepsilon \ll R$ ,  $\nu(r)$  равно некоторой функции  $f(r)$  и  $w(r) = w_1 = const$ , на отрезке  $r \in [R - \varepsilon, R]$  функции  $w(r)$  и  $\nu(r)$  монотонно убывают до нуля, а при  $r \in [0, R]$  функции  $w(r)$  и  $\nu(r)$  непрерывны вместе со своими производными первого и второго порядков. Граничные условия на остальной поверхности цилиндра имеют вид

$$\partial_z x|_{z=h} = \partial_z y|_{z=h} = \partial_r x|_{r=R} = \partial_r y|_{r=R} = 0.\tag{5}$$

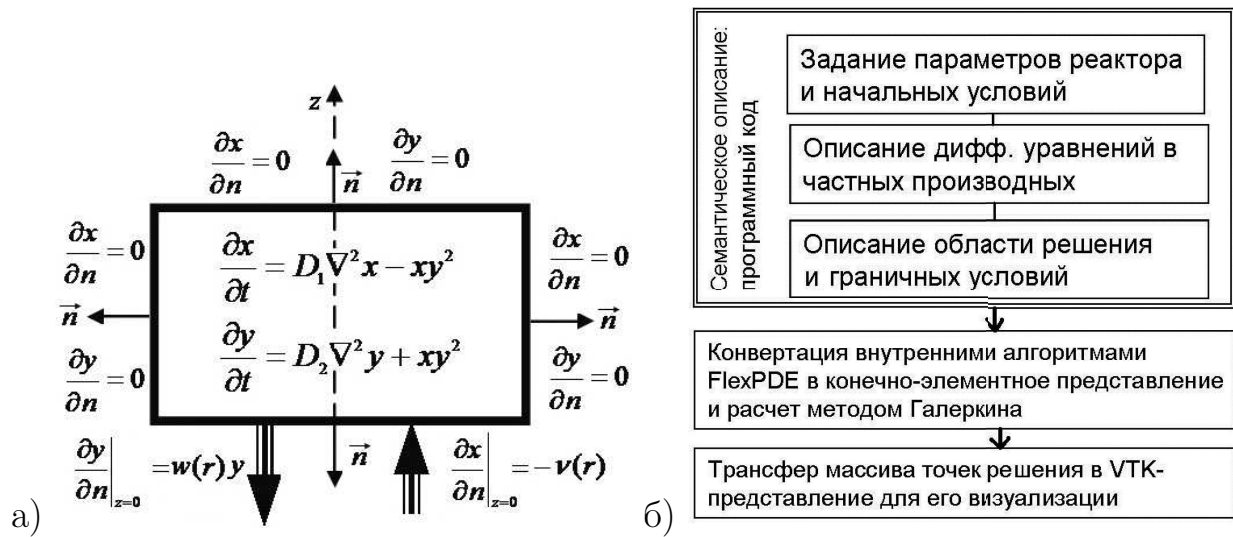


Рис. 1. а) Схема вертикального поперечного сечения моделируемого цилиндрического реактора ( $r$  и  $z$  – полярная и осевая координаты, соответственно) с указанием модельной системы дифференциальных уравнений в частных производных и граничных условий. б) Структурная схема алгоритма численного расчёта для данной модели.

Начальные условия выбраны в виде равномерного распределения:

$$x(r, z, 0) = x_0, y(r, z, 0) = y_0. \quad (6)$$

В рамках качественного аналитического исследования новой системы (3) доказана следующая **теорема**: *система Селькова (1) является результатом предельного перехода  $h \rightarrow 0$  системы (3) при условиях  $\lim_{h \rightarrow 0} D_1 h^{-1} \nu = \tilde{\nu}(r, \phi)$ ,  $\lim_{h \rightarrow 0} D_1 h^{-1} w = \tilde{w}$ .*

В общем случае конечного ненулевого значения высоты  $h$  аналитическое решение начально-краевой задачи (3)–(6) невозможно; исследование системы выполнялось путём *численного моделирования* на основе разработанного алгоритма (рис. 1б), реализованного при помощи *созданной специализированной программы имитационного моделирования*, использующей среду FlexPDE, основной особенностью которой является декларативность описания задач математической физики на основе концепции семантического программирования. Разработанный программный код использует описание модели в форме, близкой к естественной математической постановке задачи, и транслируется встроенными средствами FlexPDE в низкоуровневое представление, обрабатываемое решателем, базирующимся на методе конечных элементов Галёркина. Среда использует неявные обратные разностные методы с адаптивной сеткой и уточняющимся временным шагом. Финальная стадия численного метода преобразует матрицы решений к формату VTK, допускающему визуализацию программными средствами. Таким образом, разработанный на основе данного метода численного моделирования комплекс программ, получивший свидетельство о государственной регистрации, предоставляет естественный интерфейс для конечного прикладного пользователя при использовании ресурсов современного программного обеспечения.



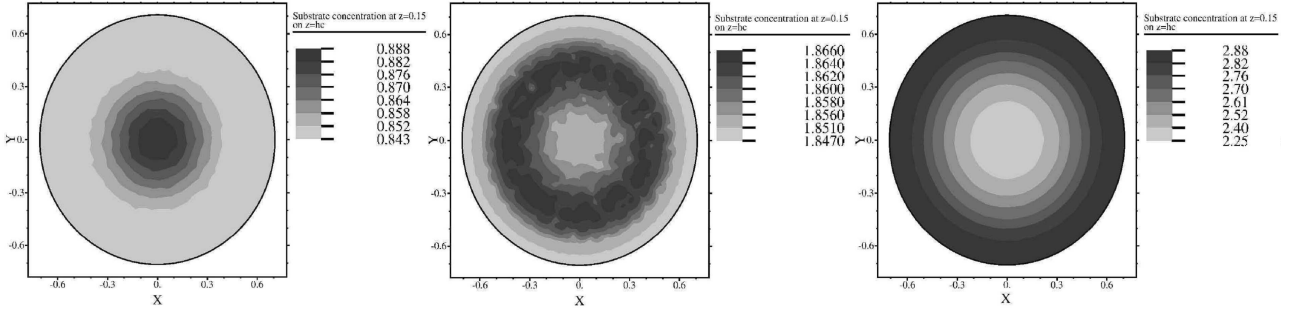


Рис. 2. Бегущие волны в открытом пространственном реакторе: приток вещества имеет максимум в центре реактора – волны направлены от центра к границам. Параметры реактора: радиус цилиндра  $\sqrt{0.5}$ , высота  $h = 0.19$ ,  $D = 0.05$ ,  $w_1 = 9.5$ ,  $x_0 = y_0 = 3$

Пример результатов моделирования в случае неоднородного втока субстрата, т.е. пространственно-распределённого граничного условия (4) с функцией, задающей осесимметричный параболоид  $\nu(r) = \nu_0 + (\nu_1 - \nu_0) r^2$  на полуинтервале  $r \in [0, R - \varepsilon)$ , показан на рис. 2 (при численных расчётах крайевые точки исключаются из сетки разбиения). Использованы значения параметров  $\nu_0 = 1.02$ ,  $\nu_1 = 0.55$  для расходящихся волн и  $\nu_0 = 0.55$ ,  $\nu_1 = 1.02$  — для сходящихся. В силу теоремы, при малой толщине реактора возникает локальная неустойчивость путем бифуркации Хопфа, следствием чего является зависимость параметров локального предельного цикла от величины втока  $\nu(r)$ . Качественно данный тип динамики сохраняется и при переходе к конечным значениям высоты реактора. Уменьшение количества субстрата и образование продукта, описываемое вторыми слагаемыми в уравнении (3), компенсируется их диффузионным распространением вверх и вниз соответственно и притоком/оттоком, определяемым граничными условиями (4). Таким образом, периодически происходит возврат к первоначальному состоянию с радиальным распределением концентраций реагентов, определяющим отклонение бифуркационного параметра Хопфа от среднего значения, что приводит к наблюдаемым волнам, распространяющимся от центра к границам цилиндра в случае максимума  $\nu(r)$  на оси цилиндра и обратно — в противном случае.

В силу существенной анизотропии системы (3)–(6) сформулировано следующее **утверждение**: бегущие радиальные волны, описываемые моделью реактора с конечной ненулевой толщиной (3–6), являются кинематическими, а диффузия играет роль только в перераспределении вещества в вертикальном направлении. Для доказательства утверждения исследованы средние кривизны функции  $x(r, z)$  в радиальном  $D_h = (\pi R^2 h)^{-1} \int_V \partial_{rr}^2 x dV$  и вертикальном  $D_v = (\pi R^2 h)^{-1} \int_V \partial_{zz}^2 x dV$  направлениях. Результаты моделирования, выполненного при помощи разработанного программного комплекса, описанного выше, демонстрируют (рис. 3), что средняя кривизна кривой распределения субстрата реакции в радиальном направлении близка к нулю, что означает, что в уравнениях (3) в среднем выполняется условие  $\nabla^2 \equiv \partial_{zz}$ , редуцирующее систему (3)–(6) к набору обыкновенных дифференциальных уравнений для радиальной компоненты вида  $d_t x(r, t) = \nu(r) - x(r, t) y^2(r, t)$ ,

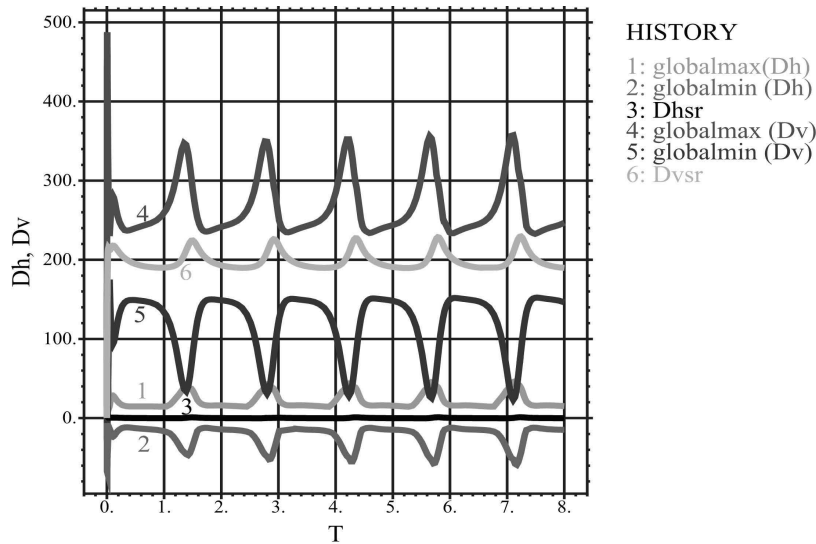


Рис. 3. Динамика изменения средней кривизны функции распределения субстрата в вертикальном ( $Dv_{sr}$ ) и радиальном направлениях ( $Dh_{sr}$ ), а также глобальные минимумы и максимумы членов, содержащих вторую производную, в уравнениях (3)

$d_t y(r, t) = -wy(r) - x(r, t)y^2(r, t)$ , имеющих временную динамику типа «предельный цикл», параметры которого различны для каждого  $r$ , что глобально приводит к фазовому сдвигу колебаний в соседних точках, т.е. фазовой (кинематической) бегущей волне. В свою очередь, существенно ненулевой средний оператор второй производной по  $z$  задаёт неоднородное распределение в вертикальном направлении, сглаживаемое из-за диффузии.

Данная существенно анизотропная структура отличает гликолитические волны в открытом пространственном реакторе от бегущих волн типа реакция-диффузия, возникающих в модели Фишера–Колмогорова, что подтверждается также сравнительным анализом модельных и экспериментальных данных.

**В третьей главе** рассмотрено структурообразование нетьюринговского типа, возникающее в одномерной модели процесса, описываемого распределённой системой (1), к которой сводится модель (3)–(6) при условии малой толщины реактора (т.е. при быстром установлении однородного вертикального распределения реагентов) в условиях слабой диффузионной связи в режиме релаксационных колебаний.

Соответствующая математическая модель задается системой дифференциальных уравнений (1) на одномерном пространственном интервале (отрезке длиной  $r = 1$ ), т.е. при условии  $\nabla^2 \equiv \partial_{rr}$ , границы которого являются непроницаемыми  $\partial_r x(0, \tau) = \partial_r x(1, \tau) = \partial_r y(0, \tau) = \partial_r y(1, \tau) = 0$ , со специально выбранными начальными условиями, соответствующими релаксационному предельному циклу (см. подробнее далее).

Распределённость системы моделируется системой  $N$  диффузионно-связанных узлов так, чтобы каждый малый участок разбиения полного интервала представлял собой точечный осциллятор в режиме релаксационных автоколебаний (параметры системы:  $\nu = 2.55$ ,  $w = 2$ ). Оценка диапазона

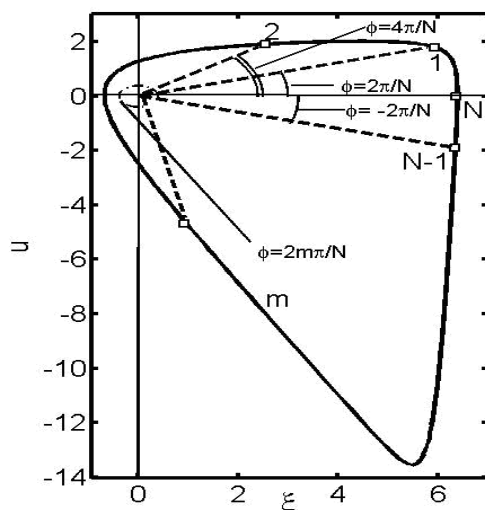


Рис. 4. Выбор начальных условий для распределённой системы Селькова

безразмерных коэффициентов диффузии для субстрата и продукта  $D$ , основанная на экспериментальных данных, даёт параметр диффузионной связи  $D \approx 10^{-2} - 10^{-5}$ .

Следует отметить, что в отличие от бифуркационного анализа обыкновенных дифференциальных уравнений, анализ режимобразования распределённых двумерных автоколебательных динамических систем стандартными методами обладает рядом недостатков. Так, требуется многократное численное решение системы с различными начальными условиями, сопровождаемое большим временем расчёта и затратами памяти на хранение всей совокупности решений; в случае релаксационных автоколебаний небольшие отклонения (вызванные, например, малыми возмущениями) от предельного цикла могут приводить к мгновенному изменению динамики системы, что требует дополнительных усреднений по реализациям; графическое представление бифуркационных диаграмм существенно многомерно, то есть ненаглядно. В связи с этим возникает необходимость разработки нового численного алгоритма.

Предложенный алгоритм базируется на *эквивалентном представлении* системы Селькова (1) при ( $D = 0$ ) в форме обобщённого уравнения Рэля:

$$\partial_t \xi = u, \partial_t u = 2\lambda (1 + c_1 u - c_2 u^2) u - [\omega (1 - \nu^{-1} u)]^2 \xi, \quad (7)$$

где  $2\lambda = \nu^2 w^{-2} - w$ ,  $c_1 = 2\nu - \nu^{-1} w^3 / w^2$ ,  $c_2 = w^{-2}$ ,  $\omega = \nu / \sqrt{w}$  и введены новые переменные  $u = \nu - wy$ ,  $\xi = x + y - (w^2 / \nu + \nu / w)$ .

Стационарная точка системы (7) является началом координат на фазовой плоскости, что позволяет использовать для определения фазы колебаний формулу  $\varphi = 2 \arctg(u / (\xi + \sqrt{\xi^2 + u^2}))$ . Начальные значения в узлах распределённой системы выбираются из значений полного предельного цикла локальной системы Селькова так, чтобы фаза выбранных точек в форме Рэля изменялась линейно от 0 до  $2\pi$  при прохождении интервала  $r \in [0, 1]$  (рис. 4).

Предлагаемый новый **численный метод** (см. блок-схему слева на рис. 5) состоит из следующих шагов: 1) задание начальных условий для переменных  $x$ ,  $y$  таким образом, чтобы на отрезке, на котором ищется решение, они

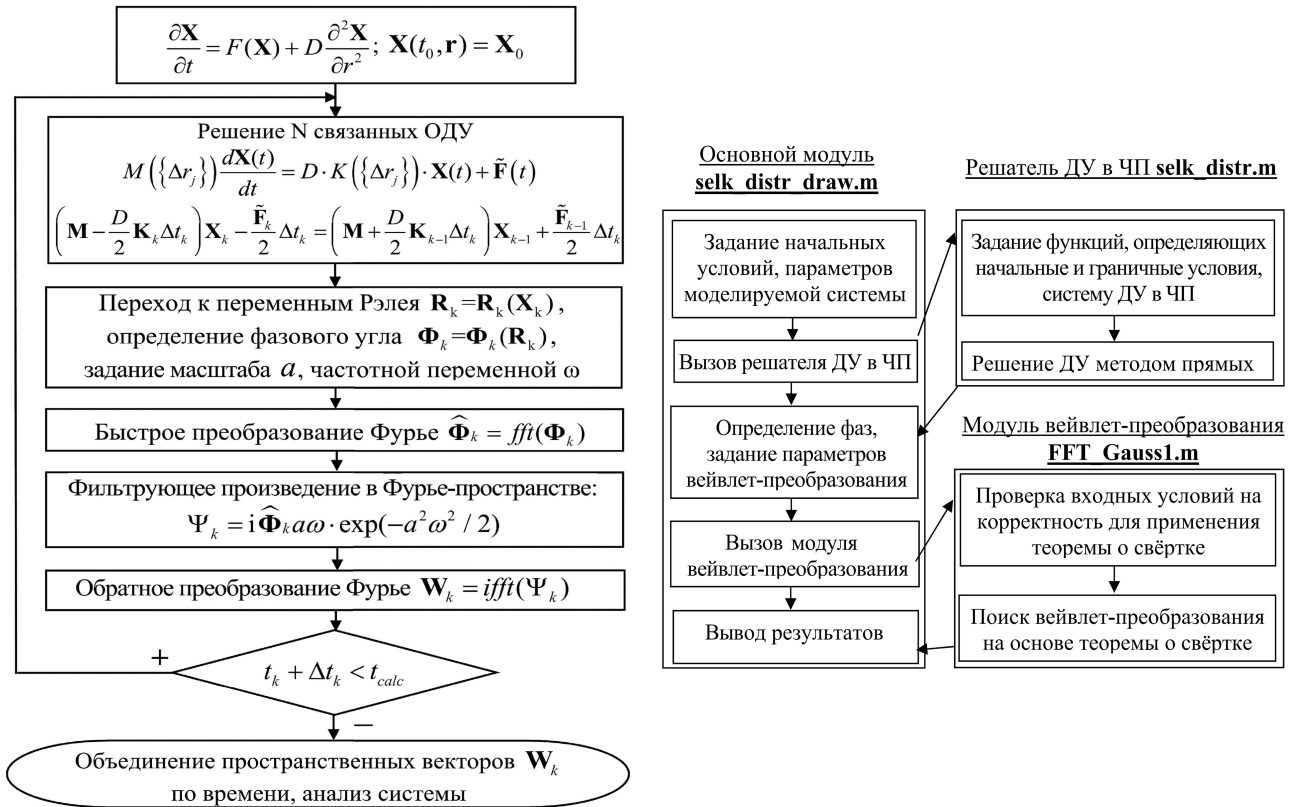


Рис. 5. Слева: структурная схема алгоритма численного исследования динамических систем на основе вейвлет-анализа. Справа: структура программного комплекса

равномерно заполняли кривую предельного цикла локального осциллятора в форме Рэлея, и решение системы дифференциальных уравнений в частных производных одним из известных методов (например, метод прямых); 2) вейвлет-анализ кривой распределения рэлеевских фаз на каждой временной итерации численного решения (шаг, представляющий основную принципиальную новизну); 3) «сборка» двумерной матрицы сглаженных производных (результат действия Wave-вейвлета с заданным масштабом) скачков фазы решения дифференциального уравнения, имеющей взаимно-однозначное соответствие с численным решением самой системы.

Задание в алгоритме начального условия в виде, соответствующем одному полному периоду изменения фазы, позволяет применить для расчёта вейвлет-преобразования с фиксированным масштабом  $a$  (на основании теоремы о свёртке) промежуточные прямое и обратное быстрые преобразования Фурье в силу того, что оно удовлетворяет условию периодизации. Проведение вейвлет-анализа на каждой временной итерации позволяет провести весь расчёт за один проход решения (т.е. количество операций увеличивается на малый численный множитель). Таким образом, последовательно с вычислением пространственного распределения переменных на каждом временном слое вычисляется распределение вейвлет-коэффициентов, отклонение значений которых от нуля детектирует нарушения линейности распределения фаз (т.е. возникновение бифуркации рождения вложенного пространственного колебания), при этом диффузионное сглаживание на масштабах порядка  $a$  уни-

рает шумовые погрешности, а применение преобразования к каждому новому временному слою позволяет избежать эволюционного накопления численных ошибок начального условия. Результат «сборки» вейвлет-преобразования представляет наглядную картину для дальнейшего анализа, пример которой представлен на рис. 6 для различных коэффициентов диффузии.

Практическая реализация метода выполнена в виде *комплекса программ* на языке MATLAB (рис. 5 справа). Для анализа применено непрерывное вейвлет-преобразования с помощью WAVE-вейвлета

$$w(z, a) = -a \frac{\partial}{\partial z} \int_{-\infty}^{+\infty} f(z') e^{-\frac{(z-z')^2}{2a^2}} \frac{dz'}{a\sqrt{2\pi}} = \int_{-\infty}^{+\infty} f(z') \frac{(z-z')}{a} e^{-\frac{(z-z')^2}{2a^2}} \frac{dz'}{a\sqrt{2\pi}}.$$

При нулевой диффузии система представляет собой цепочку несвязанных осцилляторов и вейвлет-преобразование (рис. 6а) остаётся неизменным в течение всего времени, скачку фазы от  $-\pi$  до  $\pi$  соответствует вертикальная линия в центре графика. Малые значения коэффициента диффузии порядка  $10^{-4}$  (рис. 6б) и меньше приводят к возникновению бифуркационного каскада. Линейность фаз быстро исчезает из-за диффузионного обмена между соседними точками системы. В дальнейшем возникают новые «центры» отклонений, структура системы усложняется, формируется определённая иерархия фазовых кластеров. При  $D = 10^{-3}$  (рис. 6в) до определённого момента времени наблюдается картина, схожая с ситуацией при  $D = 10^{-4}$ , однако затем большая диффузия приводит к выравниванию фаз соседних осцилляторов и дальнейшей синхронизации. При этом происходит только один этап образования разрыва в фазовом распределении (появляется дополнительный максимум в середине каждой половины системы), затем процесс стабилизируется.

Анализ результатов численного моделирования позволил обосновать следующие *утверждения*: а) формирование структур в распределённой системе (1) не связано с механизмом Тьюринга; б) их возникновение и качественный характер определяются величиной коэффициента диффузии с повышением регулярности при росте последнего; в) локализация точек возникновения пространственного бифуркационного каскада структурообразования соответствует выделенным областям переходов между участками быстрого и медленного движения релаксационного предельного цикла.

Утверждение (б), наблюдаемое в численном эксперименте, подтверждается теоретическими оценками, согласно которым характерное время синхронизации связанных автоколебательных систем на единичном интервале  $t_S \sim (\delta D)^{-1}$ , где  $\delta$  – характерное время притяжения к предельному циклу точки на фазовой плоскости, находящейся в его окрестности. В исследуемом случае наличие диффузионной связи приводит к отклонению от стабильных предельных циклов. В начале процесса происходит разделение системы на расширяющиеся со временем участки разнонаправленного изменения фаз: образуются кластеры, на каждом из которых фаза совершает одно полное

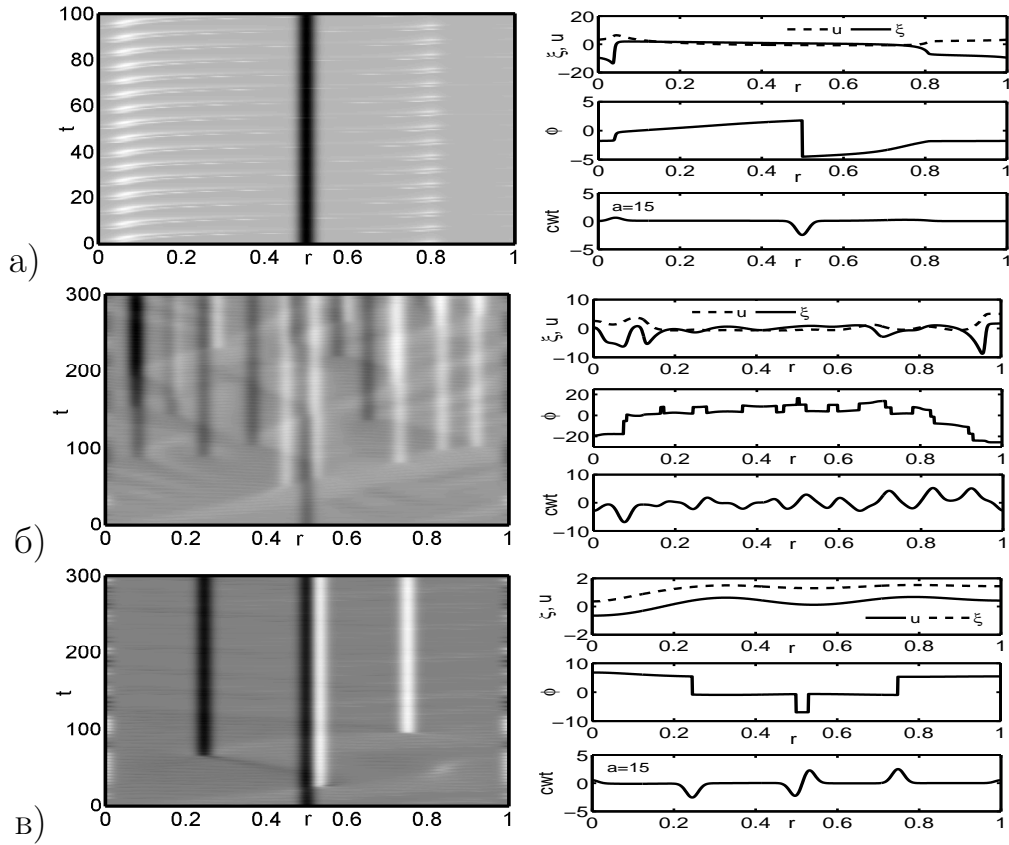


Рис. 6. Фазовая динамика распределённой системы (1). Слева: результат вейвлет-преобразования ( $a = 15$ ). Справа: пространственное распределение переменных в форме Рэлея  $u$  и  $\xi$ , распределение фазовых углов и соответствующее вейвлет-преобразование в момент времени  $Time = 300$ . а)  $D = 0$ , б)  $D = 10^{-4}$ , в)  $D = 10^{-3}$

колебание. Оценка отклонения показывает, что при  $D \geq 10^{-3}$  время установления синхронизации существенно меньше каждого из периодов колебаний, вследствие чего происходит выравнивание значений переменных на участке медленного движения. В системе появляется область, где разность фаз соседних точек невелика и пространственная структура стабилизируется. Формируются кинематические автоволны: видимая структура соответствует сдвинутым по фазе локальным колебаниям. При малых значениях диффузии такого не происходит, так как характерное время синхронизации превышает период колебаний, значения фазовых переменных системы на участке медленного движения вдоль одного предельного цикла выравниваются незначительно. Происходит непрерывное образование разнонаправленных изменений фазы – непрерывный бифуркационный каскад.

Непосредственным следствием указанного критерия является утверждение (в), проверенное путём экстенсивного численного расчёта при помощи разработанного комплекса MATLAB-программ, в ходе которого выделены участки быстрых и медленных движений на предельном цикле в форме Рэлея (рис. 4) и проведено их сопоставление с локализацией точек бифуркационного каскада (рис. 6) при образовании фазовых кластеров.

**В заключении** излагаются основные результаты диссертации.

**В приложениях** приведены программный код имитационной трёхмер-

ной модели открытого химического реактора для исследования автоволновых процессов, разработанный в среде FlexPDE, и комплекса программ на языке MATLAB, реализующего предложенный новый метод численного бифуркационного вейвлет-анализа.

## ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ РАБОТЫ

1. Математическая модель типа «реакция-диффузия» с кубическим автокаталитическим однонаправленным реакционным членом и граничными условиями второго рода (задача Неймана) в области конечного объёма допускает решения в виде кинематических автоволн с существенной анизотропией распространения и может быть использована для моделирования динамики реагентов широкого класса биохимических систем, удовлетворяя предельному переходу при редукции пространственной размерности к ранее апробированным моделям.

2. Разработанный комплекс программ на основе оригинального алгоритмического подхода семантического программирования позволил успешно выполнить имитационное моделирование процессов в открытом химическом реакторе и провести интерпретацию натурального эксперимента с гликолитическими автоволнами.

3. Предложенная математическая модель процесса структурообразования нетьюринговского типа объясняет возникновение фазовых кластеров как следствие возмущений начальных условий при малых отклонениях от релаксационного предельного цикла индивидуальных диффузионно-связанных осцилляторов для различных значений параметра связи.

4. Численный метод вейвлет-бифуркационного анализа, реализованный в оригинальном программном комплексе, позволил выявлять точки отклонения от линейной пространственной параметризации фазы вдоль предельного цикла при временной эволюции системы одновременно с численным решением моделируемой системы уравнений.

## ПУБЛИКАЦИИ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

*Публикации в изданиях, рекомендованных ВАК РФ*

- [1] Вервейко, Д. В. Трёхмерная математическая модель гликолитической реакции в открытом реакторе / Д. В. Вервейко, А. Ю. Верисокин // Ученые записки. Электронный научный журнал Курского государственного университета. — 2009. — Т. 3(11). — № гос. регистрации 0420900068\0041. <http://scientific-notes.ru/pdf/011-2.pdf>.
- [2] Self-sustained biochemical oscillations and waves with a feedback determined only by boundary conditions / E. B. Postnikov, A. Yu. Verisokin, D. V. Verveyko, A. I. Lavrova // Phys. Rev. E. — 2010. — Vol. 81. — P. 052901.
- [3] Верисокин, А. Ю. Синхронизация релаксационных колебаний в распределенной модели Селькова / А. Ю. Верисокин, Д. В. Вервейко // Ученые

ные записки. Электронный научный журнал Курского государственного университета. — 2010. — Т. 2(14). — № гос. регистрации 0421000068\0019. <http://scientific-notes.ru/pdf/014-3.pdf>.

- [4] Wavelet analysis of phase clusters in a distributed biochemical system / A. Yu. Verisokin, D. V. Verveyko, E. B. Postnikov, A. I. Lavrova // Discrete and Continuous Dynamical Systems. — 2011. — Vol. S 2011. — Pp. 1404–1412.
- [5] Verisokin, A. Yu. Non-Turing mechanism of self-sustained structures formation / A. Yu. Verisokin, D. V. Verveyko // Int. J. Bif. Chaos. — 2013. — Vol. 23. — P. 1350037.
- [6] Verveyko, D. V. Computational analysis of glycolytic reaction in open spatial reactor / D. V. Verveyko, A. Yu. Verisokin // Applied Mathematical Modelling. — 2014. — doi:10.1016/j.apm.2014.03.024.

Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ

- [7] Вервейко, Д. В. Имитационная трёхмерная модель открытого химического реактора для исследования гликолитических автоволновых процессов / Д. В. Вервейко // Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2013611619 от 29. 01. 2013.

Публикации в других изданиях

- [8] Model of glycolytic traveling waves control in 3D spatial reactor / A.Yu. Verisokin, D.V. Verveyko, E.B. Postnikov, A.I. Lavrova // IEEE Control Applications, (CCA) and Intelligent Control, (ISIC). — 2009. — Pp. 194–198.
- [9] Study of phase clusters in a distributed Selkov system / A. Yu. Verisokin, D. V. Verveyko, E. B. Postnikov, A. I. Lavrova // Abstracts of the 8th AIMS International Conference on Dynamical Systems, Differential Equations and Applications. — Drezden, Germany: 2010. — P. 326.
- [10] Фазовые кластеры в распределённой модели Селькова / А. Ю. Верисокин, Д. В. Вервейко, Е. Б. Постников, А. И. Лаврова // Тезисы международной конференции «Математика. Компьютер. Образование». — Пущино: 2011. — P. 24.
- [11] Verveyko, D. V. Computer simulation of three-dimensional reaction-diffusion models. case study: glycolytic reaction in open spatial reactor / D. V. Verveyko, A. Yu. Verisokin // Abstracts of Turing Centenary Conference CiE 2012: How the World Computes. — Cambridge, Great Britain: 2012. — P. 138.
- [12] Verveyko, D. V. Diffusion influence on phase synchronization in the glycolytic reaction in a distributed medium / D. V. Verveyko, A. Yu. Verisokin // BIOMATH 2013. Int. Conference on Mathematical Methods and Models in Biosciences. — Sofia, Bulgaria: 2013. — P. 93.