

*Е.С.Куркина, А.Г.Макеев*

## **МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КОЛЕБАНИЙ В ХИМИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ ТИПА ЛОТКИ, ПРОИСХОДЯЩЕЙ НА ПОВЕРХНОСТИ КАТАЛИЗАТОРА<sup>1</sup>**

Автоколебания являются наиболее распространенным феноменом самоорганизации, наблюдаемым в открытых нелинейных системах разной природы. Колебания скорости химической реакции представляют собой периодические изменения скорости реакции при постоянном составе исходной реакционной смеси и постоянной внешней температуре.

Колебания в химических системах были открыты почти 200 лет тому назад. В 1828 г. вышла работа Фехнера по изучению колебаний одной электрохимической реакции, а в 1833 г. Гершель публикует описание исследований колебаний гетерогенной каталитической реакции. В 1910 г. Лотка предложил модель гипотетической автокаталитической реакции, имеющей колебательный характер [1]. А в 1926 г. Вольтерра создал аналогичную модель для описания взаимодействий между двумя биологическими сообществами – “хищниками” и “жертвами”. До сих пор модель Лотки, или модель “хищник-жертва”, является самой популярной нелинейной моделью, используемой для описания колебаний в системах самой разной природы: биологических, экономических, социальных и др.

Огромный всплеск интереса к колебательным реакциям вызвала изумительная по своей зрелищности гомогенная реакция Белоусова-Жаботинского. Она была открыта Б.П. Белоусовым в 1953 г. и исследована А.М. Жаботинским в 60-е годы. Впоследствии появились тысячи работ посвященных этой реакции. В зависимости от условий проведения эксперимента в ходе этой реакции были обнаружены и исследованы такие явления самоорганизации, как бегущие и спиральные волны, диссипативные структуры.

Автоколебания скорости в гетерогенных каталитических системах были найдены в 1972-1973 гг. в реакции окисления СО на нанесенном платиновом катализаторе и в реакции окисления Н<sub>2</sub> на поликристаллическом Ni. С тех пор были обнаружены более 50 реакций, проходящих на поверхности катализатора, демонстрирующих колебательную динамику. Автоколебания наблюдаются как при атмосферном давлении, так и в условиях глубокого вакуума на катализаторах различной природы, включая грани монокристаллов благородных металлов, металлические, нанесен-

---

<sup>1</sup> Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проекты: 11-08-00979, 11-01-00887 и № 2.1.1/10057 аналитической ведомственной целевой программы “Развитие научного потенциала высшей школы (2009-2011 годы)”.

ные и цеолитные катализаторы. В конце 80-х годов был создан электронный эмиссионный микроскоп с огромным разрешением, который в соединении с компьютером позволил разглядеть нано фрагменты поверхности. Было показано существование огромного разнообразия пространственно-временных структур, возникающих на поверхности катализатора, и поистине драматических событий, происходящих в ходе химических реакций.

Для описания автоколебаний, как правило, используют системы обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ). Замкнутые траектории в фазовом пространстве системы являются образом периодических решений. Системы ОДУ получают из закона сохранения масс и кинетической схемы реакции в предположении, что реакционный слой является хорошо перемешанным, и скорость диффузии намного порядков превосходит скорости элементарных реакций, входящих в кинетическую схему. Однако, в реальном реакционном процессе скорость диффузии хоть и велика, но конечна, и существенную роль в ходе реакции могут играть пространственные и временные флуктуации. Далеко не все типы наблюдаемых в эксперименте колебательных процессов могут быть описаны решениями ОДУ типа предельного цикла или стационарной точкой типа центра. Существуют наведенные флуктуациями колебания в возбудимой среде. Известны спонтанные фазовые переходы в бистабильной химической системе, которые имеют нерегулярный колебательный характер. Все эти типы колебательных режимов могут быть описаны в рамках распределенной микроскопической стохастической модели. Кроме того, процесс макроскопических колебаний средних концентраций сопровождается возникновением различных пространственно-временных структур на микроуровне. И зачастую именно эти волновые структуры определяют тип колебательного режима, наблюдаемого на макроуровне.

Наиболее полной математической моделью, описывающей химическую реакцию на микроуровне, является *микроскопическая стохастическая модель*. Элементарные процессы, задаваемые кинетической схемой реакции, здесь буквально разыгрываются на уровне отдельных атомов и молекул, поэтому микроскопические стохастические модели называют *имитационными*. Имитационные модели естественным образом описывают внутренние флуктуации, присущие природе химических превращений, пространственные корреляции и другие явления, которые не могут быть исследованы на основе детерминистических моделей. В основе математической стохастической модели микроуровня лежит система линейных дифференциальных уравнений огромной размерности, описывающая изменение вероятностей состояний реакционной системы. Эта система называется основным кинетическим уравнением (ОКУ) (“master equations” в западной литературе). Для нахождения решений системы микроскопической стохастической модели используется динамический

метод Монте-Карло, при котором эволюция системы непосредственно разыгрывается. Основным недостатком имитационной модели является ее огромная размерность, а значит, и большой объем вычислений, требующий значительных вычислительных ресурсов. Несмотря на появление в последнее время быстродействующих ЭВМ и методов параллельных вычислений, область применения имитационных моделей остается ограниченной относительно простыми реакциями, в которых участвует немного веществ. Другим недостатком имитационной модели является невозможность предварительного определения областей существования качественно различных решений в пространстве внешних параметров. В системах ОДУ с этой целью проводится бифуркационный анализ стационарных и периодических решений, основанный на численных методах продолжения по параметру.

Точечные и распределенные детерминистические модели являются приближениями среднего поля, и если детерминистические модели удастся вывести из микроскопической модели путем усреднения, тогда точечная и распределенная модели вместе с микроскопической моделью образуют *единую иерархическую систему математических моделей, описывающих рассматриваемое явление на разных пространственных масштабах*. В этом случае детерминистические модели имеют точную микроскопическую трактовку, а из результатов расчетов методом Монте-Карло динамики имитационной микроскопической модели можно извлечь детальную информацию о причинах зарождения и движущих силах пространственно-временных структур. При увеличении размера решетки и увеличении скорости диффузии, то есть при уменьшении уровня флуктуаций, имитационная модель дает те же результаты, что и детерминистические модели. С другой стороны, точечная и распределенная детерминистические модели могут указать значения параметров, при которых можно наблюдать определенное явление в микроскопической модели даже при наличии существенных флуктуаций.

Теоретическое исследование и объяснение сложных явлений пространственно-временной самоорганизации, наблюдаемое в экспериментах, в рамках математических моделей одного класса вряд ли может быть полным. Необходимо использовать системы согласованных математических моделей, описывающих эволюцию реакционных систем на разных пространственных масштабах, что позволяет эффективно сочетать преимущества математических моделей каждого класса.

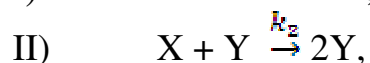
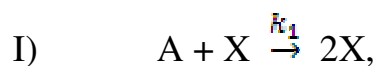
В настоящей работе рассматривается двухкомпонентная гетерогенно-каталитическая реакция, происходящая на поверхности катализатора с квадратной решеткой. Эта реакция является решёточным аналогом реакции Лотки. В соответствии с кинетической схемой реакции строится иерархическая система математических моделей, начиная со стохастической

модели микро-уровня и заканчивая моделями макро-уровня. Модель самого верхнего уровня, полученная в приближении среднего поля при бесконечной скорости диффузии обеих компонент реакции, не имеет периодических решений.

В работе предложены две системы ОДУ с парными вероятностями, учитывающими ограниченную скорость диффузии той или другой компоненты реакции. Эти системы демонстрируют автоколебания. Проведен параметрический анализ моделей, в пространстве параметров определены области автоколебаний. Проведено сравнение решений этих систем с динамикой микроскопической стохастической модели, найдены условия возникновения колебаний на макроуровне.

## 1. СИСТЕМА МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ

**1.1. Кинетическая схема.** А. Лотка в 1920 году [2] предложил схему гипотетической химической реакции, имеющей колебательный характер. Кинетическая схема реакции, происходящей в объеме реактора, имеет вид:



Считается, что концентрация вещества А поддерживается на неизменном уровне, а вещество В немедленно удаляется из реактора. Рассмотрим аналогичную реакцию, происходящую на поверхности катализатора. Такая реакция ранее рассматривалась в работах [3-7].

1)  $[X] + * \xrightarrow{k_1} 2[X]$  – адсорбция вещества А, которая происходит только в присутствии уже адсорбированной частицы А ( $[X]$ );

2)  $[X] + [Y] \xrightarrow{k_2} 2[Y]$ , – реакция между соседними адсорбированными частицами  $[X]$  и  $[Y]$ ;

3)  $[Y] \xrightarrow{k_3} *$  – десорбция вещества Y.

Добавим стадии, описывающие поверхностную диффузию частиц:

4)  $[X] + * \xrightleftharpoons{D_1} * + [X]$  – диффузия частиц вещества X;

5)  $[Y] + * \xrightleftharpoons{D_2} * + [Y]$  – диффузия частиц вещества Y.

Здесь X, Y – молекулы в газовой фазе; \* – свободный адсорбционный центр на поверхности;  $[X]$ ,  $[Y]$  – адсорбированные частицы на поверхности катализатора;  $k_1, k_2, k_3, D_1, D_2$  – константы скоростей элементарных стадий.

**1.2. Основное кинетическое уравнение.** В основе детального математического описания химической реакции на микроуровне лежит модель

многокомпонентного двумерного решеточного газа. Поверхность катализатора представляется в виде регулярной двумерной решетки энергетически эквивалентных адсорбционных центров с квадратной элементарной ячейкой.

Рассмотрим фрагмент решетки, содержащий  $N = N_1 \times N_2$  узлов, с периодическими граничными условиями. Эволюция вероятностей состояний фрагмента решетки в марковском приближении описывается основным кинетическим уравнением:

$$\frac{dP_{\vec{S}}}{dt} = \sum_{\vec{S}'} [P_{\vec{S}'} \lambda(\vec{S}' \rightarrow \vec{S}) - P_{\vec{S}} \lambda(\vec{S} \rightarrow \vec{S}')] \quad (1)$$

с начальными условиями  $P_{\vec{S}}(t=0) = P_{\vec{S}}^0$ . Здесь  $t$  – время [сек],  $\vec{S}$  – состояние фрагмента решетки в момент времени  $t$ , определяемое числами заполнения  $s_i$  всех узлов:  $\vec{S} = \{s_i\}$ ,  $i = 1, \dots, N^2$ ,  $s_i \in \{*, [X], [Y]\}$ ;  $P_{\vec{S}}(t)$  – безусловная вероятность состояния  $\vec{S}$  в момент  $t$ ;  $\lambda(\vec{S}' \rightarrow \vec{S})$  – интенсивность перехода системы из состояния  $\vec{S}'$  в состояние  $\vec{S}$  в момент  $t$ . Интенсивность перехода определяется скоростями всевозможных поверхностных процессов, переводящих фрагмент из одного состояния в другое, и зависит от текущего состояния фрагмента решетки. В работе рассматриваются одно- и двухузельные процессы, происходящие на ближайших узлах.

**1.3. Имитационная математическая модель.** ОКУ (1) представляет собой систему большой размерности, поэтому для его решения используют приближенные методы. Отдельные траектории эволюции реакционной системы в пространстве состояний могут быть получены с помощью динамического (кинетического) метода Монте-Карло (МК, “Kinetic Monte Carlo” в западной литературе) [10-11].

Итак, реакция рассматривается как случайный марковский процесс с дискретным множеством состояний для потока элементарных событий, происходящих на фрагменте решетки, включающем  $N$  центров. Элементарными событиями (актами) являются реализации стадий кинетической схемы. Осуществление элементарного акта приводит к изменению чисел заполнения  $s_i$  в одном или двух узлах, при этом изменяется общее состояние системы  $\vec{S}$ . Эволюция системы происходит в результате поочередного осуществления элементарных актов. Скорость совершения того или иного акта определяется только текущим состоянием.

Алгоритм имитации процесса реакции с помощью динамического метода Монте-Карло (МК) состоит из следующих этапов [10-11]:

1) *Задание начального состояния фрагмента.* Начальное состояние фрагмента  $\vec{S}(0)$  либо получено в результате произведённого ранее расчё-

та, либо готовится специальным образом (например, является результатом случайного разбрасывания частиц по узлам фрагмента).

2) *Вычисление скоростей элементарных актов.* Пусть в текущий момент времени  $t_1$  фрагмент находится в состоянии  $\vec{S}$ . По приведенным формулам вычисляются скорости всех возможных элементарных актов, переводящих фрагмент в новое состояние  $\vec{S}'$ , и суммарная скорость изменения текущего состояния:

$$R = \sum_{\vec{S}'} \lambda(\vec{S} \rightarrow \vec{S}') \quad (2)$$

3) *Определение времени выхода системы из текущего состояния.* Определяется момент времени  $t_2$  выхода системы из текущего состояния:

$$t_2 = t_1 - (\ln(\xi)/R), \quad (3)$$

где  $\xi$  – случайная величина, равномерно распределенная на интервале (0,1), а суммарная скорость  $R$  вычисляется по формулам (2).

4) *Выбор события и изменение состояния фрагмента.* Случайно выбирается один из возможных элементарных актов с вероятностью, пропорциональной его скорости. Изменяется состояние фрагмента решетки и осуществляется переход к этапу 2.

#### 1.4. Иерархическая система точечных моделей.

**1.4.1. Приближение среднего поля. Модель №2.** Предположим, что в каждый момент времени адсорбционный слой находится в случайно перемешанном состоянии, так что вероятность какого-либо события в каждом узле (или паре узлов) одинакова. Для этого необходимо, чтобы скорости миграции адсорбированных частиц не зависели от локального окружения и значительно превышали скорости остальных элементарных актов. Считая, что элементарные акты осуществляются в узлах бесконечной идеальной квадратной решетки, получим следующую систему ОДУ [3-7], описывающую изменение поверхностных концентраций  $\theta_1$  и  $\theta_2$  адсорбированных частиц [X] и [Y] соответственно:

$$\begin{cases} \frac{d\theta_1}{dt} = 4k_1 \theta_1 \theta_0 - 4k_2 \theta_1 \theta_2, \\ \frac{d\theta_2}{dt} = 4k_2 \theta_1 \theta_2 - k_3 \theta_2. \end{cases} \quad (4)$$

где  $\theta_0 = 1 - \theta_1 - \theta_2$  – концентрация свободных мест на поверхности катализатора. Модель (4) определена на фазовом множестве  $Si$ :

$$Si = \{0 \leq \theta_1, \quad 0 \leq \theta_2, \quad \theta_1 + \theta_2 \leq 1\} \quad (5)$$

Система (4) дополняется начальными условиями  $\theta_i(0) = \theta_i^0$  ( $i = 1, 2$ ). Концентрации  $\theta_0, \theta_1, \theta_2$  можно рассматривать как вероятности существо-

вания на поверхности свободного места, частиц сорта [X] (“жертв”) и частиц сорта [Y] (“хищников”), соответственно.

**1.4.2. Модель №1 Лотки.** Наряду с моделью поверхностной реакции (4) рассмотрим известную модель Лотки [2]:

$$\begin{cases} \frac{d\theta_1}{dt} = 4k_1\theta_1 - 4k_2\theta_1\theta_2, \\ \frac{d\theta_2}{dt} = 4k_2\theta_1\theta_2 - k_3\theta_2. \end{cases} \quad (6)$$

Она отличается от модели (4) первым членом в уравнении, описывающим изменение концентрации частиц [X]. Если модель (6) рассматривать как модель поверхностной реакции, то по отношению к модели (4) ее можно считать приближением среднего поля для случая, когда частиц на поверхности мало. Отметим, что модель (6), известная в литературе как модель Лотки-Вольтерра, имеет существенный недостаток и не раз подвергалась справедливой критике [8]. Дело в том, что если “хищники” отсутствуют, то размножение “жертв” ничем не ограничено и концентрация частиц [X] устремляется к бесконечности. Поэтому, для устранения неограниченного роста числа “жертв”, были предложены различные модификации модели. Уравнения (4) тоже являются такой модификацией.

Модели (4) и (6) справедливы лишь в случае быстрой диффузии и предполагают случайное распределение частиц на поверхности. Для построения моделей, учитывающих ограниченную скорость диффузии одной или обеих компонент, воспользуемся так называемой парной аппроксимацией [9].

**1.4.3. Модель №5. Приближение среднего поля, ограниченная скорость диффузии частиц первого и второго сорта.** Кинетическая схема реакции содержит одноузельные (стадия 3) и двухузельные процессы (стадии 1, 2, 4, 5). Для более точной аппроксимации двухузельных процессов будем использовать модель с парными вероятностями [9]. В частности, в рамках этой модели можно описать прыжковую диффузию частиц [X] и [Y] (стадии 4,5). Уравнения (4) не содержат параметров скорости диффузии, так как предполагают её бесконечно быстрой.

Рассмотрим фрагмент поверхности с квадратной решеткой размером  $N = N_1 \times N_2$  и периодическими граничными условиями. Каждый адсорбционный центр на поверхности имеет четыре ближайших соседа. Концентрация частиц первого сорта (“жертв”) на фрагменте определяется отношением числа занятых узлов  $n_1$  к общему числу узлов:  $\theta_1 = n_1/N$ . Аналогично определяются концентрации частиц второго сорта (“хищни-

ков”) и пустых мест:  $\theta_2 = n_2/N$ ,  $\theta_0 = n_0/N$ . Аналогично, вероятность существования пары частиц сортов  $i$  и  $j$  определяется как  $\theta_{ij} = n_{ij}/2N$ .

Система уравнений с парными вероятностями, учитывающая ограниченную скорость диффузии частиц [X] и [Y], имеет вид:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d\theta_1}{dt} = 4k_1\theta_{10} - 4k_2\theta_4, \\ \frac{d\theta_2}{dt} = 4k_2\theta_4 - k_3\theta_2, \\ \frac{d\theta_3}{dt} = 2k_1\theta_{10} + 6k_1\theta_{10}\frac{\theta_{10}}{\theta_0} - 6k_2\theta_4\frac{\theta_3}{\theta_1} + 6D_1\theta_{10}\left(\frac{\theta_{10}}{\theta_0} - \frac{\theta_3}{\theta_1}\right), \\ \frac{d\theta_4}{dt} = 3k_1\theta_{10}\frac{\theta_{20}}{\theta_0} - k_2\theta_4 + 3k_2\theta_4\frac{\theta_3 - \theta_4}{\theta_1} - k_3\theta_4 + 3D_1\theta_{10}\left(\frac{\theta_{20}}{\theta_0} - \frac{\theta_4}{\theta_1}\right) \\ \quad + 3D_2\theta_{20}\left(\frac{\theta_{10}}{\theta_0} - \frac{\theta_4}{\theta_1}\right), \\ \frac{d\theta_5}{dt} = 2k_2\theta_4 + 6k_2\theta_4\frac{\theta_4}{\theta_1} - 2k_3\theta_5 + 6D_2\theta_{20}\left(\frac{\theta_{20}}{\theta_0} - \frac{\theta_5}{\theta_2}\right). \end{array} \right. \quad (7)$$

Здесь  $\theta_3$  – вероятность существования пары (1-1);  $\theta_4$  – вероятность существования пары (1-2);  $\theta_5$  – вероятность существования пары (2-2). Через вероятности  $\theta_1, \theta_2, \theta_3, \theta_4, \theta_5$  выражаются другие парные вероятности:  $\theta_{10} = \theta_1 - \theta_3 - \theta_4$ , – вероятность существования пары (1-0);  $\theta_{20} = \theta_2 - \theta_5 - \theta_4$ , – вероятность существования пары (2-0);  $\theta_{00} = \theta_0 - \theta_{10} - \theta_{20}$ , – вероятность существования пары (0-0).

Можно показать, что если  $D_1, D_2 \rightarrow \infty$ , а скорости остальных реакций ограничены, то система уравнений (7) становится эквивалентной системе (4). При этом парные вероятности выражаются через одночастичные вероятности по явным формулам:  $\theta_{ij} = \theta_i\theta_j$ .

**1.4.4. Модель №3. Случай малоподвижные “хищники”, быстрые “жертвы”.** Если ограничена диффузия только одной компоненты реакции, а другую скорость диффузии можно считать бесконечно большой, то система из пяти уравнений упрощается, и мы получаем систему из трех уравнений.

Пусть  $D_1 \rightarrow \infty, D_2$  – ограничена, тогда система (7) приобретает вид:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d\theta_1}{dt} = 4k_1\theta_{10} - 4k_2\theta_{12}, \\ \frac{d\theta_2}{dt} = 4k_2\theta_{12} - k_3\theta_2, \\ \frac{d\theta_5}{dt} = 2k_2\theta_{12} + 6k_2\theta_{12}\theta_{12}/\theta_1 - 2k_3\theta_5 + 6D_2\theta_{20}\left(\left(\frac{\theta_{20}}{\theta_0}\right) - \left(\frac{\theta_5}{\theta_2}\right)\right). \end{array} \right. \quad (8)$$



Парные вероятности  $\theta_{10}, \theta_{20}, \theta_{12}$  выражаются через  $\theta_1, \theta_2, \theta_3 = \theta_{22}$ :

$$\begin{aligned}\theta_{10} &= \theta_1 \theta_0 (1 - 2\theta_2 + \theta_3) / (1 - \theta_2)^2; & \theta_{12} &= \theta_1 (\theta_2 - \theta_3) / (1 - \theta_2); \\ \theta_{20} &= \theta_0 (\theta_2 - \theta_3) / (1 - \theta_2).\end{aligned}\quad (9)$$

**1.4.5. Модель №4. Случай малоподвижные “жертвы”, быстрые “хищники”.** Если  $D_2 \rightarrow \infty, D_1$  – ограничена, тогда система (7) имеет вид:

$$\begin{cases} \frac{d\theta_1}{dt} = 4k_1 \theta_{10} - 4k_2 \theta_{12}, \\ \frac{d\theta_2}{dt} = 4k_2 \theta_{12} - k_3 \theta_2, \\ \frac{d\theta_3}{dt} = 2k_1 \theta_{10} + 6k_1 \theta_{10} \theta_{10}/\theta_0 - 6k_2 \theta_{12} \theta_3/\theta_1 + 6D_1 \theta_{10} (\theta_{10}/\theta_0 - \theta_3/\theta_1). \end{cases}\quad (10)$$

Парные вероятности  $\theta_{10}, \theta_{20}, \theta_{12}$  выражаются через  $\theta_1, \theta_2, \theta_3 = \theta_{11}$ :

$$\begin{aligned}\theta_{20} &= \theta_2 \theta_0 (1 - 2\theta_1 + \theta_3) / (1 - \theta_1)^2; & \theta_{12} &= \theta_2 (\theta_1 - \theta_3) / (1 - \theta_1); \\ \theta_{10} &= \theta_0 (\theta_1 - \theta_3) / (1 - \theta_1).\end{aligned}\quad (11)$$

Иерархическая система математических моделей №1-5 вместе с микроскопической моделью описывают динамику реакции в разных приближениях. Сравнительный анализ динамики точечных макроскопических и микроскопической моделей позволяет найти и объяснить разные режимы динамического поведения в имитационной модели.

## 2. ФАЗОВЫЕ И ПАРАМЕТРИЧЕСКИЕ ПОРТРЕТЫ ТОЧЕЧНЫХ МОДЕЛЕЙ

**2.1. Фазовый портрет модели №1 Лотки.** Модель реакции Лотки даёт классический пример нелинейных колебаний скорости реакции в консервативных системах. Фазовый портрет её хорошо изучен. Система имеет два стационарных состояния при всех допустимых положительных значениях параметров  $k_1, k_2, k_3$ . Одно стационарное состояние находится в начале координат  $p_1=(0,0)$  и имеет тип седла. Сепаратрисы седла направлены вдоль осей координат. Выходящая сепаратриса направлена вдоль оси ординат ( $\theta_1$ ) и описывает экспоненциальный рост “жертв” в отсутствие “хищников”. Входящая сепаратриса направлена вдоль оси ординат ( $\theta_2$ ) и описывает вымирание “хищников” в отсутствие “жертв”. Другая стационарная точка  $p_2=(k_3/(4k_2), k_1/k_2)$  имеет тип центра. Замкнутые траектории, окружающие эту точку, заполняют весь первый квадрант и описываются линиями уровня первого интеграла системы (6):

$$H(\theta_1, \theta_2) = e^{-4k_2(\theta_1 + \theta_2)} \theta_1^{k_3} \theta_2^{4k_1} \quad (12)$$

Однако, если стационарная точка находится внутри симплекса (5) и начальная точка тоже находится внутри области (5), то как видно из выражения (12), замкнутая траектория тоже не выходит из симплекса.

**2.2. Фазовый портрет модели № 2 поверхностной реакции.** Исследуем стационарные состояния модели № 2, уравнения (4). Модель имеет три стационарных состояния. Первая точка  $p_1=(0,0)$ , как и в модели Лотки, находится в начале координат и имеет тип седла. Второе стационарное состояние  $p_2 = \left( \frac{k_3}{4k_2}, \frac{k_1(1-k_3/4k_2)}{(k_1+k_2)} \right)$  находится внутри симплекса, если

$k_3 < 4k_2$ . Матрица линеаризации в этой точке имеет вид:

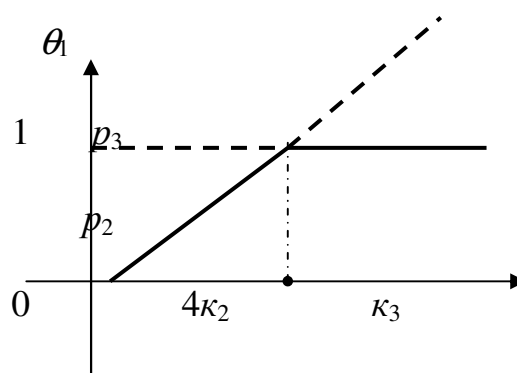
$$A(p_2) = \begin{pmatrix} -k_1k_3/k_2 & -(k_1+k_2)k_3/k_2 \\ k_1(4k_2-k_3)/(k_1+k_2) & 0 \end{pmatrix}.$$

Её след и определитель равны соответственно:

$$S(p_2) = -k_1k_3/k_2 < 0, \quad \Delta(p_2) = k_1k_3(4k_2-k_3)/k_2. \quad (13)$$

Из выражений (13) следует, что точка  $p_2$  устойчива при  $k_3 < 4k_2$  ( $\Delta > 0$ ), то есть когда она находится внутри симплекса. Причем, при  $k_1 < 4k_2(4k_2-k_3)/k_3$  она имеет тип устойчивого фокуса, а в противном случае – тип устойчивого узла. Третья стационарная точка  $p_3=(1,0)$  находится на границе симплекса. След и определитель матрицы линеаризации равны соответственно:

$$S(p_3) = -4k_1 + 4k_2 - k_3, \quad \Delta(p_3) = -4k_1(4k_2 - k_3). \quad (14)$$



**Рис. 1.** Зависимость концентрации  $\theta_1$  на стационарах  $p_3$  и  $p_2$  от параметра  $k_3$ .

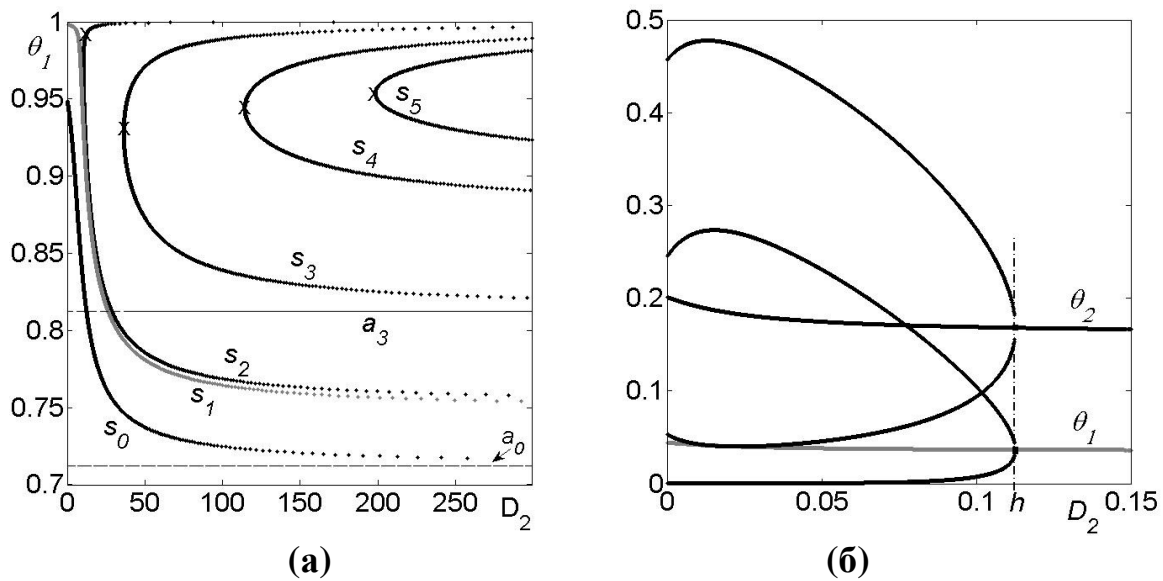
Из выражений (14) следует, что точка  $p_3$  является устойчивым узлом при  $k_3 > 4k_2$  ( $\Delta > 0$ ) и седлом в противном случае.

Таким образом, соотношение между параметрами  $k_3 = 4k_2$  является бифуркационным. Это бифуркация типа “обмен устойчивостью”, здесь вторая и третья точка сливаются и обмениваются устойчивостью. Бифуркационная диаграмма изображена на рис. 1.

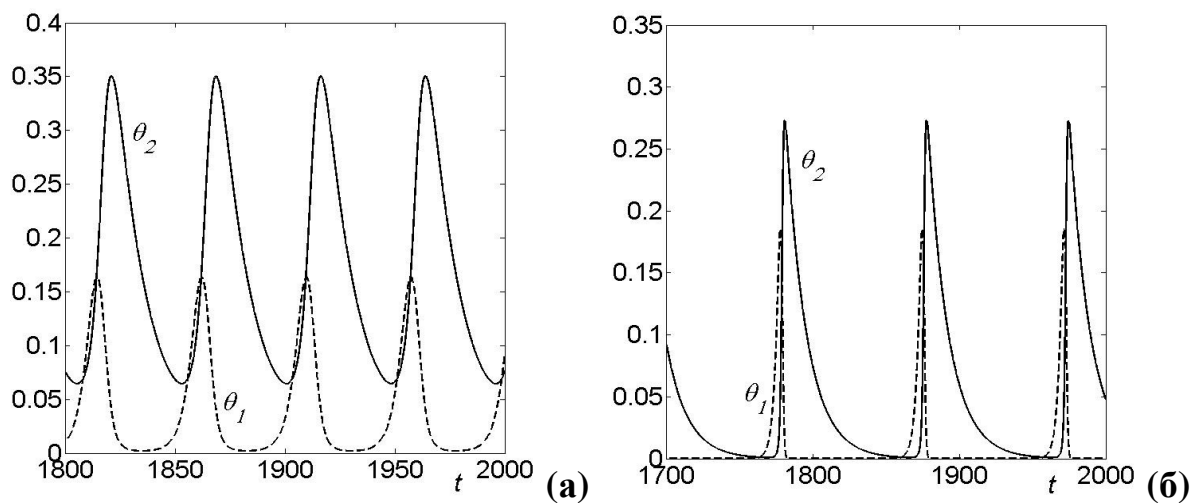
Модель №2 не имеет периодических решений ни при каких допустимых значениях параметров. В работе [7] доказано, что устойчивый в малом стационар  $p_2$  является и глобально устойчивым, то есть других аттракторов система не имеет. В дальнейшем будем рассматривать только случай  $k_3 < 4k_2$ .

**2.3. Параметрический анализ моделей с парными вероятностями.** Исследуем теперь трехкомпонентные модели с парными вероятностями и ограниченной скоростью диффузии только одной компоненты. Эти модели при  $k_3 < 4k_2$  в большей части пространства своих параметров  $k_1, k_2, k_3, D_2$  (или  $k_1, k_2, k_3, D_1$ ) имеют три стационарных состояния, два из которых находятся на границе симплекса:  $p_1=(0,0,0)$  и  $p_3=(1,0,0)$ , а одно – внутри него  $p_2$ . Стационарное состояние  $p_1$ , находящееся в начале координат как и в системах №1 и №2, имеет тип седла при всех значениях параметров. Стационарное состояние  $p_3$  на большей части интервала  $0 < k_3 < 4k_2$  является неустойчивым узлом, как и в модели №2. Понятно, что при больших значениях коэффициента диффузии  $D_2$  (или  $D_1$ ) модель №3 (или №4) должна описывать ту же динамику, что и модель №2. Рассмотрим зависимость фазового портрета этих систем от коэффициента диффузии.

**2.3.1. Параметрические портреты модели №3.** Сначала исследуем модель №3, которая учитывает ограниченную скорость диффузии второй компоненты  $D_2$  “хищников”, а скорость диффузии “жертв” считается неограниченной. В большей части пространства параметров стационарное состояние  $p_2$  является или устойчивым фокусом, или устойчивым узлом, как и в системе №2. Существенные отличия в динамическом поведении модель №3 демонстрирует при малой скорости диффузии  $D_2$ . Фазовый портрет этой системы также отличается от портрета модели №2 при  $k_3$  близких к  $k_2$ . На рис.3а показана зависимость концентрации  $\theta_1$  на стационаре  $p_2$  от коэффициента  $D_2$  для разных значений  $k_3$ . При значениях  $k_3$  больше некоторого критического  $k_3^*$  стационар  $p_2$  устойчив при всех коэффициентах диффузии  $D_2$  (линии  $s_0$  и  $s_1$ ) и асимптотически приближается к стационару  $p_2$  модели №2 (прямая  $a_0$ ) при  $D_2 \rightarrow \infty$ ; при этом стационар  $p_3$  является неустойчивым узлом. Однако при некотором критическом  $k_3^{**}$ , близком к  $4k_2$ , происходит транскритическая бифуркация, в результате которой стационар  $p_3$  становится устойчивым узлом при всех положительных значениях  $D_2$ , а стационар  $p_2$  начинает существовать только при больших коэффициентах  $D_2$ , начиная с некоторого. При этом появляется еще одна ветвь стационарных состояний  $p_2'$  типа седла (верхняя часть кривых  $s_0 - s_5$ ), которая существует при больших коэффициентах диффузии и сливается с ветвью  $p_2$  при уменьшении диффузии в точке седло-узловой бифуркации.



**Рис. 2.** Зависимость стационарного состояния  $p_2$  от коэффициента диффузии  $D_2$ . **а)**  $k_1 = 0.1, k_2 = 2$  линии  $s_1 - s_5$  отвечают значению параметра  $k_3 = 5.99, 6.02, 6.5, 7, 7.2$ , соответственно.  $\times$  – точка седло-узловой бифуркации. **б)**  $k_1 = 0.1, k_2 = 0.5, k_3 = 0.07$ .  $h$  – точка бифуркации Андронова-Хопфа. Черной линией обозначены минимумы и максимумы в колебаниях.

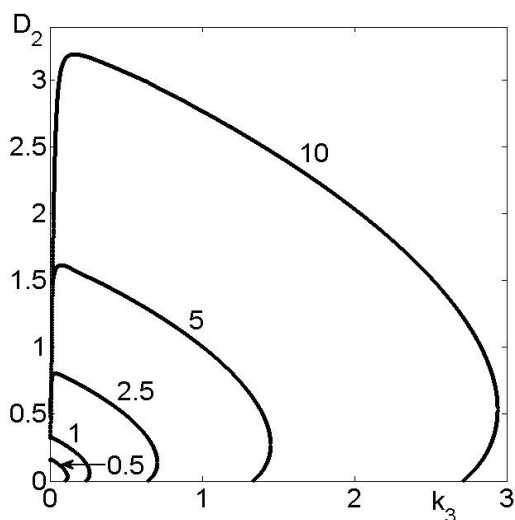


**Рис. 3.** Вид автоколебаний концентраций в модели №3. **а)**  $k_1 = 0.1, k_2 = 0.5, k_3 = 0.07, D_2 = 0.08$ ; **б)**  $k_1 = 0.1, k_2 = 2, k_3 = 0.07, D_2 = 0.5$ .

При  $k_3 < k_3^*$  и небольших значениях  $D_2$  стационар  $p_2$  теряет устойчивость в результате сверхкритической бифуркации Андронова-Хопфа. В системе возникают устойчивые колебания (см. рис. 2б). Вид колебаний для двух наборов параметров представлен на рис. 3. Мы видим, что мак-

симумы концентраций сдвинуты примерно на четверть периода, как и в модели №1.

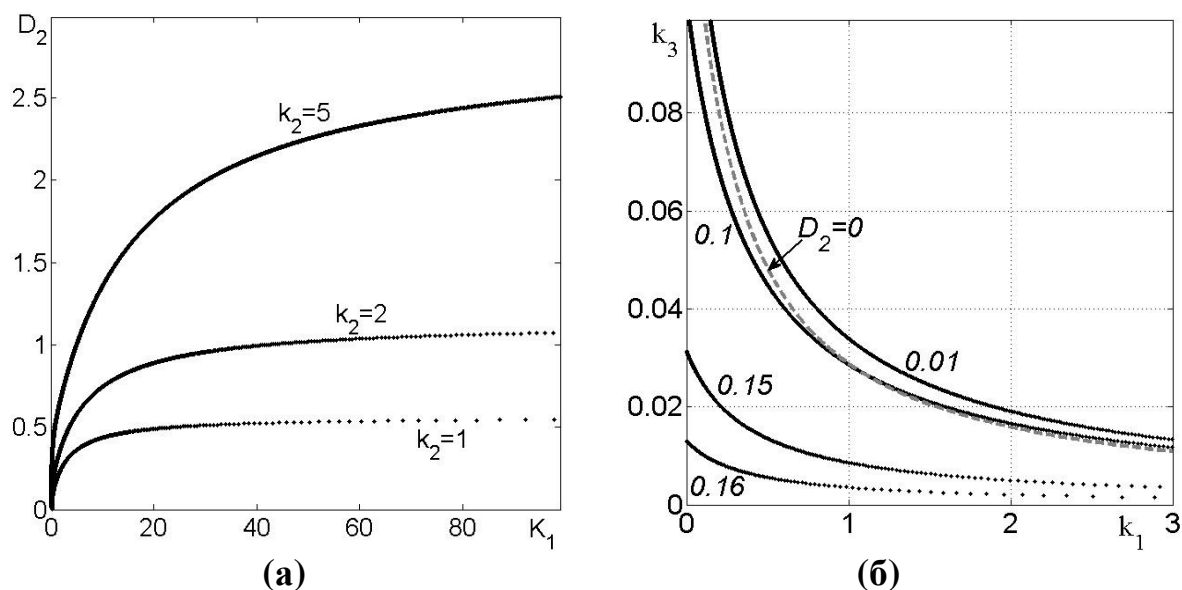
**Двухпараметрический анализ модели №3.** Найдем области автоколебаний на плоскостях двух параметров. В данной модели границей области автоколебаний является линия бифуркации Андронова-Хопфа, которая описывается линией нейтральности. Линию нейтральности построим по аналитическим формулам. В данном случае на стационаре удастся выразить переменные  $\theta_1, \theta_5$  и все параметры через переменную  $\theta_2$ , а также получить явные выражения, описывающие зависимость элементов матрицы Якоби от переменной  $\theta_2$ . Далее, изменяя с некоторым шагом значение  $\theta_2$  на интервале  $(0,1)$ , последовательно вычисляем по формулам значения параметра (параметров), элементов матрицы Якоби и двух других переменных на стационаре  $p_2$  от этой переменной.



**Рис. 4.** Параметрический портрет модели №3 на плоскости параметров  $(k_3, D_2)$ . Линии нейтральности для значений параметра  $k_2 = 0.5, 1, 2.5, 5, 10$ ;  $k_1 = 0.1$ . Область автоколебаний находится слева от линии нейтральности.

**Плоскость  $(k_3, D_2)$  при разных значениях  $k_2$ .** Зафиксируем значения  $k_1, k_2$  и построим линию нейтральности на плоскости параметров  $(k_3, D_2)$ . Результаты расчетов для нескольких значений  $k_2$  представлены на рис. 4. Область колебаний находится слева от линии нейтральности, то есть автоколебания имеют место при небольших значениях параметров  $D_2$  и  $k_3$ . Мы видим, что при увеличении коэффициента  $k_2$  область автоколебаний расширяется. При уменьшении параметра  $k_2$  область автоколебаний уменьшается и исчезает при некотором  $k_2 = k_2^*$ . Для  $k_1 = 0.1, k_2^* \approx 0.23$ .

**Плоскость  $(k_1, D_2)$  при разных значениях  $k_2$ .** На рис. 5 представлен параметрический портрет модели на плоскости  $(k_1, D_2)$ . Мы видим, что колебания возникают при небольших коэффициентах диффузии. При увеличении параметра  $k_2$  область колебаний расширяется. По параметру  $k_1$  область автоколебаний неограниченна.



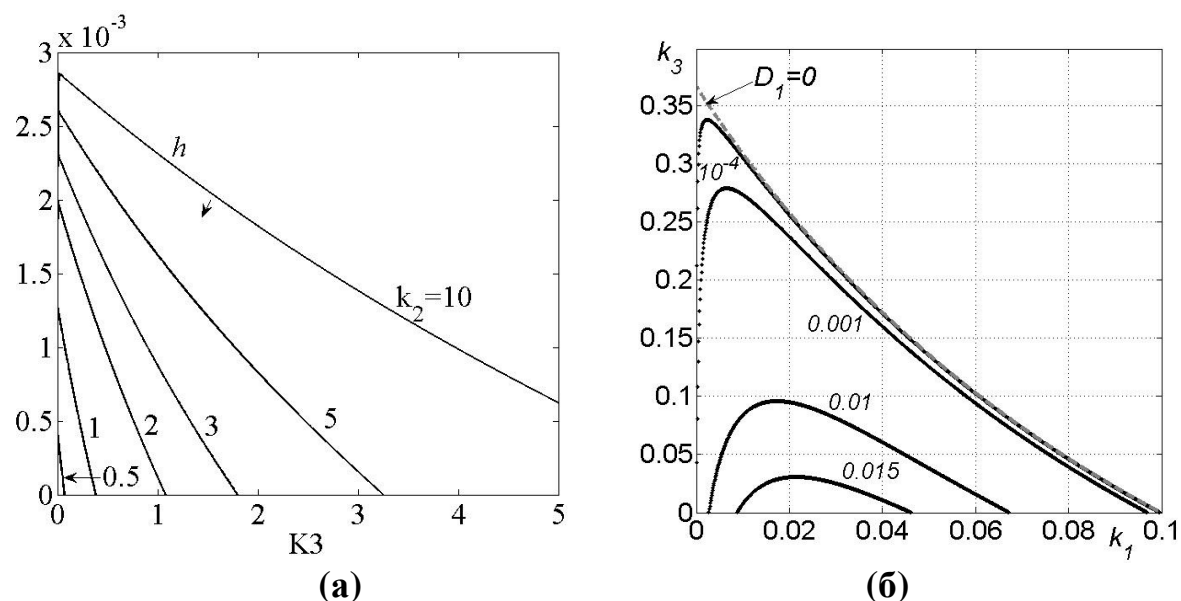
**Рис. 5.** Параметрические портреты модели №3 на плоскости параметров: **а)**  $(k_1, D_2)$ , при  $k_3 = 0.07$  и разных значениях параметра  $k_2 = 1, 2, 5$ ; **б)**  $(k_1, k_3)$ , при  $k_2 = 0.5$  и разных значениях коэффициента  $D_2$ . Область автоколебаний находится ниже линии нейтральности.

**Плоскость  $(k_1, k_3)$  при разных значениях  $D_2$ .** На этой плоскости параметров область автоколебаний также существует при небольших коэффициентах диффузии  $D_2$ . Мы видим, что при увеличении коэффициента  $D_2$ , область автоколебаний уменьшается, особенно по параметру  $k_3$ , и исчезает при  $D_2$  больше некоторого критического значения.

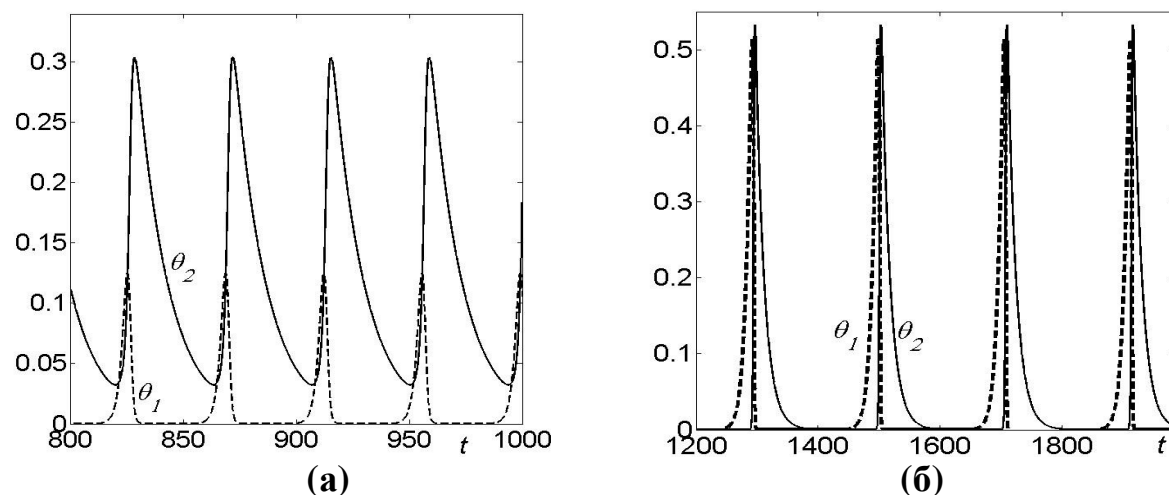
**2.3.2. Параметрические портреты модели №4.** Аналогичная ситуация имеет место и для модели № 4. Устойчивый при большой скорости диффузии  $D_1$  стационар  $p_2$  теряет устойчивость при уменьшении коэффициента  $D_1$ , и в результате бифуркации Андронова-Хопфа в системе возникают автоколебания. На рис. 7 представлены две плоскости параметров: а) плоскость  $(k_3, D_1)$  и б) плоскость  $(k_1, k_3)$ . Область автоколебаний расположена под линией нейтральности. Мы видим, что самая широкая область колебаний существует при  $D_1 = 0$ . При увеличении коэффициента  $D_1$  область колебаний сужается, и при некотором критическом значении она исчезает.

Расчеты также показали, что размер области автоколебаний сильно зависит от параметра  $k_2$ . Из рис. 6а видно, что при увеличении коэффициента  $k_2$  область автоколебаний по параметру  $k_3$  сильно расширяется; при больших значениях  $k_2$  линия нейтральности приближается к горизонтальной линии  $D_1 \approx 0.00315$  ( $k_1 = 0.07$ ) и выше нее не поднимается. При уменьшении параметра  $k_2$  область автоколебаний сужается и исчезает при некотором критическом значении  $k_2$  близком к 0.4. На рис. 7 показан

вид автоколебаний концентраций для двух наборов параметров. Механизм колебаний аналогичен механизму колебаний в стандартной модели Лотки.



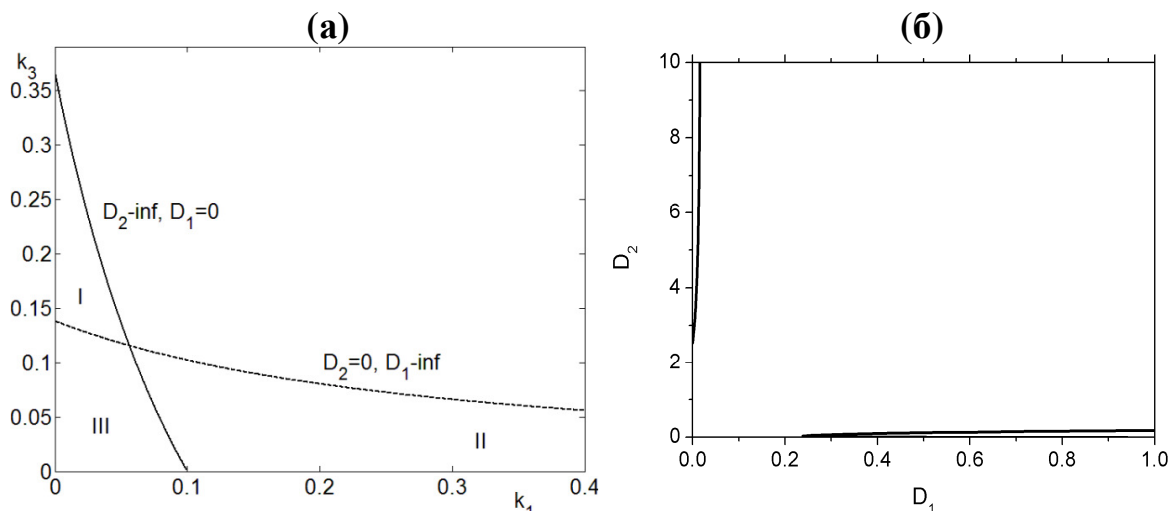
**Рис. 6.** Параметрические портреты модели №4 на плоскости параметров: **а)**  $(k_3, D_1)$  при  $k_1 = 0.07$  и различных значениях параметра  $k_2$ ; **б)**  $(k_1, k_3)$  при  $k_2 = 0.5$  и различных значениях коэффициента  $D_1$ .



**Рис. 7.** Вид автоколебаний поверхностных концентраций в модели №4. **а)**  $k_1 = 0.3, k_2 = 2, k_3 = 0.07, D_1 = 0.01$ ; **б)**  $k_1 = k_3 = 0.07, k_2 = 1, D_1 = 0$ .

Рис. 8а позволяет сравнить области автоколебаний для моделей №3 и №4 при нулевой скорости диффузии. Примечательно, что существует область значений параметров (область III), где обе модели демонстрируют автоколебания. При этом скорость диффузии одной компоненты реакции бесконечна, а скорость диффузии другой компоненты равна нулю. На-

помним, что при быстрой диффузии сразу обеих компонент (модель №2) автоколебания не возникают.



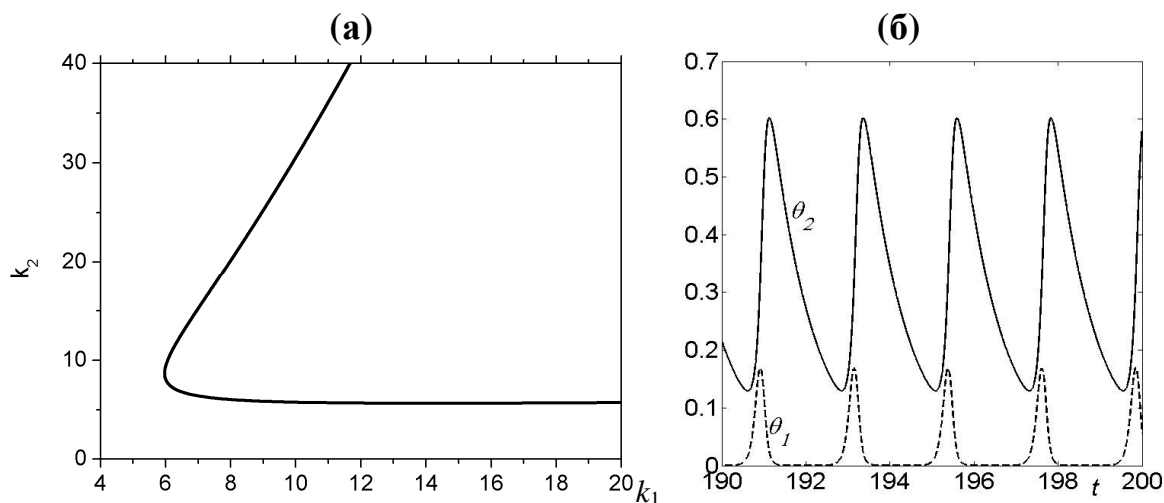
**Рис.8.** (а) Параметрический портрет моделей №3 (пунктир) и №4 (линия) на плоскости параметров  $(k_1, k_3)$  при  $k_2 = 0.5$ ; (б) Параметрический портрет модели №5 на плоскости параметров  $(D_1, D_2)$  при  $k_1 = 0.1, k_2 = 1, k_3 = 0.07$ ; области автоколебаний прижаты к осям и ограничены линией нейтральности.

**2.3.3. Параметрический портрет модели с парными вероятностями №5 на плоскости параметров  $(D_1, D_2)$ .** Рассмотрим теперь полную модель с парными вероятностями, в которой оба коэффициента диффузии считаются ограниченными. Мы подробно исследовали влияние коэффициентов диффузии на автоколебания. Результаты двухпараметрического анализа отражены на рис. 8б. Видим, что для выбранного набора коэффициентов  $k_1, k_2, k_3$  область автоколебаний состоит из двух непересекающихся подобластей, прижатых к осям координат, и точка  $(0,0)$  не принадлежит области колебаний. То есть большая часть области колебаний лежит в плоскости, где один из коэффициентов диффузии намного больше другого. На рис. 9а представлен параметрический портрет на плоскости  $(k_1, k_2)$ , когда обе компоненты неподвижны. При определенном соотношении между этими коэффициентами в системе возникают колебания.

На рис. 9б представлен вид автоколебаний. Механизм колебаний заключается в следующем. Когда много свободных мест на поверхности, тогда скорость адсорбции “жертв” высока и поверхность заполняется первой компонентой. При этом увеличивается число смешанных пар, а значит, растет скорость реакции, приводящая к увеличению  $\theta_2$  и уменьшению  $\theta_1$ . Поверхность преимущественно покрывается второй компонентой. В отсутствии смешанных пар, вторая компонента десорбирует и ис-



чезает с поверхности, растет число свободных мест и скорость адсорбции первой компоненты, – цикл замыкается.



**Рис. 9. а)** Параметрический портрет модели №5 на плоскости параметров  $(k_1, k_2)$ , при  $k_3 = 1, D_1 = D_2 = 0$ . Область автоколебаний находится внутри угла, между двумя ветвями линии нейтральности. **б)** Вид автоколебаний при  $k_1 = 10, k_2 = 15$ .

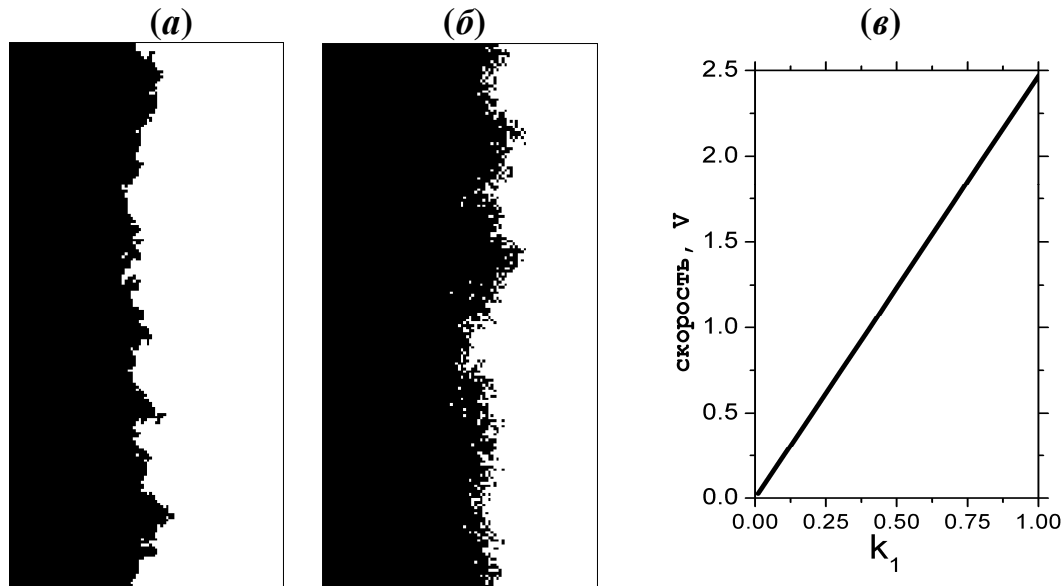
### 3. ДИНАМИКА МИКРОСКОПИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ

Исследование динамики имитационной модели начнем с изучения устойчивости стационарных состояний.

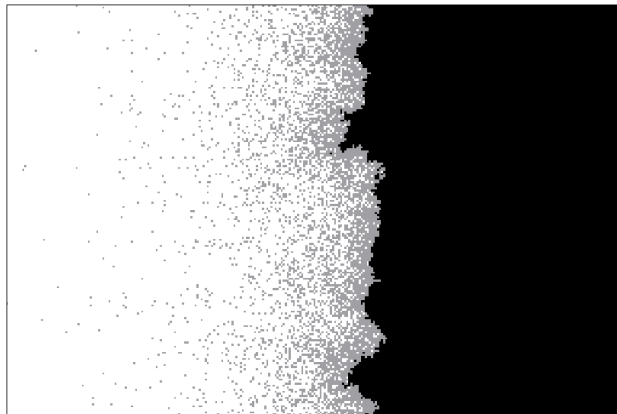
**3.1 Стационарное состояние  $p_1=(0,0)$ , распространение фронта “жертв”.** Состояние  $p_1=(0,0)$ , которое в макроскопических моделях является седлом, в имитационной модели также соответствует седлу. Оно неустойчиво и приводит к заполнению поверхности “жертвами”, если отсутствуют “хищники”. Поскольку адсорбция первой компоненты осуществляется только на свободное место, находящееся рядом с занятым первой компонентой местом, то при низких скоростях диффузии адсорбция имеет вид волны переключения, или фронта. Чем меньше скорость диффузии, тем меньше размытие линии фронта, происходящее за счет естественных флуктуаций.

Исследуем движение фронта при нулевой скорости диффузии, которое можно трактовать как размножение частиц первого сорта и разрастание сообщества. Возьмем фрагмент решетки в виде прямоугольника, у которого длина много больше ширины  $N_1 \gg N_2$ , и зададим начальные данные в виде прямоугольной полоски, расположенной у левой границы. Результаты расчетов представлены на рис. 10а. Мы видим, что со временем идеально плоский фронт за счет флуктуаций размывается и появляется переходная область, состоящая из свободных и занятых мест (рис. 11а), однако фронт можно считать плоским. Расчеты показали, что задание на-

чальных данных с границей фронта в виде клина, или любой другой сложной линией границы, со временем выпрямляется и стремится к плоской форме. На рис. 10б представлены результаты расчётов при существенной скорости диффузии. По сравнению со случаем, показанным на рис. 10а, скорость фронта значительно увеличивается, и его передняя граница становится более размытой.



**Рис. 10.** Распространение плоского фронта “жертв” по нулевому фону при а)  $k_1 = 1, D_1 = 0$ , при этом  $V \approx 2.47$  [узлов/сек]; б)  $k_1 = 1, D_1 = 4$ , при этом  $V \approx 5.04$  [узлов/сек]. Показаны фрагменты  $200 \times 100$  решетки. Узлы, занятые “жертвами”, отмечены чёрным цветом; в) зависимость скорости фронта от коэффициента  $k_1$  при  $D_1 = 0$ .



**Рис. 11.** Распространение фронта “хищников” (серые точки) по фону, состоящему из “жертв” (чёрные точки), при  $k_1 = 1, k_2 = 1, k_3 = 0.1, D_1 = D_2 = 0$ . Показан фрагмент  $200 \times 300$  решетки. Волна движется слева направо.

Если бы плоский фронт был идеально ровным, то при отсутствии диффузии его скорость  $V$  равнялась бы  $k_1$  [узлов/сек]. На одномерной решетке скорость фронта действительно равна  $k_1$ . Расчёты показали, что скорость плоского фронта на двумерной решетке выше примерно в 2.5 раза (рис. 10в). Увеличение скорости фронта объясняется тем, что передние частицы имеют в среднем не одно пустое соседнее место, как при

идеально ровном фронте. При этом и число передних частиц больше, чем  $N_2$ . То есть, размножаться может большее число частиц и с большей вероятностью по отношению к ровному фронту, поэтому и скорость распространения выше. В общем случае скорость движения фронта зависит от его кривизны и ширины размытия.

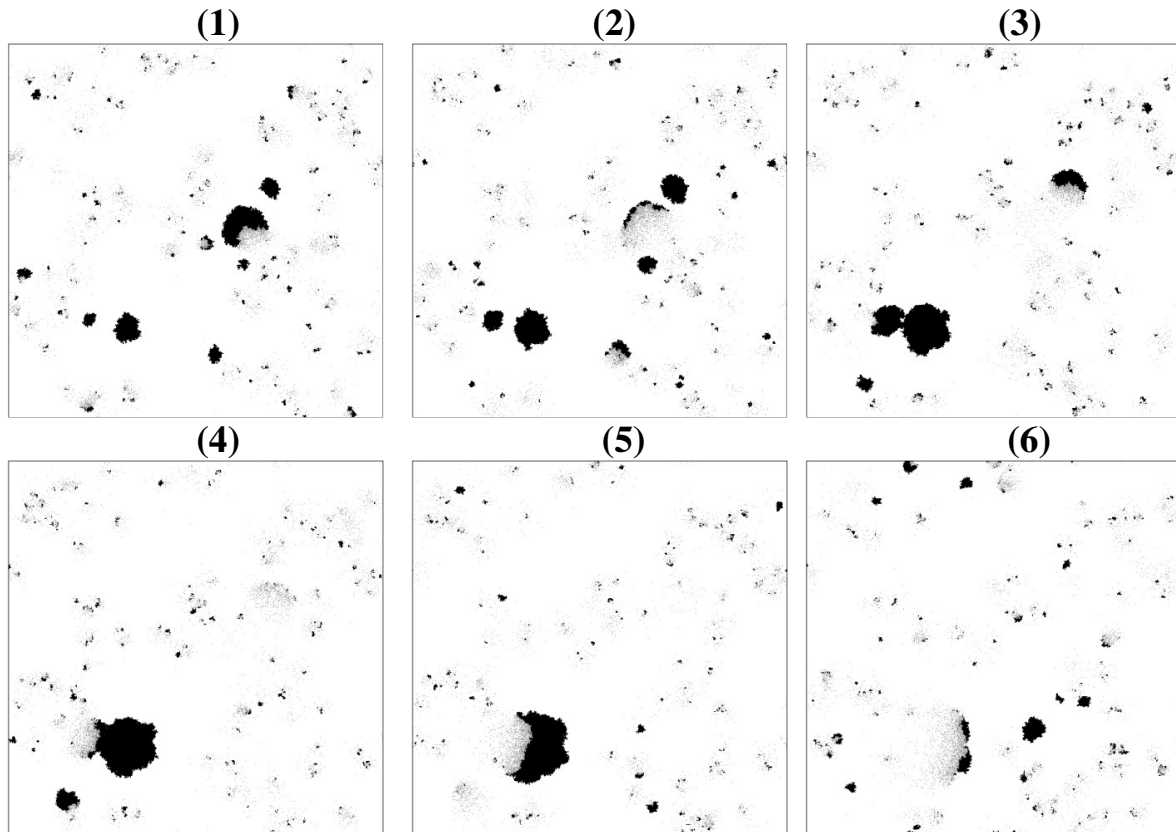
**3.2 Стационарное состояние  $p_3=(1,0)$ ; распространение фронта “хищников”.** Состояние  $p_3=(1,0)$ , которое в макроскопических моделях является неустойчивым узлом на большей части интервала  $0 < k_3 < 4k_2$ , в имитационной модели также является неустойчивым узлом. Внесение возмущения в виде небольшого островка “хищников” на поверхности, покрытой “жертвами”, вызывает волну распространения “хищников”. На линии фронта, где “хищники” соприкасаются с “жертвами”, происходит интенсивное поедание “жертв”, и фронт движется. “Хищники”, которые не соприкасаются с “жертвами”, со временем вымирают, поэтому в отличие от волны распространения “жертв”, волна распространения “хищников” имеет задний фронт (см. рис. 11). На вытянутом прямоугольном фрагменте эта волна имеет вид волны переключения из состояния  $p_3 = (1,0)$  в состояние  $p_1=(0,0)$  через промежуточное состояние, в котором присутствуют “хищники”. Скорость движения переднего фронта определяется не только параметром  $k_2$ , но и параметрами  $k_1$  и  $k_3$ , поскольку переходная область фронта состоит из пустых и заполненных разными частицами мест. Ширина заднего фронта (спада) определяется параметром смертности  $k_3$  и скоростью движения переднего фронта, то есть зависит от всех параметров модели.

Рассмотренные фронты “хищников” и “жертв” обуславливают разно-образные явления пространственно-временной организации в МК модели. В работах [3-7] приведены некоторые примеры таких явлений, которые наблюдаются при ограниченной скорости диффузии и характеризуются наличием нерегулярных локальных колебаний концентраций.

Пример сложных локальных колебаний показан на рис. 12. Здесь, в разных частях поверхности иногда возникают и растут островки “жертв”, которые время от времени быстро “поедаются хищникам”. В основе этих процессов лежат два, рассмотренных выше, типа решений в виде фронтов.

Очевидно, что сложные локальные колебания при ограниченной скорости диффузии не могут вызвать колебания на макроскопических масштабах, поскольку в этом случае отсутствует механизм их синхронизации. Ниже мы рассмотрим случай, когда одна из частиц имеет большую скорость диффузии, а скорость другой ограничена. Если скорость диффузии хотя бы одного типа частиц велика, то появляется необходимый (но не достаточный) механизм синхронизации локальных

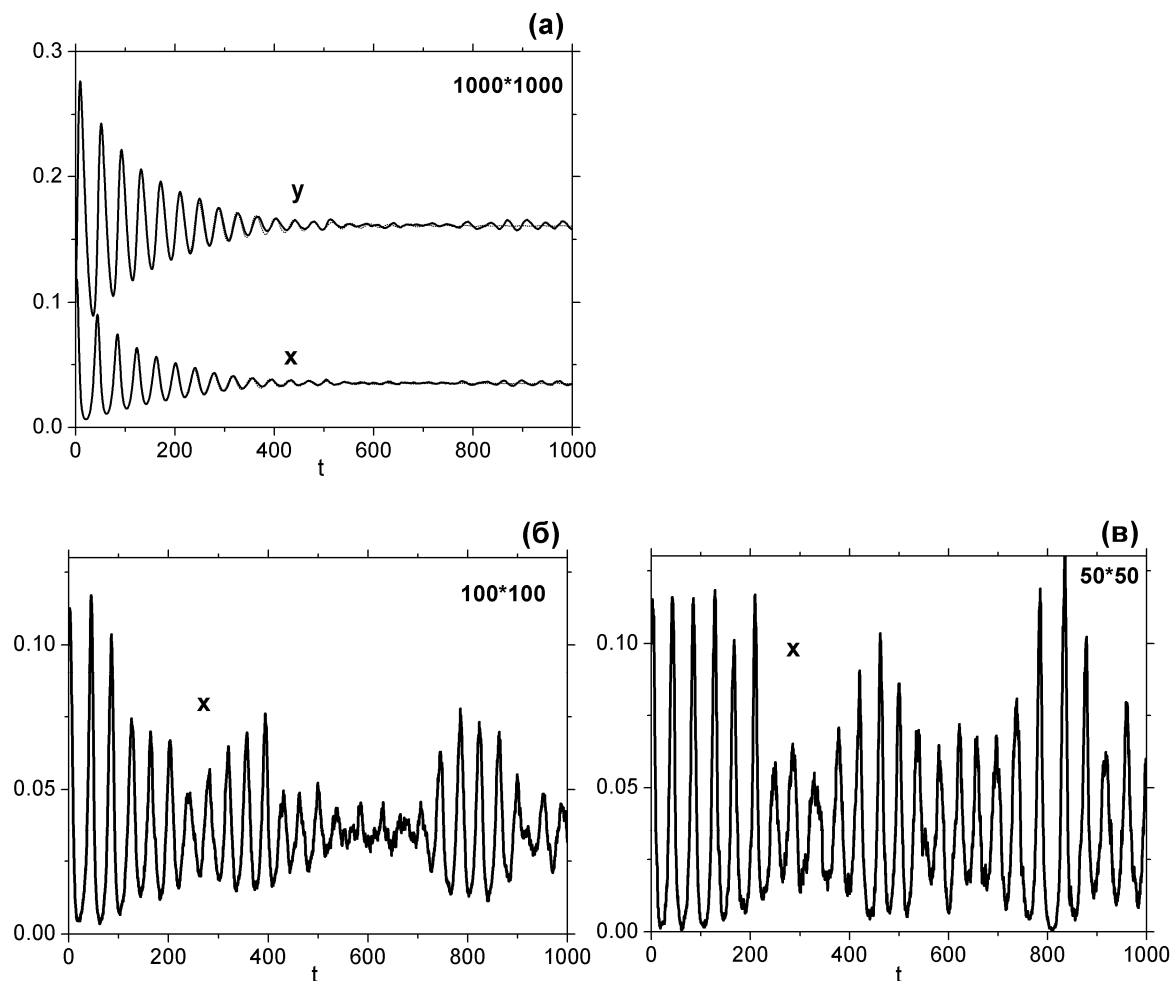
колебаний. Такой вариант микроскопической модели ранее не рассматривался.



**Рис. 12.** Снимки состояния решётки  $600 \times 600$  при расчёте по методу МК. Параметры:  $k_1 = 0.1$ ;  $k_2 = 0.5$ ;  $k_3 = 0.07$ ,  $D_1 = 0$ ,  $D_2 = 2$ . Моменты времени [сек]: (1) – 293; (2) – 323; (3) – 363; (4) – 394; (5) – 434; (6) – 495. “Хищники” показаны серыми точками, “жертвы” – чёрными точками, пустые узлы не отмечены.

**3.3 Условия устойчивости стационарного состояния  $p_2$ .** Исследуем устойчивость стационарного состояния  $p_2$ , лежащего внутри симплекса. Прежде всего, покажем, что при больших коэффициентах диффузии и на больших фрагментах решетки оно устойчиво и соответствует решению модели №2. Действительно, на рис. 13а показаны затухающие колебания в микроскопической модели, сходящиеся к стационарному состоянию  $p_2$  (устойчивый фокус) на большом фрагменте. Пунктирной линией приведены результаты интегрирования модели №2 для тех же параметров и начальных условий. Мы видим, что решения системы ОДУ почти совпадают с результатами расчётов по методу МК. При уменьшении фрагмента увеличивается уровень флуктуаций, и они начинают сильно влиять на динамику микроскопической модели. Для того же набора параметров микроскопическая модель демонстрирует нерегулярные незатухающие колеба-

ния (рис. 13 б, в). Чем меньше фрагмент, тем в среднем больше амплитуда колебаний.

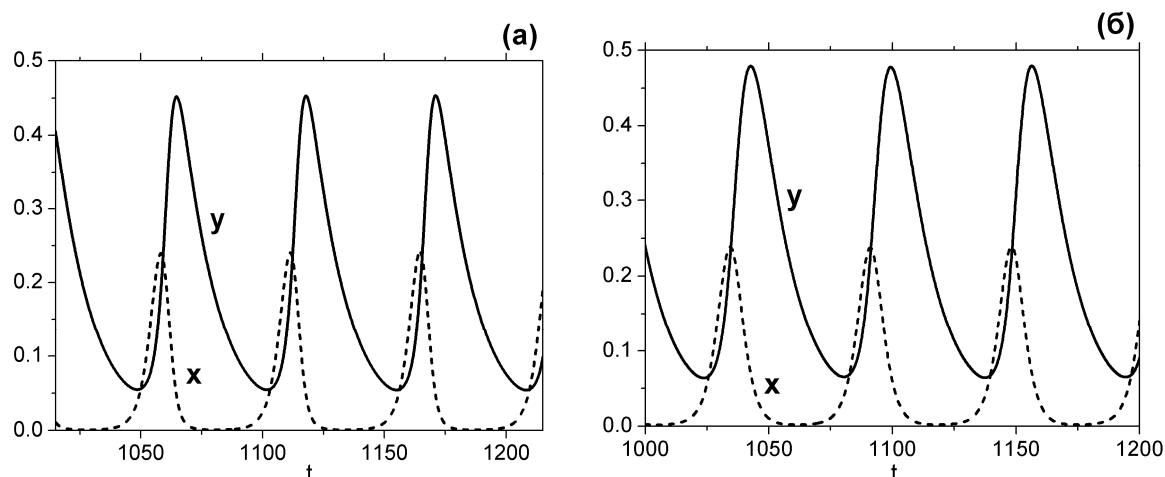


**Рис. 13.** Расчёт по методу МК на решётках различных размеров. Параметры:  $k_1 = 0.1$ ;  $k_2 = 0.5$ ;  $k_3 = 0.07$ ;  $D_1 = D_2 = 1000$ . Начальные условия: случайное распределение частиц при  $\theta_1(0) = \theta_2(0) = 0.1$ . а) Решётка  $1000 \times 1000$ . Показаны обе концентрации. б) Решётка  $100 \times 100$ . Показана только концентрация “жертв”. в) Решётка  $50 \times 50$ .

Хорошо известно, что наличие флуктуаций, как внешних, так и внутренних, является характерной чертой всех биологических систем. Появление незатухающих и нерегулярных колебаний в стохастических моделях типа “хищник-жертва” с ограниченным числом частиц было подробно исследовано. Хорошее объяснение этому эффекту было дано в работе [12]. Для микроскопической модели с бесконечно быстрой диффузией авторы получили и исследовали стохастическое уравнение Ланжевена и показали, что возникает эффект резонанса, если число “жертв” и “хищников” ограничено. Детерминистическая часть соответствующего дифференциального уравнения Ланжевена не предсказывает возникновения предельного цикла и появления незатухающих колебаний. В детерминистической модели колебания затухают, и система стремится к устойчиво-

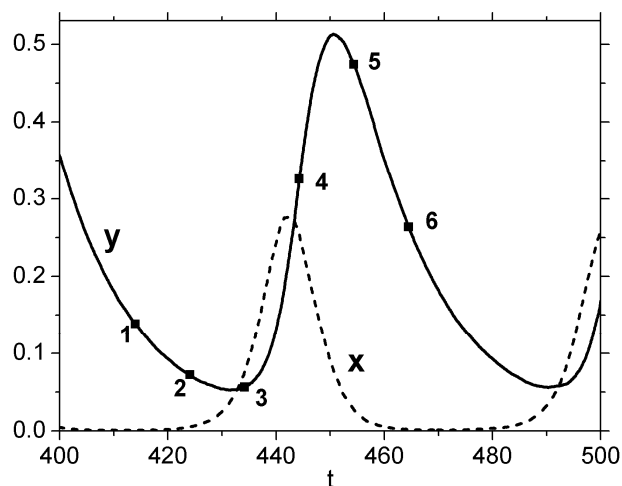
му стационарному состоянию типа фокус. Наличие стохастического слагаемого в уравнении Ланжевена, которое обнуляется лишь при бесконечно большом числе “жертв” и “хищников”, приводит к незатухающим колебаниям. Для нашей модели, появление незатухающих нерегулярных колебаний при ограниченном числе частиц рассматривалось в работе [5].

**3.4. Незатухающие колебания при быстрой диффузии “жертв” и неподвижных “хищниках”.** Мы видели, что при ограниченной диффузии “жертв” или “хищников” макроскопические модели с парными вероятностями демонстрируют автоколебания. Возможно, они описывают колебания, наблюдаемые и в микроскопической модели для соответствующего набора параметров и достаточно больших размерах решетки. Рассмотрим колебания в имитационной модели, возникающие в случае быстрой диффузии “жертв” и неподвижных “хищниках”. На рис. 14а,б показан вид колебаний в имитационной модели и модели №3 для одного и того же набора параметров. Мы видим, что форма колебаний и их период очень близки. Быстрая диффузия “жертв” обеспечивает хорошее перемешивание и синхронизацию колебаний на больших фрагментах. Можно предположить, что автоколебания могут наблюдаться и на макроскопических масштабах (на бесконечной решётке) если  $D_1 \rightarrow \infty$ , несмотря на отсутствие диффузии “хищников”. Отметим, что увеличение диффузии “хищников” приводит к затуханию колебаний, как показано на рис. 13а.



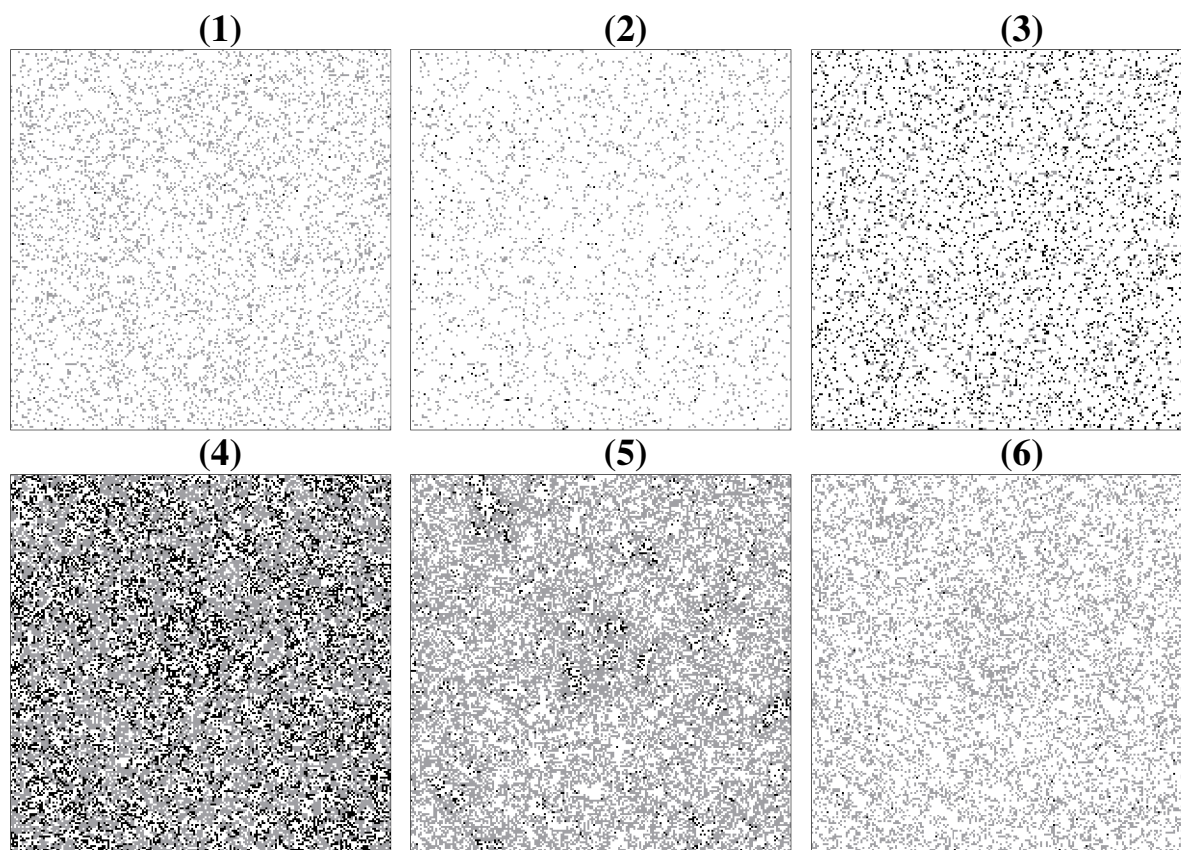
**Рис. 14.** Сравнение результатов расчётов по детерминистической и стохастической моделям. **а)** Расчёты по методу МК на решётке  $1000 \times 1000$ . **б)** Автоколебания в модели №3. Параметры:  $k_1 = 0.1$ ;  $k_2 = 0.5$ ;  $k_3 = 0.07$ ;  $D_1 = 1000$ ,  $D_2 = 0$ . Показаны концентрации “хищников” (линия) и “жертв” (пунктир).

На рис. 15 показан вид колебаний в модели МК на меньшем фрагменте. В этом случае также наблюдаются колебания близкие к макроскопическим в модели №3.



**Рис. 15.** Расчёты по методу МК на решётке  $200 \times 200$ . Параметры:  $k_1 = 0.1$ ;  $k_2 = 0.5$ ;  $k_3 = 0.07$ ;  $D_1 = 1000$ ,  $D_2 = 0$ . Показаны концентрации “хищников” (линия) и “жертв” (пунктир). Метки в виде квадратов с цифрами указывают на те моменты времени, для которых на Рис. 16 представлены снимки состояния решётки.

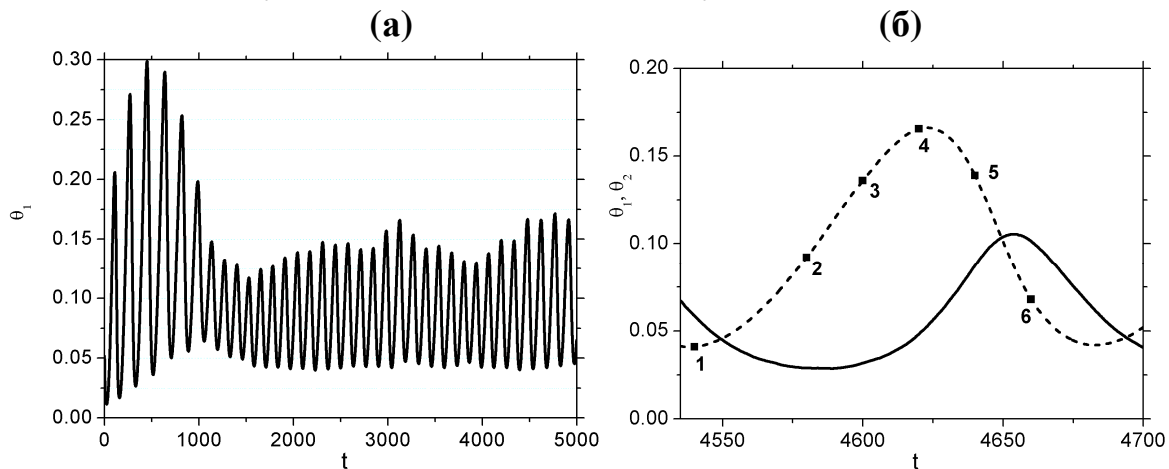
На рис. 16 показаны мгновенные снимки состояния фрагмента в разные моменты времени в течение одного периода колебаний. Можно увидеть, что колебания происходят в достаточно однородной среде. Это свойство и обуславливает тот факт, что результаты расчётов по макро и микромоделям практически совпадают.



**Рис. 16.** Снимки состояния решётки  $200 \times 200$  при расчёте по методу МК. Параметры:  $k_1 = 0.1$ ;  $k_2 = 0.5$ ;  $k_3 = 0.07$ ;  $D_1 = 1000$ ,  $D_2 = 0$ . Моменты времени указаны на Рис. 15. “Хищники” показаны серыми точками, “жертвы” – чёрными точками, пустые узлы не отмечены.

**3.5. Сложные колебания при быстрой диффузии “хищников” и неподвижных “жертвах”.** Рассмотрим колебания, возникающие в случае быстрой диффузии “хищников” и неподвижных “жертвах” (модель №4). Здесь ситуация отличается от рассмотренного выше случая. На рис. 17а, б показан вид колебаний в имитационной модели. Несмотря на достаточно большие размеры решётки, наблюдаются существенные колебания концентраций.

Если сравнить рис. 7б и 17б, которые получены при одинаковых значениях параметров, то становится очевидным, что модель №4 плохо описывает автоколебания, наблюдаемые при расчётах по методу МК. Это можно объяснить, если взглянуть на рис. 18, где показаны мгновенные снимки состояния решётки в процессе одного цикла колебаний. Мы видим, что заполнение решётки неоднородно, “жертвы” образуют островки. Причём эти островки меняют свои размеры в процессе колебаний. Если посмотреть на подробную последовательность снимков решётки (фильм), то можно назвать их “дышащими” островками, поскольку они регулярно увеличиваются, а затем уменьшаются в размерах. Островки представляют собой локальные осцилляторы. “Хищники” быстро диффундируют вокруг этих островков и обеспечивают их достаточно синхронное поведение. Однако этот механизм синхронизации не эффективен. Из-за флуктуаций наблюдаются случайные изменения амплитуды колебаний.



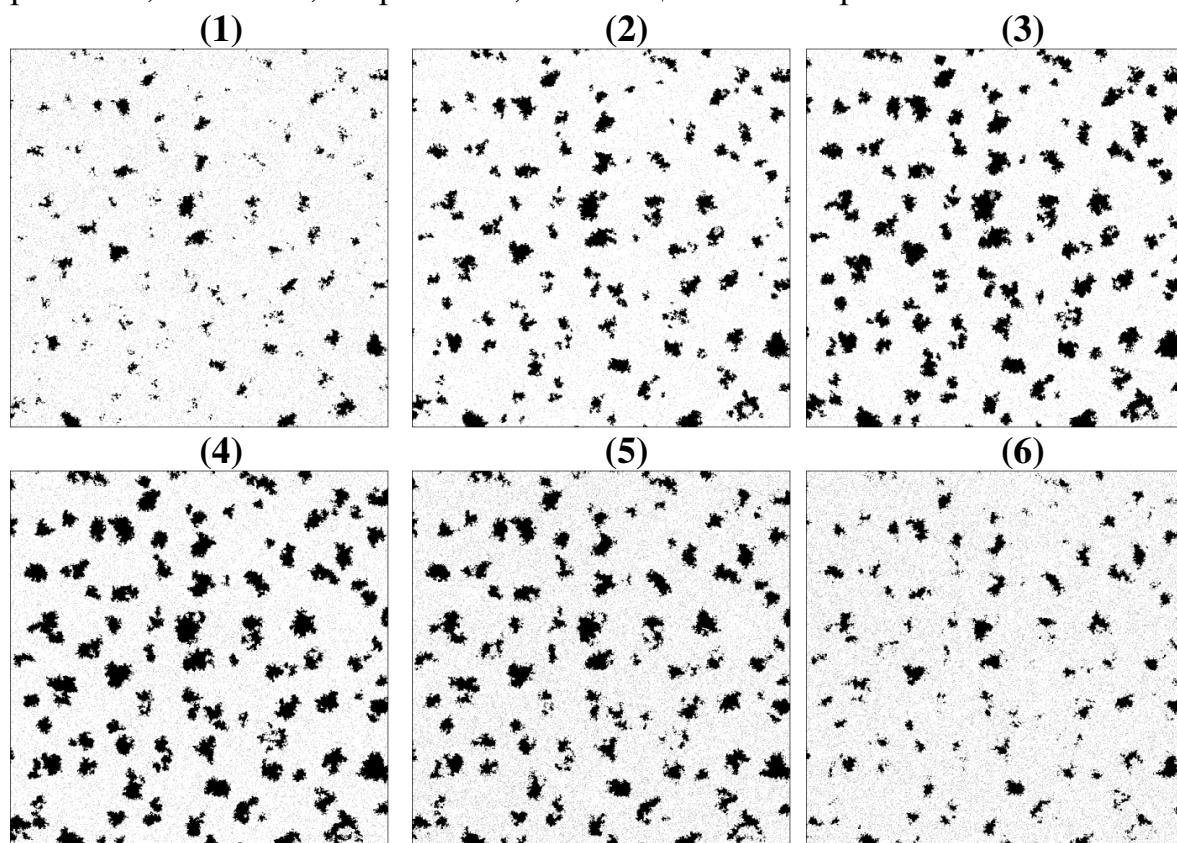
**Рис. 17.** Расчёты по методу МК на решётке  $1000 \times 1000$ . Параметры:  $k_1 = 0.07$ ;  $k_2 = 1$ ;  $k_3 = 0.07$ ;  $D_1 = 0$ ,  $D_2 = 1000$ . а) Показана концентрация “жертв”; б) Показаны концентрации “жертв” (пунктир) и “хищников” (сплошная линия). Метки с цифрами указывают на моменты времени, для которых на Рис. 18 представлены снимки состояния решётки.

Мы проводили расчёты на решётках  $1000 \times 1000$  и  $2000 \times 2000$ , увеличивая скорость диффузии до  $D_2 = 4000$ . Однако результаты были очень похожи на те, что представлены на рис. 17а. К сожалению, требуется слишком много расчётного времени чтобы проверить, можно



ли получить регулярные колебания на ещё большей решётке при большой скорости диффузии.

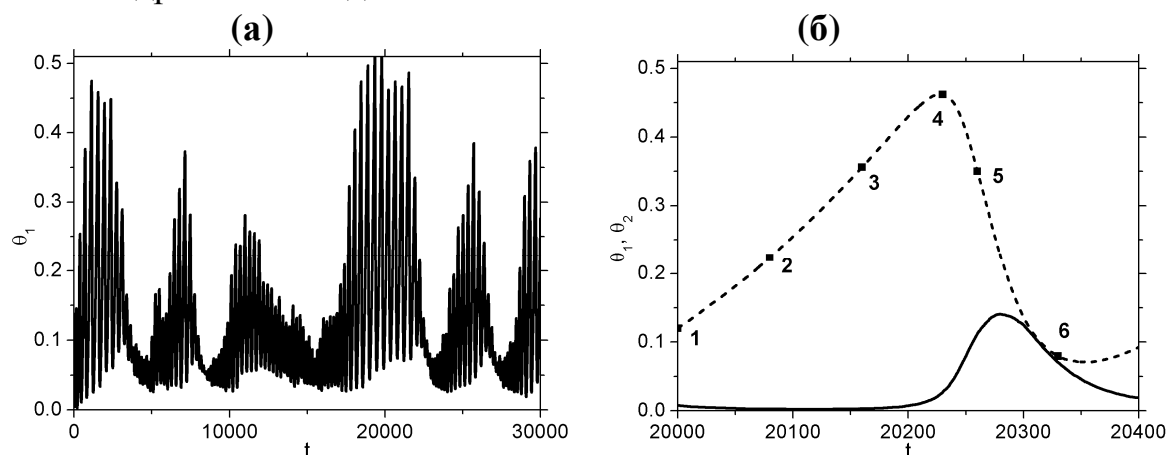
Результаты, представленные на рис. 17, позволяют лишь предположить, что в данной системе в термодинамическом пределе ( $N \rightarrow \infty, D_2 \rightarrow \infty$ ) могут наблюдаться регулярные колебания концентраций. Таким образом, в отличие от предыдущего случая быстрых “жертв” и неподвижных “хищников”, здесь наблюдается несоответствие между результатами модели №4 и результатами микроскопической модели. Это несоответствие вызвано неоднородным заполнением решётки, а именно, островками, состоящими из “жертв”.



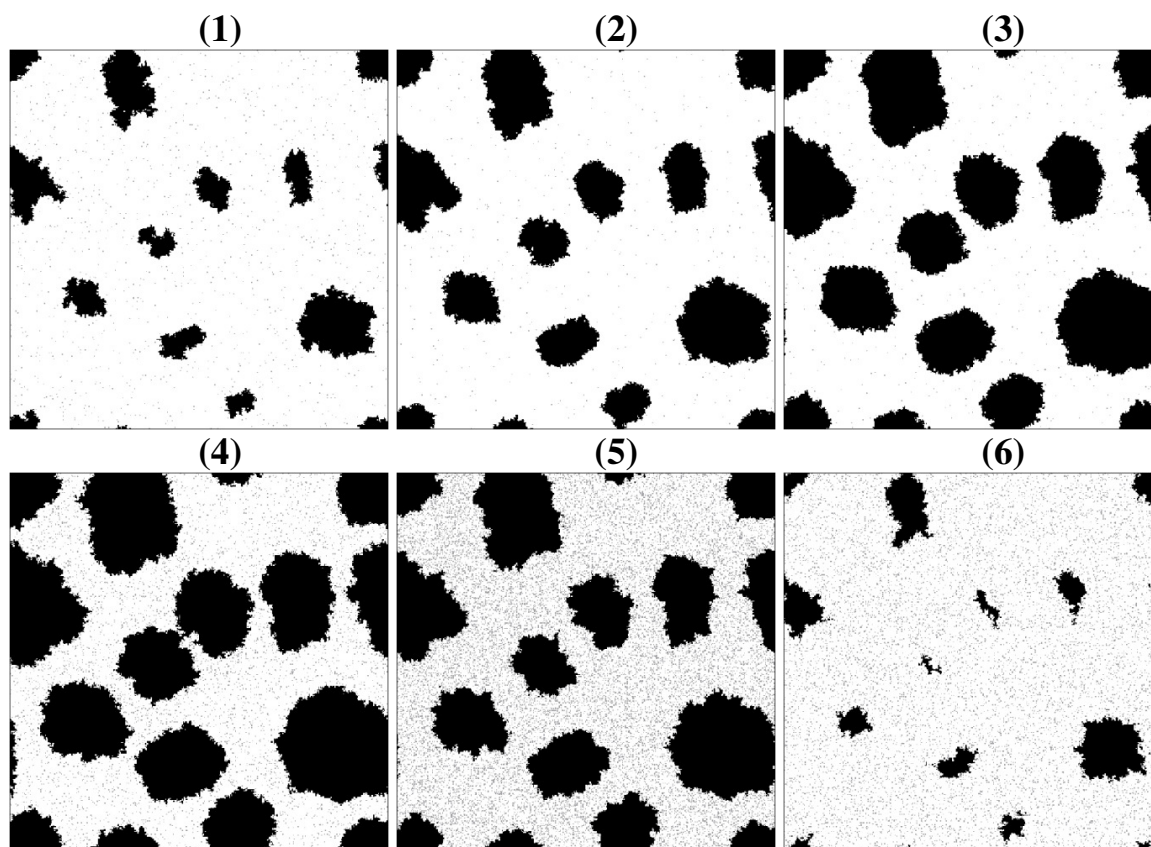
**Рис. 18.** Снимки состояния фрагмента  $600 \times 600$  решётки  $1000 \times 1000$ . Параметры модели и моменты времени указаны на Рис. 17. “Хищники” показаны серыми точками, “жертвы” – чёрными точками, пустые узлы не отмечены.

Ещё более сложная ситуация возникает при рассмотрении немного другого набора параметров. Здесь наблюдаются колебания с периодически меняющейся амплитудой (“биения”) (см. рис. 19а). На рис. 20 показаны мгновенные снимки состояния фрагмента в разные моменты времени в течение одного периода колебаний. К сожалению, расчёты по методу МК при большой скорости диффузии требуют огромного времени счёта.

Поэтому причины появления сложных колебаний для данного случая не были подробно исследованы.



**Рис. 19.** Расчёты по методу МК на решётке  $400 \times 400$ . Параметры модели:  $k_1 = 0.05$ ;  $k_2 = 1$ ;  $k_3 = 0.05$ ;  $D_1 = 0$ ,  $D_2 = 1000$ . **а)** Показана концентрация “жертв”; **б)** Показаны концентрации “жертв” (линия) и “хищников” (пунктир). Метки в виде квадратов с цифрами указывают на моменты времени, для которых на Рис. 20 показаны снимки состояния решётки.



**Рис. 20.** Снимки состояния решётки  $400 \times 400$ . Параметры модели и моменты времени указаны на Рис. 19б.

Детерминистическая модель №4 хотя и предсказывает наличие регулярных автоколебаний, но она, очевидно, не даёт достаточно точного решения исходной задачи. Вопрос о возможности получения регулярных колебаний на большой решётке при большой скорости диффузии требует дальнейших исследований.

#### 4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе рассмотрен решёточный вариант системы Лотки для моделирования взаимоотношений типа “хищник-жертва”. Предложены две системы ОДУ с парными вероятностями (модели макроуровня в приближении среднего поля), учитывающие ограниченную скорость диффузии одной и бесконечно большую скорость диффузии другой компоненты реакции. Проведен параметрический анализ этих моделей, в пространстве параметров определены области автоколебаний. Проведено сравнение колебательных решений для этих систем с решениями микроскопической модели, которые находятся методом МК. Показано, что микроскопическая модель может давать как локальные, так и глобальные автоколебания. Это становится возможным, когда скорость диффузии одной компоненты велика, а скорость другой ограничена или равна нулю. В случае быстрой диффузии “жертв” результаты расчётов по моделям макро и микроуровня практически совпадают. Это обусловлено отсутствием существенных неоднородностей в распределении частиц на поверхности для этого случая. Напротив, при быстрой диффузии “хищников”, наблюдаются сильные неоднородности на поверхности в виде островков, состоящих из “жертв”. В этом случае, макроскопическая модель не даёт желаемого результата и плохо описывает динамику микроскопической модели.

Таким образом, впервые показано, что решёточный вариант модели Лотки может описывать автоколебания на макроскопических масштабах. Автоколебания возникают, если диффузия одной компоненты реакции отсутствует, а скорость диффузии другой компоненты реакции бесконечно велика.

#### Литература.

- [1] A.J. Lotka, “Contribution to the theory of periodic reactions.” *J. Phys. Chem.* **14**, 271 (1910).
- [2] A.J. Lotka, "Analytical Note on Certain Rhythmic Relations in Organic Systems.” *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.* **6**, 410 (1920); “Undamped Oscillations Derived from the Law of Mass Action.” *J. Am. Chem. Soc.* **42**, 1595 (1920).

- [3] K. Tainaka, S. Fukazawa, “Spatial pattern in a chemical reaction system: prey and predator in the position-fixed limit.” *J. Phys. Soc. Jpn.* **61**, 1891 (1992).
- [4] J.E. Satulovsky, T. Tomé, “Stochastic lattice gas model for a predator–prey system.” *Phys. Rev. E* **49**, 5073 (1994).
- [5] T. Tomé, M.J. de Oliveira, “Role of noise in population dynamics cycles.” *Phys. Rev. E* **79**, 061128 (2009).
- [6] K. Kitamura, K. Kashiwagi, K. Tainaka, T. Hayashi, J. Yoshimura, T. Kawai, T. Kajiwara, “Asymmetrical effect of migration on a prey–predator model.” *Phys. Lett. A* **357**, 213 (2006).
- [7] M. Mabilia, I.T. Georgiev, U.C. Täuber, “Phase Transitions and Spatio-Temporal Fluctuations in Stochastic Lattice Lotka–Volterra Models.” *J. Stat. Phys.* **128**, 447 (2007).
- [8] J. D. Murray, *Mathematical Biology* Vols. I and II (Springer-Verlag, New York, 2002).
- [9] R. Dickman, “Kinetic phase transitions in a surface-reaction model: mean-field theory.” *Phys. Rev. A* **34**, 4246 (1986)
- [10] A.B. Bortz, M.H. Kalos, J.L. Lebowitz, “New algorithm for Monte-Carlo simulations of Ising spin systems.” *J. Comp. Phys.* **17**, 10 (1975).
- [11] D.T. Gillespie, “A general method for numerically simulating the stochastic time evolution of coupled chemical reactions.” *J. Comp. Phys.* **22**, 403 (1976).
- [12] A.J. McKane, T.J. Newman, “Predator-prey cycles from resonant amplification of demographic stochasticity.” *Phys. Rev. Lett.* **94**, 218102 (2005).