

## Численный метод построения автомодельного решения типа уединенной волны

### Введение

Явления пространственно-временной самоорганизации, такие как диссипативные структуры, автоколебания, автоволны, пространственный и временной хаос в различных физических, химических, биологических и др. системах вызывают большой интерес исследователей вот уже более 50 лет. Один из последних, достаточно обширных обзоров можно найти в книге [1]. Сформировались междисциплинарные науки такие как теория диссипативных структур (И. Пригожин), синергетика (Г. Хакен) и нелинейная динамика. Идеи, методы, подходы теории самоорганизации получили широкое распространение во многих областях знания. В книге [2] с позиции синергетики рассматриваются проблемы, ранее относящиеся целиком к сфере гуманитарных наук.

Настоящая работа посвящена исследованию и построению одного из интереснейших объектов самоорганизации - уединенных бегущих волн, которые наблюдаются во многих нелинейных системах. Впервые такие решения были изучены в работах Колмогорова А.Н., Петровского И.Г, Пискунова Н.С. (КПП) [3] при исследовании математической модели типа реакция диффузия для решения одной биологической проблемы и Зельдовича Я.Б. и Франк-Каменецкого Д.А. (ЗФ) [4] в теории гомогенного горения газов. Впоследствии, уединенные бегущие волны были обнаружены во многих системах. В гетерогенном катализе с развитием экспериментальных методик стало возможным наблюдать поистине драматические события, происходящие на поверхности благородных металлов в ходе гетерогенных каталитических реакций. G.Veser и R.Imbihl провели исследование реакции  $NO+CO/Pt(100)$  при помощи фотоэмиссионного электронного микроскопа и дали подробный обзор результатов эксперимента в работе [5]. В ходе этих исследований были подробно изучены бегущие волны, которые становятся неустойчивыми при низких температурах; также были обнаружены области, где возникают спиральные волны и сложные нерегулярные колебания.

В последнее время изучение явлений самоорганизации сделало существенный шаг вперед и перешло от общих достаточно абстрактных задач к математическому моделированию реальных процессов. Как правило, эти явления описываются системой нелинейных уравнений с частными производными типа *реакция-диффузия*, а решения вида бегущих волн представляют собой автомодельные решения. Аппарат исследования автомодельных решений доказал свою эффективность в значительном числе приложений [6-10]. В последние десятилетия мощным инструментом исследования нелинейных систем является бифуркационный анализ и методы продолжения по параметру, которые позволяют в пространстве параметров строить границы, разделяющие области с различным динамическим поведением нелинейной системы.

Основной подход к нахождению автомодельного решения типа волны

---

<sup>1</sup> Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект N 97-01-01093 ).

переключения или уединенного бегущего импульса заключается в переходе к волновой переменной и сведению системы уравнений типа *реакция-диффузия* к системе обыкновенных дифференциальных уравнений относительно фазовых переменных. Тогда задача сводится к построению сепаратрис, идущих из седла в седло или петель сепаратрис седла, которые являются образами соответствующих автомодельных решений в фазовом пространстве [11]. Этим методом определялась и скорость движения волны переключения в работах [12,13]. Однако, применение такого подхода к построению автомодельных решений, существующих на бесконечной прямой для систем с числом уравнений большим 2 представляет собой значительные трудности.

В настоящей работе предложен численный алгоритм нахождения автомодельных решений, который применен к исследованию волн переключения и уединенных импульсов, бегущих по поверхности монокристалла платины в ходе реакции  $NO+CO$ . Новая математическая модель этой реакции предложена в работе [14], в [15] проведен подробный бифуркационный анализ стационарных и автоколебательных решений. В [16] построена распределенная модель, учитывающая диффузию адсорбированных частиц по поверхности катализатора, и исследованы условия существования диссипативных структур и стоячих волн. В [17] продолжено изучение пространственно-временных структур в модели этой реакции. Найдено и исследовано явление диффузионного хаоса, обнаружены дышащие локализованные структуры, одиночные бегущие импульсы и волны переключения.

Целью данной работы является разработка численного алгоритма для построения решения типа волны переключения или бегущего импульса. Исследование проводится на примере новой математической модели реакции  $NO+CO/Pt(100)$ .

## 1. Математическая модель реакции $NO+CO/Pt(100)$ .

### Точечная модель.

Новая четырехкомпонентная математическая модель реакции  $NO+CO/Pt(100)$  была предложена в [14]. Изучение этой реакции проводится в рамках кинетической схемы, состоящей из девяти элементарных стадий:

- |                                                                  |                      |
|------------------------------------------------------------------|----------------------|
| 1) $(NO)_{gas} + (*) \rightarrow (NO)_{ads}$                     | адсорбция $NO$ ,     |
| 2) $(CO)_{gas} + (*) \rightarrow (CO)_{ads}$                     | адсорбция $CO$ ,     |
| 3) $(NO)_{ads} \rightarrow (NO)_{gas}$                           | десорбция $NO$ ,     |
| 4) $(CO)_{ads} \rightarrow (CO)_{gas}$                           | десорбция $CO$ ,     |
| 5) $(NO)_{ads} + (*) \rightarrow (N)_{ads} + (O)_{ads}$          | диссоциация $NO$ ,   |
| 6) $(CO)_{ads} + (O)_{ads} \rightarrow (CO_2)_{gas} + (*) + (*)$ | образование $CO_2$ , |
| 7) $(O)_{ads} + (O)_{ads} \rightarrow (O_2)_{gas} + (*) + (*)$   | десорбция $O_2$ ,    |
| 8) $(N)_{ads} + (N)_{ads} \rightarrow (N_2)_{gas} + (*) + (*)$   | десорбция $N_2$ ,    |
| 9) $(N)_{ads} + (O)_{ads} \rightarrow (NO)_{ads} + (*)$          | образование $NO$ .   |

Здесь  $(*)$  -- свободный адсорбционный центр,  $(NO)_{ads}$ ,  $(CO)_{ads}$ ,  $(N)_{ads}$  и  $(O)_{ads}$  -- адсорбированные частицы,  $(NO)_{gas}$ ,  $(CO)_{gas}$ ,  $(N_2)_{gas}$ ,  $(O_2)_{gas}$  и  $(CO_2)_{gas}$  -- молекулы в газовой фазе. Образующиеся молекулы  $(N_2)_{gas}$ ,  $(CO_2)_{gas}$ ,  $(O_2)_{gas}$  удаляются из реактора. Условия проведения реакции задаются температурой  $T$  [K] поверхности катализатора и парциальными давлениями реагентов в газовой фазе  $P_{NO}$  и  $P_{CO}$  [mbar]. Предполагается, что поверхностный слой монокристалла  $Pt(100)$  имеет структуру  $(1 \times 1)$  и не перестраивается.

Уравнения модели, описывающие изменение поверхностных концентраций адсорбированных частиц  $NO$ ,  $CO$ ,  $O$  и  $N$  имеют вид:

$$\begin{aligned} d\Theta_{NO}/dt &= V_1 - V_3 - V_5 + V_9 = f_1, \\ d\Theta_{CO}/dt &= V_2 - V_4 - V_6 = f_2, \\ d\Theta_O/dt &= V_5 - V_6 - V_7 - V_8 = f_3, \\ d\Theta_N/dt &= V_3 - V_9 - V_8 = f_4. \end{aligned} \quad (1.1)$$

Скорости элементарных поверхностных процессов  $(V_1)-(V_9)$  вычисляются по формулам:

$$\begin{aligned} V_1 &= P_{NO} K_1 \Theta_*, & V_2 &= P_{CO} K_2 \Theta_*, \\ V_3 &= K_3 \Theta_{NO} I_3, & V_4 &= K_4 \Theta_{CO} I_4, \\ V_5 &= K_5 \Theta_{NO} \Theta_* I_5, & V_6 &= K_6 \Theta_O \Theta_{CO} I_6, \\ V_7 &= 2K_7 \Theta_O^2 I_7, & V_8 &= 2K_8 \Theta_N^2 I_8, \\ V_9 &= K_9 \Theta_N \Theta_O I_9; \end{aligned}$$

где  $Q_* = 1 - \Theta_{NO} - \Theta_{CO} - \Theta_O - \Theta_N$ ;

$$k_a = n_a \exp(-E_a/(RT)), \quad a = 3, \dots, 9; \quad I_a = [\Theta_* + \sum_{p=1}^4 \Theta_p \exp(\epsilon_{ap}/(RT))]^{m_a}.$$

Значения предэкспонент и энергий активации элементарных стадий ( $k_a$ ,  $E_a$ ) заданы исходя из литературных данных [18, 19], (см. [17] таб.1). Множители  $I_a$  характеризуют влияние латеральных взаимодействий на скорости элементарных актов реакции. Это влияние учитывается с помощью энергетических параметров  $\epsilon_{ap}$  ( $m_a$  - число первых соседей). Параметры взаимодействия  $\epsilon_{ap}$  подобраны так, чтобы наилучшим образом описать экспериментальные данные. Латеральные взаимодействия играют решающую роль для адекватного описания экспериментальных данных [14].

В работе [15] был проведен бифуркационный анализ модели и построены диаграммы состояний системы на множестве внешних параметров: давления  $NO$ , давления  $CO$  и температуры  $T$ . На этих диаграммах проведены границы разделяющие области с разным динамическим поведением. В частности выяснены области существования множественности стационарных решений, автоколебаний, бистабильности и др. Предварительный анализ пространственно-однородных решений необходим для понимания тех явлений самоорганизации, которые могут возникать в данной области при учете диффузии компонент.

#### Распределенная модель.

Распределенная математическая модель  $NO+CO/Pt(100)$ , учитывающая миграцию адсорбированных частиц  $NO$ ,  $CO$ ,  $O$  и  $N$  по поверхности катализатора, представляет собой систему квазилинейных параболических уравнений с частными производными и в векторной форме имеет вид [16]:

$$\partial\Theta/\partial t = f(\Theta) + D \cdot S(\Theta) C^2 \Theta, \quad (1.2)$$

$$D = \text{diag}(D_1, \dots, D_4), \quad s_{mn} = \delta_{mn} \Theta_* + \Theta_m,$$

где  $f(\Theta)$  - правые части системы (1),  $S = [s_{mn}]$ ,  $D \cdot S(\Theta)$  - матрица диффузии учитывающая влияние занятых мест на поверхности катализатора на скорость диффузии ( $\delta_{mn}$  означает символ Кронекера).  $D_1, D_2, D_3, D_4$  - коэффициенты диффузии частиц  $NO, CO, O, N$ .

Исходя из экспериментальных данных [20] коэффициенты диффузии трех реагирующих компонент - монооксида азота, монооксида углерода и азота-полагаются равными  $D_1 = D_2 = D_4$ , а коэффициент диффузии кислорода  $D_3$  - на 1-2 порядка ниже.

Система (1.2) рассматривается на бесконечной прямой. Исследуются

автомодельные решения типа волны переключения в бистабильной среде или одиночного бегущего импульса в возбудимой среде.

## 2. Тестовая задача.

### 1) Аналитическое решение

Численный алгоритм нахождения автомодельных решений типа волны переключения или бегущего импульса с одновременным нахождением значения скорости фронта был разработан на известной задаче КПП [3], которая имеет аналитическое решение в виде волны переключения и может быть использована в качестве тестовой задачи.

В основе модели КПП лежит одно уравнение с частными производными параболического типа:

$$\frac{du}{dt} = D \frac{d^2 u}{dx^2} + F(u), \quad (2.1.1)$$

где  $F(u) = -\alpha(u-u_1)(u-u_2)(u-u_3)$ ,  $u_1, u_2, u_3$  - нули функции  $F(u)$ ,  $u_1 < u_2 < u_3$ ,  $D$  - коэффициент диффузии,  $\alpha > 0$  - некоторый заданный параметр. Нетрудно заметить, что уравнение (2.1.1) имеет три пространственно-однородных стационарных решения:  $u_1, u_2, u_3$ , причем,  $u_1$  и  $u_3$  являются устойчивыми, а  $u_2$  является неустойчивым.

Волна переключения из стационарного состояния  $u_1$  в стационарное состояние  $u_3$ , движущаяся со скоростью  $c$ , представляет собой частное решение уравнения (3) вида  $u = u(\xi)$ , где  $\xi = x - ct$ , отвечающее граничным условиям:

$$u|_{\xi \rightarrow +\infty} = u_3, \quad u|_{\xi \rightarrow -\infty} = u_1, \quad \left. \frac{du}{d\xi} \right|_{\xi \rightarrow \pm\infty} = 0. \quad (2.1.2)$$

Переходя к автомодельной переменной  $\xi$  в (2.1.1), для  $u(\xi)$  и неизвестного значения скорости  $c$  получаем задачу, описываемую обыкновенным дифференциальным уравнением второго порядка:

$$c \frac{du}{d\xi} + D \frac{d^2 u}{d\xi^2} + F(u) = 0. \quad (2.1.3)$$

Для каждого направления движения фронта волны эта задача имеет единственное решение:

$$u = \frac{u_3 + C_1 u_1 e^{\sqrt{\frac{\alpha}{2D}}(u_3 - u_1)\xi}}{1 + C_1 e^{\sqrt{\frac{\alpha}{2D}}(u_3 - u_1)\xi}}, \quad c = \sqrt{2\alpha D} \left( \frac{u_1 + u_3}{2} - u_2 \right) \quad (2.1.4)$$

или

$$u = \frac{u_3 + C_1 u_1 e^{-\sqrt{\frac{\alpha}{2D}}(u_3 - u_1)\xi}}{1 + C_1 e^{-\sqrt{\frac{\alpha}{2D}}(u_3 - u_1)\xi}}, \quad c = -\sqrt{2\alpha D} \left( \frac{u_1 + u_3}{2} - u_2 \right), \quad (2.1.4')$$

где  $c$  - скорость распространения волны, зависящая от коэффициента диффузии  $D$ , а значение постоянной  $C_1$  определяет положение волны на прямой в данный момент времени. ( $C_1 = \frac{u_3 - u_2}{u_2 - u_1}$ , при  $u(0) = u_2$ ). Поскольку, решение (2.1.4') переходит в решение (2.1.4) при замене  $x$  на  $-x$  и  $c$  на  $-c$ , то в дальнейшем будем исследовать

только решение (2.1.4).

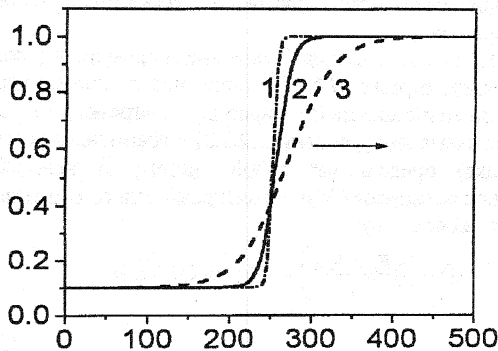


Рис.1 Волна переключения в модели КПП при разных коэффициентах диффузии  $D$  ( $L$  - полуширина,  $c$  - скорость волны). 1:  $D=10^4$ ,  $L=6$ ,  $c=1.49 \cdot 10^3$ , 2:  $D=10^3$ ,  $L=21$ ,  $c=4.74 \cdot 10^3$ , 3:  $D=10^2$ ,  $L=60$ ,  $c=1.49 \cdot 10^2$ .

Вид решения для 3-х значений коэффициента  $D$  представлен на рис.1. Можно заметить, что существует лишь узкая область, где решение изменяется сильно, в остальной области решение близко к стационарным значениям.

Введем полуширину  $L$  фронта волны следующим образом.  $L = |y_1 - y_2|$ , где  $y_1$  и  $y_2$  находятся из соотношений:  $u(y_1) = u_3 - \frac{u_3 - u_1}{4}$ ,  $u(y_2) = u_1 + \frac{u_3 - u_1}{4}$ .

Полуширина  $L$  зависит от значения коэффициента диффузии  $D$  (рис.1) и характеризует размер области резкого изменения решения. Чем больше значение  $D$ , тем шире область и больше полуширина  $L$ .

Один из способов решения задачи (2.1.3), (2.1.2) заключается в сведении ее к системе 2-х ОДУ первого порядка (вводится новая переменная  $w=U$ ):

$$\begin{cases} \frac{du}{d\xi} = w \\ \frac{dw}{d\xi} = -\frac{1}{D}(cw + F(u)) \end{cases} \quad (2.1.5)$$

Точки:  $x_1=(u_1, 0)$ ,  $x_2=(u_2, 0)$ ,  $x_3=(u_3, 0)$  являются стационарными точками системы (2.1.5), причем точки  $x_1$  и  $x_3$  имеют тип седла, а точка  $x_2$  - устойчивого узла или фокуса. Граничные условия (2.1.2) соответствуют точкам  $x_1$  и  $x_3$ . Решение задачи (2.1.5) существует только при одном значении скорости  $c=c_0$  и представляет собой на плоскости  $U, dU/dx$  сепаратрису, идущую из седла  $(u_1, 0)$  в седло  $(u_3, 0)$ .

В [11] на основе метода стрельбы и построения функции расщепления сепаратрис разработан численный алгоритм, позволяющий находить одномерные сепаратрисы седел. В частности, этим методом построена волна переключения в рассматриваемой тестовой задаче.

## 2) Разностное решение

Алгоритм, предложенный в [11], трудно применить к системам уравнений больше 2 и годится лишь для систем с относительно простым фазовым пространством. Поэтому нами разработан другой - разностный алгоритм нахождения автомодельного решения.

Используя специфический вид решения на бесконечной прямой, перейдем к нахождению решения на конечном отрезке  $-l < x < l$ , считая, что на концах отрезка граничные условия (2.1.2) выполнены с хорошей точностью. На отрезке  $[-l, l]$  введем равномерную сетку. Разностная схема для уравнения (2.1.3) с граничным условием второго рода (второго порядка) представляет собой систему  $N$  нелинейных разностных уравнений с  $N+1$  неизвестными ( $N$  значений разностного решения в  $N$  точках и неизвестное значение скорости  $c$ ):

$$\begin{cases} D \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{h^2} + c \left( \sigma \frac{u_{i+1} - u_i}{h} + (1 - \sigma) \frac{u_i - u_{i-1}}{h} \right) + F(u_i) = 0, i = 1, N \\ \frac{u_1 - u_0}{h} = 0 \\ \frac{u_{N+1} - u_N}{h} = 0 \end{cases} \quad (2.2.1)$$

Систему нелинейных уравнений (2.2.1) будем решать итерационным методом Ньютона. Будем считать, что нам известно хорошее начальное приближение, которое можно, например, взять из решения нестационарной задачи. Положив:

$$F(u_i^s) = F(u_i^{s-1}) + \frac{dF}{du_i^{s-1}} (u_i^s - u_i^{s-1})$$

и взяв первую и вторую разностные производные с верхней итерации, сведем систему (2.2.1) к системе линейных алгебраических уравнений с трех диагональной матрицей вида:

$$\begin{cases} -C_1 y_1^s + B_1 y_2^s = -F_1^{s-1} \\ A_i y_{i-1}^s - C_i y_i^s + B_i y_{i+1}^s = -F_i^{s-1}, i = 2, n-1 \\ A_N y_{N-1}^s - C_N y_N^s = -F_N^{s-1} \end{cases} \quad (2.2.2)$$

где

$$A_1 = 0, B_1 = \frac{D}{h^2} + \frac{c\sigma}{h}, C_1 = \frac{D}{h^2} + \frac{c\sigma}{h} + \alpha K_1,$$

$$A_N = \frac{D}{h^2} - \frac{c(1-\sigma)}{h}, B_N = 0, C_N = \frac{D}{h^2} - \frac{c(1-\sigma)}{h} + \alpha K_N$$

$$A_i = \frac{D}{h^2} - \frac{c(1-\sigma)}{h}, B_i = \frac{D}{h^2} + \frac{c\sigma}{h}, C_i = \frac{2D}{h^2} - \frac{c(1-2\sigma)}{h} + \alpha K_i, i = 2, n-1$$

$$F_i = \alpha (y_i^{s-1} K_i - L_i), L_i = (y_i^{s-1} - u_1)(y_i^{s-1} - u_2)(y_i^{s-1} - u_3), i = 1, n$$

$$K_i = (y_i^{s-1} - u_2)(y_i^{s-1} - u_3) + (y_i^{s-1} - u_1)(y_i^{s-1} - u_3) + (y_i^{s-1} - u_1)(y_i^{s-1} - u_2), i = 1, n$$

Отметим, что неизвестное значение скорости перемещения фронта  $c$ , которое предстоит найти, входит в коэффициенты системы (2.2.2).

Если значение скорости известно (например, из численного решения нестационарной задачи), то решение  $u_i$  на каждой итерации находится методом

прогонки. Обычно условием окончания итераций считается выполнение неравенства:  $\|y_i - y_{i-1}\| < \epsilon$ , где  $\epsilon$  - заданная точность сходимости; сеточная функция  $y_i$  на последней итерации принимается за разностное решение исходной задачи.

В предложенном варианте метода Ньютона (2.2.2) не во всех точках имеет место диагональное преобладание. Диагонального преобладания можно добиться, если в выражении для диагонального коэффициента  $C_i$  прибавлять модуль выражения  $\alpha K_i$  ( $i = 1, n$ ) - тогда устойчивость метода прогонки будет обеспечена.

Если точное значение скорости неизвестно, а известно лишь ее приближенное значение, то наряду с итерационным методом (2.2.2) нужно проводить итерации по скорости. Они строятся следующим образом: 1) задаются начальные приближения скорости  $c_0$  и решения  $y_0$  и подставляются в систему (2.2.1), 2) вычисляется невязка  $\psi$ , которая является функцией скорости и решения. При точном значении скорости и решения невязка имеет минимум. Для нахождения минимума невязки вначале фиксируется сегмент значений скорости  $[a, b]$ , на котором находится минимум. 3) Минимум невязки ищется методом стягивающихся сегментов. Для каждого нового значения скорости производится вычисление решения методом Ньютона (2.2.2). Когда точное значение скорости не известно, то по методу Ньютона проводится вычисление одной или двух итераций.

При тестировании возмущалось аналитическое решение и значение скорости  $c$ . При достаточно хорошем начальном приближении этот алгоритм позволял найти решение и одновременно вычислить значение скорости фронта за 3-5 итераций.

### 3) Выбор длины отрезка и числа точек разбиения отрезка

Для выявления оптимальных условий сходимости предложенного алгоритма было исследовано влияние длины отрезка, количества точек разбиения, влияния граничных и начальных условий а также параметров в разностной схеме (2.2.2).

Расчеты показали, что длину отрезка и число точек разбиения надо выбирать из соображений аппроксимации так, чтобы на концах отрезка решение с хорошей точностью ( $10^{-7} - 10^{-14}$ ) выходило бы на стационары  $u_1$  и  $u_3$ , а во внутренних точках максимум модуля невязки не превышал бы, скажем  $10^{-4}$ . То есть выбор длины отрезка зависит от полуширины волны переключения и определяется коэффициентом диффузии  $D$ . В тестовой задаче при  $u_1 = -5$ ,  $u_2 = 0$ ,  $u_3 = 2$ ,  $D = 2$ ,  $\alpha = 1$  нужная точность достигалась при  $L = 5$  и  $N = 250$ .

### 4) Влияние граничных и начальных условий

Поскольку решение задачи на концах отрезка экспоненциально стремится к пространственно-однородным стационарам  $u_1$  и  $u_3$ , а производная решения стремится к нулю, то можно в разностной задаче ставить граничные условия как первого так и второго рода. Расчеты показали, что выбор граничных условий не влияет на сходимость численного решения к точному при достаточно большой длине отрезка (см. предыдущей пункт).

Изучение влияния начальных условий на скорость сходимости разностного решения к точному проводилось в три этапа.

На первом этапе было взято аналитическое значение скорости фронта и менялось начальное приближение к решению. Было показано, сходимость имеет место даже при достаточно грубом начальном приближении (в виде лестницы). Чем точнее приближение, тем меньше итераций требуется для нахождения решения.

На следующем этапе, наоборот, был зафиксирован профиль волны, а

приближенно задавалась скорость фронта. Трудность состояла в том, что исходная непрерывная задача имеет решение только при единственном значении скорости, и не понятно было как поведет себя разностная задача. Исследования показали, что ошибка в задании скорости не может быть больше порядка аппроксимации. Даже при относительно небольших отклонениях значения скорости от точного итерации не сходятся, и разность между точным и численным решением держится равной порядку погрешности задания скорости.

Если неизвестны и скорость и профиль волны, то требование близости начального приближения к аналитическому решению является жестким требованием сходимости итераций.

### 3. Исследование решения типа уединенной бегущей волны в модели реакции $NO+CO/Pt(100)$

Исследование распределенной четырехкомпонентной математической модели реакции  $NO+CO/Pt(100)$  (1.2) проводилось в работах [16, 17]. В работе [17] были найдены решения типа бегущих волн, одиночных бегущих импульсов и волн переключения, которые изучались в рамках нестационарной задачи. Особый интерес вызвали одиночные бегущие импульсы (автосолитоны). Они существуют наряду с устойчивым пространственно - однородным стационаром и представляют собой локальные возмущения ("всплески") этого стационара, перемещающиеся по нему с постоянной скоростью. Для возбуждения автосолитона необходимо задать на отрезке определенной длины возмущения стационара с амплитудой, превышающий некоторый порог. При меньших начальных возмущениях стационара со временем происходит их затухание и в системе устанавливается пространственно - однородное стационарное решение.

Представляет интерес в уравнении (1.2) перейти к автомодельной переменной  $\xi = x-ct$  и построить автомодельное решение типа автосолитона.

#### 1) Автомодельная задача

Переходя в векторном уравнении (1.2) к переменной  $\xi$ , для поверхностных концентраций адсорбированных частиц, получаем следующую систему 4-х ОДУ второго порядка:

$$D_i \left( \theta^* \frac{d^2 \theta_i}{d\xi^2} + \theta_i \sum_{j=1, j \neq i}^4 \frac{d^2 \theta_j}{d\xi^2} \right) + f_i(\theta) + c \frac{d\theta_i}{d\xi} = 0, \quad i = 1-4 \quad (3.1.1)$$

Пространственно-однородные стационары удовлетворяют системе:

$$f_i(\theta_1, \theta_2, \theta_3, \theta_4, P_{NO}, P_{CO}, T) = 0, \quad i = 1-4 \quad (3.1.2)$$

В рассматриваемом диапазоне параметров система (3.1.2) имеет один устойчивый стационар  $\Theta_i^s(\theta_1, \theta_2, \theta_3, \theta_4)$   $i=1$ . При некоторых значениях давления  $P_{NO}$ , она может иметь еще два неустойчивых стационара  $\Theta_i^s$   $i=2,3$ . В работе [16] было проведено исследование неустойчивости Тьюринга и показано, что стационар  $\Theta_1^s$  является абсолютно устойчивым в распределенной системе, то есть ни при каких коэффициентах диффузии в задаче на отрезке от него не отвечаются стационарные диссипативные структуры или автоволны. Однако, в [17] были обнаружены уединенные волны, бегущие по этому стационару и локализованные структуры, связанные также с этим стационаром. И те и другие описываются решениями системы автомодельных уравнений (3.1.1), отвечающими граничным условиям на бесконечности:



$$\theta(\xi) \rightarrow \theta_i, \quad \frac{d\theta(\xi)}{d\xi} \rightarrow 0 \text{ при } \xi \rightarrow \pm\infty \quad (3.1.3)$$

При  $c=0$  задача (3.1.1) (3.1.3) описывает стационарные локализованные структуры, при  $c \neq 0$  она описывает уединенную бегущую волну. Отметим, что если задача (3.1.1) (3.1.3) имеет решение  $U(\xi)$  при некотором значении скорости  $c > 0$ , то она имеет и зеркально симметричное решение  $U(-\xi)$  при значении скорости  $-c < 0$ . Это вытекает из свойства симметрии задачи (3.1.1) (3.1.3).

Рассматривая производные как новые дополнительные переменные, и обозначая их через  $y_i$ , сведем систему второго порядка (3.1.1) к системе из восьми ОДУ первого порядка:

$$\begin{cases} \frac{d\theta_i}{d\xi} = y_i \\ \frac{dy_i}{d\xi} = \frac{1}{\theta^2} (-F_i + \theta_i \sum_{j=1}^4 F_j) \end{cases} \quad (3.1.4),$$

$$\text{где } F_i = \frac{1}{D_i} (c \frac{d\theta_i}{d\xi} + f_i), \quad i=1-4.$$

Стационарные решения  $\Theta_i^s(\theta_1^s, \theta_2^s, \theta_3^s, \theta_4^s)$  системы (3.1.1), переходят в стационарные точки  $Y_i^s(\theta_1^s, \theta_2^s, \theta_3^s, \theta_4^s, 0, 0, 0, 0)$  системы (3.1.4). Граничные условия (3.1.3) означают стремление при  $\xi \rightarrow +\infty$  и  $\xi \rightarrow -\infty$  к одной и той же стационарной точке  $Y_i^s$   $i=1$  в фазовом пространстве системы (3.1.4). Исследование собственных значений матрицы Якоби показало, что если в исходной задаче (1.2) пространственно-однородный стационар  $\Theta_i^s$  устойчив, то в системе ОДУ (3.1.4) соответствующий стационар  $Y_i^s$  — неустойчив и имеет тип многомерного седла. Искомое автомодельное решение типа автосолитона в фазовом пространстве системы (3.1.4) представляет собой петлю сепаратрисы седла.

## 2) Численный метод построения автосолитона

Описанный выше итерационный метод и опробованный в деталях на тестовой задаче был применен для исследуемой модели. На отрезке конечной длины выбиралась равномерная сетка и бралась стандартная разностная аппроксимация системы (3.1.1), аналогичная (2.2.1). (На концах отрезка граничные условия ставились второго рода, использовалась центральная разностная производная для аппроксимации переносного члена). Полученная система нелинейных уравнений решалась методом Ньютона. На каждой итерации при решении системы линейных уравнений использовался метод матричной прогонки. В качестве начального приближения брался профиль и скорость сформировавшейся уединенной волны из численного интегрирования нестационарной задачи (1.2). В соответствии с полушириной профиля волны выбиралась длина отрезка по  $\xi$ . Далее применялся метод стягивающихся сегментов для нахождения минимума невязки  $\psi(c)$ . Исходная автомодельная задача (3.1.1) (3.1.3) имеет решение только при единственном значении скорости, а разностная задача на решении имеет минимум невязки. Отрезок значений скорости должен быть выбран, таким чтобы на нем функция  $\psi(c)$  имела бы только один экстремум; иначе применение метода стягивающихся сегментов невозможно. На рис. 2 показан характерный вид функции  $\psi(c)$  для исследуемой задачи, из которого можно увидеть, на сколько мал диапазон изменения скорости, на котором ищется минимум невязки разностной схемы.

Однако, начальное приближение, которое нам давала нестационарная задача, оказалось достаточно хорошим и итерации к решению сходились быстро. На рис. 3 показан вид уединенной волны для указанных значений параметров.

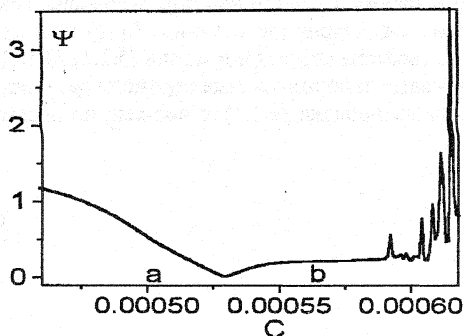


Рис.2 Зависимость невязки  $\psi$  разностной схемы от значения скорости  $c$ ;  $[a, b]$ -отрезок, на котором ищется минимум невязки методом стягивающихся сегментов.

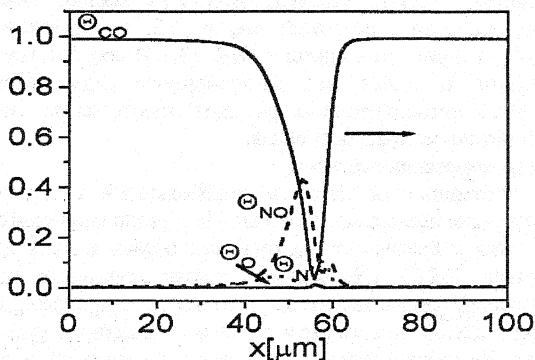


Рис.3 Уединенная волна в модели реакции  $NO+CO/Pt(100)$  ( $P_{NO}=4.0 \cdot 10^7$  mbar,  $P_{CO}=3 \cdot 10^7$  mbar,  $T=380$  K).

**Заключение.** В работе разработан эффективный численный алгоритм построения автомодельного решения типа уединенной волны или волны переключения. Алгоритм разработан на известной задаче КПП, имеющей аналитическое решение в виде волны переключения и применен к построению уединенного бегущего импульса в четырехкомпонентной математической модели типа *реакция-диффузия*.

Авторы выражают благодарность Макееву А.Г. за полезные обсуждения.

#### Литература.

1. Михайлов А.С., Лоскутов А.Ю. "Введение в синергетику", М., 1990.
2. Капица С. П., Курдюмов С. П., Малинецкий Г. Г. Синергетика и прогнозы

будущего. М.: Наука, 1997.

3. Колмогоров А.Н., Петровский И.Г., Пискунов Н.С. Исследование уравнения диффузии, соединенной с возрастанием количества вещества, и его применение к одной биологической проблеме // Бюл. МГУ. Сек. А. 1937. Т.1, вып. 6. С. 1-26.

4. Зельдович Я.Б., Франк-Каменецкий Д.А. Теория теплового распространения пламени // Журн. физ. химии. 1938. Т. 12, вып. 1. С. 100-105.

5. G. Vesper and R. Imbihl. Synchronization and spatiotemporal self-organization in the  $NO+CO$  reaction on  $Pt(100)$ . 1. Unsynchronized oscillations on the  $1 \times 1$  substrate. // J. Chem. Phys. 100(11), 1994, p.8483-8491.

6. Баренблатт Г.И. Подobie, автомодельность, промежуточная асимптотика. Теория и приложения к геофизической гидродинамике. Л.: Гидрометеоиздат, 1982.

7. Маслов В.П., Данилов В.Г., Волосов К.А. Математическое моделирование процессов теплопереноса. М.: Наука, 1987.

8. Математическая теория горения и взрыва // Я.Б. Зельдович, Г.И. Баренблатт, В.Б. Либрович, Г.М. Махвиладзе. М.: Наука, 1980.

9. Франк-Каменецкий Д.А. Диффузия и теплопередача в химической кинетике. М.: Наука, 1987.

10. Галактионов В.А., Дородницын В.А., Еленин Г.Г., Курдюмов С.П., Самарский А.А. Квазилинейное уравнение теплопроводности с источником: обострение, локализация, симметрия, точные решения, ассимптотики, структуры. Сов. Мат., т.41, № 5, 1988, с.1222-1291.

11. Кузнецов. Одномерные сепаратриссы системы обыкновенных дифференциальных уравнений, зависящих от параметров. Пушкино: ИЦБИ АН СССР, 1983 г. - 48, с.21. Материалы по математическому обеспечению ЭВМ / АН СССР, Научный центр биологических исследований, н.-и. ВЦ. Сер. Fortran; Вып.8.

12. Snytnikov V.N., Chumakova N.A., Vernikovskaya N.V. Autosolitons structure in heterogeneous media // Unsteady Combustion. NATO ASI on "Unsteady Combustion", Sep. 6-17, 1993. Praia da Granja, Portugal, 1993. PtII. P. 7-9.

13. Верниковская Н.В., Снытников В.Н., Чумакова Н.А. Метод коррекции потоков в схемах расщепления для расчетов автосолитонов в диссипативной гетерогенной среде с химическими реакциями // Вычислительные технологии. 1993. Т. 2, № 4. С.169-176.

14. А.Г. Макеев. Математическая модель реакции  $NO+CO/Pt(100)$ . Сравнение результатов расчетов с экспериментальными данными. // Математическое моделирование, 1996, N 2, с.115-127.

15. Е.С. Куркина, А.Г. Макеев. Бифуркационный анализ математической модели реакции  $NO+CO/Pt(100)$ . // Сборник МГУ "Обратные задачи естествознания", 1997, с.52-78.

16. Е.С. Куркина, А.В. Малых. Исследование неустойчивости Тьюринга в четырех компонентной математической модели реакции  $NO+CO/Pt(100)$ . // Сборник трудов конференции "Математика. Компьютер. Образование.", 1998, с.169-176.

17. Е.С. Куркина, А.В. Малых, А.Г. Макеев. Исследование автоволновых и хаотических структур в распределенной четырех компонентной математической модели реакции  $NO+CO/Pt(100)$ . // Сборник МГУ "Численные методы и вычислительный эксперимент", 1998, с. 44-63.

18. T.Fink, J.-P.Dath, M.R.Basset, R.Imbihl, G.Ertl. The mechanism of the "explosive"  $NO+CO$  reaction on  $Pt(100)$ : experiments and mathematical modeling // Surf. Sci., Vol.245, 1991, p.96-110.

19. T.Fink, J.-P.Dath, R.Imbihl, G.Ertl. Kinetic oscillations in the  $NO+CO$  reaction on  $Pt(100)$ : experiments and mathematical modeling // J. Chem. Phys., Vol.95, 1991, p.2109-2118.

20. R.Monot, M.Croci, V.Calpini. Chemisorption and surface diffusion on model catalyst surfaces: Molecular beam studies // Analysis Magazine, Vol.21, No 8, 1993, p. 28-35.

21. В.А. Ильин, В.А. Садовничий, Бл.Х. Сендов. Математический анализ // изд-во Московского университета, 1985, ч.1, с.288-290.