

АВТОВОЛНЫ В ОКОЛОПОРОГОВОЙ СРЕДЕ

A. Ю. Довженко^a, С. В. Маклаков^b, И. Э. Руманов^b, Э. Н. Руманов^{b*}

*^a Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау Российской академии наук
142432, Черноголовка, Московская обл., Россия*

*^b Институт структурной макрокинетики и проблем материаловедения Российской академии наук
142432, Черноголовка, Московская обл., Россия*

Поступила в редакцию 12 апреля 2002 г.

Приближенными и численными методами изучено поведение автоволн при значениях параметров, близких к порогу распространения. В этих условиях изменения скорости и амплитуды волны оказываются медленными. Для скорости получено квазистационарное уравнение. В надпороговой области оно описывает релаксацию к установившемуся режиму (равномерного движения), а в подпороговой — начальную стадию затухания, определяющую характерное время этого процесса. По мере приближения к порогу характерные времена неограниченно растут и в над-, и в подпороговой области параметров. Малые случайные неоднородности активной среды и другие источники «шума» вызывают интенсивные пульсации скорости. По масштабу эти пульсации сопоставимы со средней скоростью (как при сильной турбулентности), а по своим статистическим свойствам напоминают критические флуктуации параметра порядка вблизи точки непрерывного фазового перехода. Спектр пульсаций имеет резкий максимум на нулевой частоте, который, в отличие от фликкер-шума, исчезает при удалении от порога. Решения квазистационарного уравнения и результаты численного моделирования согласуются между собой, пока флуктуации малы — как в теории непрерывных переходов, за пределами флуктуационной области.

PACS: 05.65.+b, 05.70.Jk, 82.40.Ck

1. ВВЕДЕНИЕ

Одной из разновидностей автоволн являются бегущие импульсы [1]. Структуру импульса можно наглядно представить, рассматривая волну реакции, движущуюся по трубке с пористыми стенками. Благодаря фильтрации через стенки продукты реакции позади волны постепенно замещаются исходным веществом из окружающего трубку пространства. Состав смеси, который был до прохождения волны, восстанавливается, так что вслед за первым может бежать новый импульс. Таким образом, периодическая автволна — это последовательность импульсов. В «двумерном» реакторе (например, чашке Петри) бегущий импульс может превратиться во вращающуюся спираль. Действительно, если трубку закнуть в кольцо, получится вращение импульса с периодом, который, конечно, должен превышать время восстановления исходного состава смеси (для этого радиус кольца должен быть достаточно велик).

Плоский слой активной среды можно представить как набор таких концентрических колец. Так как скорость импульса, очевидно, не зависит от радиуса кольца, импульсы в наружных кольцах будут отставать, при этом образуется спираль, выгнутая в сторону вращения. Расходящиеся от «ведущего центра» круговые волны и другие сложные структуры можно «строить» из бегущих импульсов.

Волна реакции, составляющая переднюю часть импульса, распространяется благодаря диффузии активных частиц в исходную смесь. Ее скорость u и ширина b имеют порядок величины

$$u \sim \sqrt{\chi/\tau_R}, \quad b \sim \sqrt{\chi\tau_R}, \quad (1.1)$$

где χ — коэффициент диффузии активатора, τ_R — характерное время реакции. Оценка (1.1) предполагает, что это время мало по сравнению с временем восстановления. Тогда стадия восстановления не оказывает заметного влияния на сам импульс (его скорость и амплитуду). Она существенна лишь для формирования периодических волн, спиралей и т. д.

*E-mail: ed@ism.ac.ru

В то же время потери активатора (например, через стенки трубы) замедляют реакцию. Скорость u падает, а ширина b увеличивается, что способствует потерям. Следствием такой обратной связи является наличие порога распространения, который обнаружен у различных автоволн (см. обзор [2]). С математической точки зрения задача о распространении волн с учетом потерь имеет два решения; быстрая волна устойчива, а медленная — неустойчива. В точке бифуркации оба решения сливаются и исчезают, так что эта точка определяет пороговую величину управляющего параметра (например, отношения времени потерь к τ_R). Впервые порог распространения был найден в [3] для волн горения. В этом случае роль активатора играет тепло. Из-за активационной зависимости скорости реакции от температуры область, где идет реакция, узка по сравнению с длиной волны. Это позволило получить в [3] приближенные формулы для скорости стационарных (движущихся равномерно) волн, а также условие их слияния.

Мы рассмотрим нестационарные волны, распространяющиеся в условиях, близких к пороговым. В этих условиях достижение равномерного движения (при надпороговых значениях параметров) или затухание волны (в подпороговой области) происходит медленно, что позволяет найти квазистационарное уравнение, описывающее изменение скорости волны со временем. Хотя при выводе уравнения используется модель активированной экзотермической реакции, его форма вблизи порога не зависит от конкретной модели и пригодна для любых волн реакции. Из сказанного выше следует, что это заключение можно распространить на бегущие импульсы и, в конечном счете, на все автоволны, которые из них «построены». Вблизи порога различие между устойчивым и неустойчивым решениями мало. Это порождает ситуацию «почти безразличного равновесия», подобную той, что возникает в окрестности точки непрерывного фазового перехода. Отклонения от установленногося режима (равномерно движущейся волны) возникают легко и релаксируют медленно. В случае непрерывных фазовых переходов такие отклонения (критические флуктуации) являются тепловыми, тогда как в рассматриваемом случае они обусловлены неоднородностями активной среды и другими источниками «шума», который, как правило, существенно превосходит тепловую накачку. Что касается статистических свойств флуктуаций скорости (частотный спектр и др.), то они не зависят от шума и присущи самой волне. Действительно, корреляционное время флуктуаций по мере приближения

к порогу неограниченно растет, тогда как для шума такое время остается, очевидно, конечным. Поэтому вблизи порога любой шум можно рассматривать как δ -коррелированный (белый).

Формула для коррелятора скоростей, полученная из квазистационарного уравнения в линейном приближении, непригодна в области, близкой к порогу, когда пульсации перестают быть малыми. Границы этой «флуктуационной» области можно определить, сравнивая по аналогии с фазовыми переходами среднеквадратичное отклонение скорости и отличие средней скорости от ее порогового значения. В случае непрерывных фазовых переходов протяженность флуктуационной области является характеристикой вещества, испытывающего переход. В активной системе такая протяженность вместе с интенсивностью флуктуаций зависит от уровня шума. Это позволяет, в частности, вводя контролируемый шум, растягивать флуктуационную область, чтобы облегчить ее изучение.

2. КВАЗИСТАЦИОНАРНОЕ УРАВНЕНИЕ

Скорость бегущего импульса, согласно (1.1), не зависит от стадии восстановления. Если время восстановления велико по сравнению с временем потерь активатора τ_c , то и пороговый эффект не зависит от этой стадии. Поэтому фильтрацией через стенки трубы будем пренебречь и рассматривать вместо бегущего импульса волну активированного превращения исходного вещества в продукт. Для экзотермической реакции роль активатора играет тепло. Волна движется благодаря передаче тепла в исходное вещество, нагрев вызывает интенсивную реакцию, происходит выделение тепла и т. д. Коэффициентом переноса в (1.1) является в этом случае температуропроводность. Если энергия активации E достаточно велика, выделение тепла сосредоточено в окрестности температурного максимума — в зоне реакции. Впереди, в зоне прогрева, реакцией можно пренебречь, так как низкая температура; позади, в зоне остывания, реакция не идет, так как все вещество израсходовано. Трехзонную структуру волны характеризуют три параметра: число Льюиса L — отношение коэффициентов диффузии и температуропроводности; число Семенова S — отношение времени остывания τ_c к времени реакции $\tau_R(T_b)$,

$$T_b = T_0 + \frac{Q}{c}, \quad (2.1)$$

где T_0 — начальная температура, Q — теплота реакции, c — теплоемкость; число Зельдовича

$$Z = \frac{E}{T_b^2} (T_b - T_0). \quad (2.2)$$

При $Z \gg 1$ ширина зоны реакции b мала по сравнению с шириной волны, что позволяет приближенно рассматривать эту зону как поверхность, на которой испытывают скачок тепловой и диффузионный потоки [3]. Таким образом, имеем уравнения для волны

$$\frac{\partial n}{\partial t} + u(t) \frac{\partial n}{\partial x} - L \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} = -\varphi \delta(x), \quad (2.3)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u(t) \frac{\partial T}{\partial x} - \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \varphi \delta(x) - \frac{T}{S}, \quad (2.4)$$

записанные в системе координат, в которой зона реакции покоится при $x = 0$. Границные условия имеют вид:

$$\begin{aligned} x \rightarrow -\infty, \quad n = 1, \quad T = 0; \\ x \rightarrow \infty, \quad n = 0, \quad T = 0. \end{aligned} \quad (2.5)$$

В качестве масштаба времени используется $\tau_R(T_b)$, масштабы длины и скорости выбираются согласно (1.1). Здесь n — концентрация исходного вещества, T — температура, отсчитанная от T_0 в масштабе $T_b - T_0$, $u(t)$ — мгновенная скорость волны,

$$\varphi^2 = u_0^2 \exp[-Z(1 - T_m)], \quad (2.6)$$

u_0 — скорость равномерного движения волны при $S \rightarrow \infty$, $T_m = T(x = 0)$. Задача (2.3)–(2.6) имеет при

$$S > S_{th} \approx 2eZu_0^{-2}$$

два стационарных решения [3]:

$$u_1(S) > u_{th} \approx u_0/\sqrt{e}, \quad u_2(S) < u_{th},$$

при этом нижняя ветвь неустойчива. При $S < S_{th}$ решений в виде стационарных волн нет. На пороге $S = S_{th}$ разность $1 - T_m \approx Z^{-1} \ll 1$, что оправдывает приближенную запись активационного закона (2.6).

Рассмотрим нестационарные решения этой задачи, которые при $S > S_{th}$ описывают релаксацию к равномерно движущейся волне, а при $S < S_{th}$ — ее затухание. В окрестности S_{th} эти процессы оказываются медленными, что, как мы увидим, позволяет получить приближенное уравнение для скорости $u(t)$. При $t \gg u_{th}^{-2}$ влияние начальных условий должно исчезать. Тогда, согласно (2.3)–(2.5), запишем для точки $x = 0$:

$$\frac{1}{2\sqrt{\pi}L} \int_0^t \frac{\varphi(t')}{\sqrt{t-t'}} \exp \left[-\frac{l^2(t', t)}{4L(t-t')} \right] dt' \approx 1, \quad (2.7)$$

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \int_0^t \frac{\varphi(t')}{\sqrt{t-t'}} \times \\ & \times \exp \left[-\frac{l^2(t', t)}{4(t-t')} - \frac{t-t'}{S} \right] dt' \approx T_m(t), \end{aligned} \quad (2.8)$$

где

$$l(t', t) = \int_{t'}^t u(t'') dt''. \quad (2.9)$$

При записи (2.7) предполагается полное превращение вещества, так что позади зоны реакции $n = 0$. Подынтегральные функции в (2.7), (2.8) отличны от нуля лишь в интервале времен порядка u_0^{-2} вблизи верхнего предела.

Равенства (2.6)–(2.8) позволяют определить величины φ , u , T_m . Когда волна движется равномерно, $u = \varphi$. Вблизи порога скорость меняется медленно, отличие u от φ невелико. В подынтегральных выражениях (2.7), (2.8) всюду, за исключением экспонента, используем разложения

$$\begin{aligned} \varphi(t') & \approx \varphi(t) - (t - t') \frac{du}{dt}, \\ u(t') & \approx u(t) - (t - t') \frac{du}{dt}, \\ \langle u \rangle & \approx u(t) - \frac{1}{2}(t - t') \frac{du}{dt}, \end{aligned} \quad (2.10)$$

где $\langle u \rangle$ определяется равенством

$$l(t', t) = \langle u \rangle (t - t').$$

Если выполнено условие

$$\left| \frac{du}{dt} \right| \ll u_{th}^3, \quad (2.11)$$

то разложения (2.10) пригодны, пока разность $(t - t') \leq u_{th}^{-2}$. Как сказано выше, только этот интервал изменения t' дает существенный вклад при вычислении интегралов (2.7), (2.8). Для их вычисления введем в (2.7) новую переменную интегрирования ξ_1 , связанную с t' равенством

$$\xi_1^2 = l^2(t', t)[4L(t-t')]^{-1}.$$

Интегрирование по ξ_1 должно проводиться в интервале от 0 до $l(0, t)/(2\sqrt{t})$. Ввиду быстрой сходимости интеграла верхний предел можно отодвинуть на бесконечность. Тогда левая часть (2.7) принимает форму

$$\frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty e^{-\xi_1^2} \varphi(\xi_1) [2u(\xi_1) - \langle u \rangle]^{-1} d\xi_1. \quad (2.12)$$

Упростим множитель при экспоненте в (2.12), сохранив члены, содержащие производную du/dt в степени не выше первой:

$$1 + u_{th}^{-1} \left[\varphi(t) - u(t) + 2L\xi_1^2 u_{th}^{-2} \frac{du}{dt} \right]. \quad (2.13)$$

Мгновенная и средняя скорости в (2.13) заменены пороговым значением u_{th} всюду, за исключением малой разности $\varphi - u$. Подставляя (2.12) и (2.13) в (2.7), находим

$$u - \varphi = Lu_{th}^{-2} \frac{du}{dt}. \quad (2.14)$$

Аналогичные преобразования проведем для подынтегрального выражения в (2.8). После замены переменной интегрирования $t' \rightarrow \xi_2$,

$$\xi_2^2 = l^2(t', t)[4(t - t')]^{-1} + (t - t')S^{-1}, \quad (2.15)$$

используя разложения (2.10) и линеаризацию по du/dt , получаем

$$\begin{aligned} T_m(t) - \frac{\varphi}{\sqrt{\varphi^2 + 4/S}} &= -u_{th}^{-3} K \frac{du}{dt}, \\ K &= L - 1 + \frac{2}{Z}(L + 2). \end{aligned} \quad (2.16)$$

Обращение K в нуль означало бы, что в используемом разложении по du/dt нельзя ограничиться первым порядком. Поэтому (2.16) пригодно, пока K не слишком мало. Любопытно, что линия $K = 0$ при больших Z близка к границе колебательной неустойчивости для рассматриваемой волны [4]. Исключив из (2.6), (2.16) температуру T_m , заменим в полученном равенстве φ на u . Действительно, разность $\varphi - u$, согласно (2.14), пропорциональна du/dt . Но при указанной замене возникают поправки $\sim (du/dt)(u - u_{th})$, которыми вблизи порога можно пренебречь. Вводя величины

$$s = SS_{th}^{-1} - 1, \quad v = uu_{th}^{-1} - 1 \quad (2.17)$$

и сохраняя старшие члены по s и v , приходим к уравнению

$$\frac{dv}{dt} = \frac{s - 2v^2}{t_*}, \quad t_* = \frac{KZ}{u_{th}^2}. \quad (2.18)$$

При $S > S_{th}$ имеются два решения (2.18), соответствующие постоянной скорости, при этом медленная ветвь $u(S)$ неустойчива. При $S < S_{th}$ скорость со временем уменьшается и волна затухает. При $|s| \ll 1$ замедление становится малым, когда скорость приближается к u_{th} . Такая стадия медленных изменений типична для развития взрывной неустойчивости вблизи предела (см. [5]), а также для хаотических режимов с перемежаемостью [6]. Если две надпороговые области разделены подпороговым участ-

ком длиной около $u_{th}t_*|s|^{-1/2}$, затухающая волна может пройти такой участок, после чего в надпороговой области ее скорость и амплитуда восстанавливаются [7]. Такое «туннелирование» существенно влияет на поведение автоволн в околовороговых условиях. Так как всякая реальная среда неоднородна, она состоит из хаотически расположенных над- и подпороговых участков, когда средние значения ее параметров близки к пороговым. При этом условие переколяции волны не требует существования надпорогового кластера, пронизывающего всю среду. Достаточно появления небольших, но близко расположенных кластеров.

3. ФЛУКТУАЦИИ СКОРОСТИ

Рассмотрим устойчивую волну, движущуюся при постоянном $S > S_{th}$ равномерно со скоростью u_{st} , причем температура в зоне реакции равна

$$T(x = 0) = T_{st} \approx 1 - 2(Su_{st}^2)^{-1}. \quad (3.1)$$

Пусть теперь параметр S включает малую добавку, которая является случайной функцией времени,

$$\begin{aligned} S^{-1} &= S_0^{-1}[1 + y(t)], \\ \langle y(t_1)y(t_2) \rangle &= \langle y^2 \rangle \delta(t_1 - t_2), \quad \langle y^2 \rangle \ll 1. \end{aligned} \quad (3.2)$$

Тогда к левой части (2.8) добавится слагаемое

$$\begin{aligned} &- \frac{T_{st}}{2S_0\sqrt{\pi}} \int_0^t \frac{y(t') dt'}{\sqrt{t - t'}} \times \\ &\times \left\{ \int_{-\infty}^0 d\xi \exp[k_+ \xi - A(t, t', \xi)] + \right. \\ &\left. + \int_0^\infty d\xi \exp[k_- \xi - A(t, t', \xi)] \right\}, \end{aligned} \quad (3.3)$$

где

$$\begin{aligned} k_\pm &= \frac{u_{st}}{2} \pm \left(\frac{u_{st}^2}{4} + S_0^{-1} \right)^{1/2}, \\ A(t, t', \xi) &= \frac{t - t'}{S_0} + \frac{[u_{st}(t - t') - \xi]^2}{4(t - t')}. \end{aligned}$$

Соответственно, уравнение (2.18), линеаризованное вблизи u_{st} , принимает вид

$$\frac{dw}{dt} + \gamma w = -f(t), \quad (3.4)$$

где

$$w = v - v_{st}, \quad v_{st} = \sqrt{\frac{s}{2}}, \quad \gamma = 2\sqrt{2s} \frac{1}{t_*},$$

$$f(t) = \frac{8}{KS_0\sqrt{\pi}} \int_0^{(u_{st}/2)\sqrt{t}} d\zeta y(t - 4\zeta^2 u_{st}^{-2}) 2\zeta \times \\ \times \int_0^\infty \exp[-(\nu + \zeta)^2] d\nu. \quad (3.5)$$

Корреляционная функция

$$\langle w(t)w(t') \rangle = \exp[-\gamma(t+t')] \times \\ \times \int_0^t \int_0^{t'} \langle f(t_1)f(t_2) \rangle \exp[\gamma(t_1+t_2)] dt_1 dt_2 \quad (3.6)$$

с учетом (3.2) и в асимптотическом пределе больших t, t' сводится к простому выражению

$$\langle w(t)w(t') \rangle \approx \frac{1}{2} \left(\frac{u_{th}}{KS_{th}} \right)^2 \frac{\langle y^2 \rangle}{\gamma} \exp(-\gamma|t-t'|). \quad (3.7)$$

При записи коэффициентов в правой части (3.7) проведена замена $u_{st} \rightarrow u_{th}$, $S_0 \rightarrow S_{th}$. В случае тепловых флуктуаций «накачка» $\langle y^2 \rangle$ подбирается таким образом, чтобы обеспечить равновесное значение среднего квадрата отклонений для флюктуирующей величины (см. [8]). При этом $\langle y^2 \rangle \propto \gamma$. Для рассматриваемой автоволны значение $\langle y^2 \rangle$ определяется неоднородностями среды и другими источниками «шума», оно, очевидно, не зависит от γ . Нарастание флюктуаций вблизи порога ($\gamma \rightarrow 0$) связано с малой устойчивостью установившегося режима (равномерно движущейся волны) в этих условиях. Видно сходство данного эффекта с критическим поведением вблизи точки непрерывного фазового перехода. Согласно (3.7), спектр флюктуаций скорости оказывается лоренцевским с максимумом на частоте $\omega = 0$, а ширина пика $\Delta\omega = \gamma$. Существенно, что свойства флюктуаций (за исключением их интенсивности) от «шума» не зависят. Корреляционное время по мере приближения к порогу растет, тогда как для шума такое время, очевидно, остается ограниченным. Поэтому любой шум вблизи порога можно считать δ -коррелированным. Отметим также, что в отличие от фликкер-шума [9] низкочастотный пик исчезает при удалении от порога. Картина, полученная с помощью квазистационарного уравнения, учтывалась при анализе результатов численного моделирования автоволн.

4. РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Изучалась волна с узкой (но конечной) зоной реакции. Выбрано значение $L = 1$, чтобы избежать

сложнений, связанных с диффузионной неустойчивостью. Такая волна моделируется с помощью уравнений

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} + u_{tr} \frac{\partial \eta}{\partial x} - \frac{\partial^2 \eta}{\partial x^2} = \Phi(\eta, \theta), \\ \Phi(\eta, \theta) = (1 - \eta) \exp \left(\frac{\theta}{1 + \beta\theta} \right), \quad (4.1)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + u_{tr} \frac{\partial \theta}{\partial x} - \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} = Z\Phi(\eta, \theta) - \frac{\theta + Z}{S} \quad (4.2)$$

с граничными условиями

$$x = 0, \quad \eta = 0, \quad \theta = -Z; \\ x = x_0, \quad \eta = 1, \quad \frac{\partial \theta}{\partial x} = 0. \quad (4.3)$$

В (4.1)–(4.3) концентрация продукта реакции $\eta = 1 - n$, а безразмерная температура θ отсчитывается от T_b в масштабе $T_b^2 E^{-1}$, так что температуре T_0 соответствует $\theta = -Z$; $\beta = T_b/E$. Так как, в отличие от (2.5), для численного моделирования приходится брать конечный промежуток $0 < x < x_0$, граничные условия должны, по возможности, смягчать влияние концов. При достаточно большом x_0 можно ограничиться заменой условия $T(x \rightarrow \infty) = 0$ на условие $\partial\theta/\partial x = 0$ при $x = x_0$, как в (4.3). В качестве начальных условий использовалась «упрощенная» форма стационарной волны:

$$0 < x < \frac{x_0}{2}, \quad \eta = \exp \left[u_{tr} \left(x - \frac{x_0}{2} \right) \right],$$

$$\theta + Z = Z \exp \left[k_+ \left(x - \frac{x_0}{2} \right) \right],$$

$$\frac{x_0}{2} < x < x_0, \quad \eta = 1, \quad \theta + Z = Z \exp \left[k_- \left(x - \frac{x_0}{2} \right) \right],$$

$$k_\pm = \frac{u_{tr}}{2} \pm \left[\left(\frac{u_{tr}}{2} \right)^2 + S^{-1} \right]^{1/2}.$$

Такой выбор позволяет ускорить выход на стационарный (при $S > S_{th}$) или квазистационарный (при $S < S_{th}$) режим. Мгновенные значения скорости волны определялись по движению максимума функции Φ . В надпороговой области $S > S_{th}$ скорость «сноса» u_{tr} подбиралась так, чтобы по возможности уменьшить смещение $\max \Phi$ из точки $x_0/2$. В этом случае влияние концевых точек $x = 0$ и $x = x_0$ на характеристики волны было незначительно (при $x_0 = 2000$). Таким образом была найдена зависимость $u_{st}(S)$, а также характерное время выхода на установившийся режим t_r (это время определялось по моменту, в который разность между мгновенной скоростью и

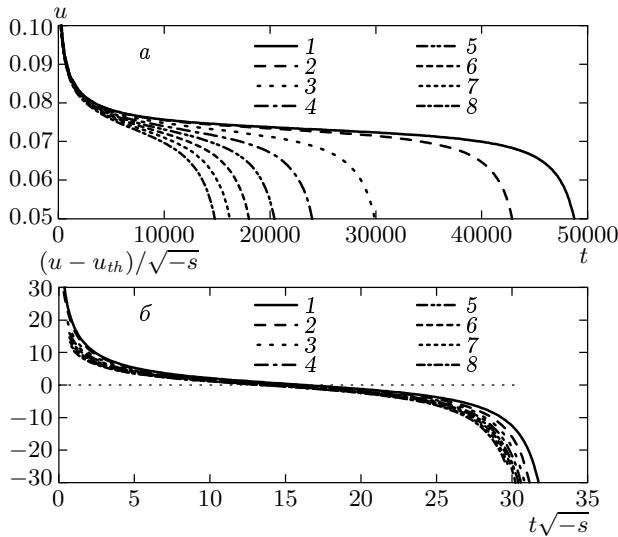


Рис. 1. Зависимость скорости затухающей автоволны от времени. а — Данные численного моделирования. Значения $10^4 S = 2.469$ (1) 2.470 (2), 2.475 (3), 2.480 (4), 2.485 (5), 2.490 (6), 2.495 (7), 2.500 (8). б — Те же кривые после масштабного преобразования, указанного на осях

u_{st} уменьшалась до $0.01 u_{st}$. Затем при $u_{tr} = u_{st}$ вводился шум в форме (3.2), причем в качестве функции $y(t)$ использовалось произведение 0.1 на случайные числа из интервала $(-1, +1)$, которые менялись на каждом шаге. Генератором случайных чисел служила встроенная подпрограмма компилятора GNU Fortran-77.

Во всех вариантах использовались значения $Z = 10$, $\beta = 0.09$. Применялась неявная схема, которая для рассматриваемой системы параболических уравнений обеспечивает устойчивость и сходимость вычислительной процедуры [10]; шаг по пространству равен 0.1, по времени — 0.2. Были также рассчитаны два варианта с пространственным шагом 0.01 для значений $10^4 S$, равных 2.3 и 2.4. Уменьшение шага не привело к существенным изменениям результатов счета: средняя мощность источника Φ в установившемся режиме сохранилась с относительной погрешностью $< 10^{-4}$. При указанных выше значениях параметров зона реакции в рассматриваемых волнах имеет ширину $b \approx 1$, а ширина зоны прогрева $Zb \approx 10$, соответствующее характерное (михельсоновское) время $\tau \approx 100$ (так как масштаб скоростей около 0.1). В результате описанной выше процедуры были получены значения $u_{th} \approx 0.073 \pm 0.001$, $S_{th} \approx 4057 \pm 1$. На рис. 1 показана зависимость $u(t)$ для ряда значений $S (< S_{th})$. Видно, как замедляется

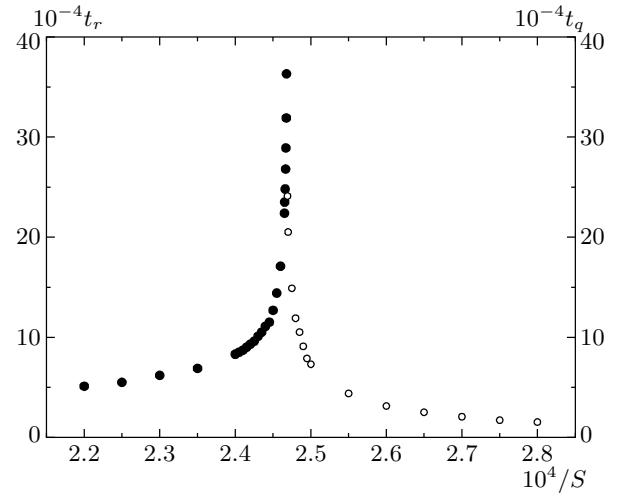


Рис. 2. Зависимость характерного времени для автоволн от расстояния до порога. Время t_r определяется по моменту, когда $u - u_{st}$ уменьшается до $0.01 u_{st}$, а время t_q — по положению точки перегиба на кривых рис. 1а (и аналогичных кривых для других значений S)

ся затухание волны по мере приближения к порогу. Это замедление, а также форма кривых находятся в согласии с решением квазистационарного уравнения (2.18) при $s < 0$:

$$v(t) = \sqrt{-\frac{s}{2}} \operatorname{ctg} \left(\frac{t}{t_*} \sqrt{-2s} + \alpha_i \right), \quad (4.4)$$

$$\alpha_i = \operatorname{arcctg} \left(v_i \sqrt{-\frac{2}{s}} \right),$$

где $v_i = v(t = 0)$. Согласно (4.4), характерное время затухания $t_q \propto (-s)^{1/2}$. Как уже отмечалось в разд. 2, такое поведение типично для развития взрывной неустойчивости, а также для режимов с перемежаемостью. После масштабного преобразования кривые сблизились, но полного слияния не произошло из-за малых неточностей при определении S_{th} , u_{th} . (Когда при расчете задают значение S , близкое к S_{th} , относительная погрешность разности этих значений, т. е. величины s , увеличивается. Аналогичное замечание справедливо для $u - u_{th}$.) В целом, согласие результатов моделирования с (4.4) удовлетворительно.

Зависимость характерного времени от S показана на рис. 2. График напоминает температурный ход восприимчивости, сечений рассеяния и т. д. в окрестности точки непрерывного фазового перехода. Однако особенность при $S = S_{th}$ носит иной характер, чем при непрерывных переходах. В последнем случае новую fazу можно получить из старой

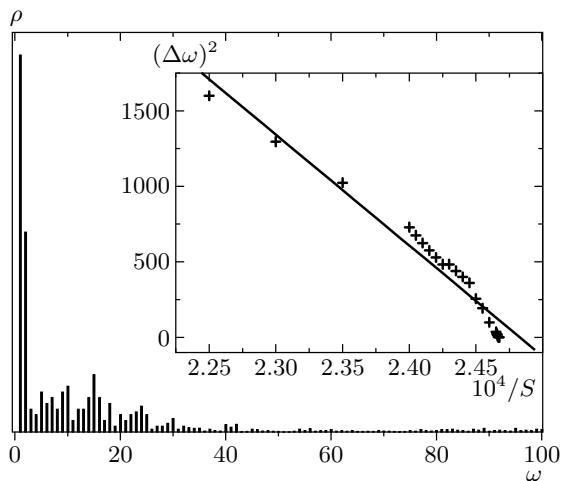


Рис. 3. Пример спектра пульсаций скорости $u(t) - u_{st}$, инициированных белым шумом. Частота ω дана в единицах $2\pi/t_0$, время счета $t_0 = 60000$. На вставке: зависимость ширины спектрального максимума $\Delta\omega$ от расстояния до порога

с помощью малой деформации. На пороге волновое решение исчезает (взрывная неустойчивость), различие старого и нового режимов конечно. Левая и правая части графика, приведенного на рис. 2, имеют различный смысл. При $S > S_{th}$ это время релаксации к установленному режиму (равномерному движению волны), а при $S < S_{th}$ — время перехода к новому режиму (в данном случае время затухания волны). Если продолжить сравнение с фазовыми переходами, то конечное различие фаз (например, по плотности) отвечает переходу первого рода. При таком переходе возможно равновесие фаз. Положение межфазной границы будет устойчивым, например, при заданных значениях температуры и объема системы. При изменении объема граница смещается, одна из фаз растет за счет другой. Без учета энергии границы переход выглядит плавным до полного исчезновения этой фазы. В действительности при достаточно малом количестве фазы она оказывается неустойчивой и исчезает скачком — порог имеет место и в этом случае. Пусть, например, капля жидкости находится в равновесии с паром. При изотермическом расширении ее радиус уменьшается из-за испарения. Когда достигается критическое значение радиуса, отвечающее неустойчивому (гиббсовскому) равновесию, капля скачком исчезает, а давление возрастает. По-видимому, при переходах первого рода околовороговую область труднее наблюдать, чем у автоволн.

Для вариантов с включением шума в форме (3.2)

роль начальных условий играл установившийся режим ($u = u_{st}$), найденный без шумовой добавки. Подсчитанное для контроля значение $\langle y^2 \rangle$ близко к теоретическому ($1/300$). При таком уровне шума и значениях L, Z , приведенных выше, флюктуационной области должны отвечать $s \leq 10^{-6}$. Эта оценка получается, если флюктуационную область определить условием $\langle w^2 \rangle \geq v_{st}^2$ — по аналогии с теорией непрерывных переходов. Величина дисперсии для пульсаций скорости, ее рост по мере приближения к порогу, полученные в ходе вычислительных экспериментов, согласуются с (3.7). Необходимо отметить, что без включенного шума наблюдаются пульсации, связанные с округлениями при счете. Они тоже нарастают при $S \rightarrow S_{th}$, оставаясь при всех S много меньше пульсаций, обусловленных вводимым шумом (отношение дисперсий не менее 10). Типичный спектр пульсаций показан на рис. 3. Частоты «линий» $\omega_n = 2\pi n/t_0$, где n — целое число, t_0 — время счета. Распределение интенсивностей по линиям соответствует сплошному спектру. Какие-либо резонансы при $\omega \neq 0$ не наблюдались. Пик на нулевой частоте сужается по мере приближения к порогу, это сужение показано на вставке к рис. 3. Время t_0 вблизи порога увеличивалось до 120 000, чтобы обеспечить условие $t_0\Delta\omega \gg 1$. Так как интенсивность спектральных линий зависит от частоты случайным образом, для определения ширины пика $\Delta\omega$ применялась следующая процедура. Вычислялась сумма интенсивностей для первых N линий. Число N увеличивалось до тех пор, пока эта сумма не переставала расти (с погрешностью $< 10^{-6}$). Пусть найденное таким образом максимальное значение суммы равно I . Тогда $\Delta\omega$ — это частота линии с номером N_1 , при котором сумма интенсивностей первых N_1 линий равна $I/2$. Для белого шума насыщения нет, $N_1 \approx N/2$, для лоренцевского спектра $\Delta\omega = \gamma \propto \sqrt{s}$. Согласно рис. 3, зависимость $(\Delta\omega)^2$ от s действительно близка к линейной: вблизи порога $S^{-1} \approx (1 - s)/S_{th}$.

Для каждого значения $S > S_{th}$ дисперсию скорости, найденную при счете с шумом, можно соотнести с временем релаксации, показанным на рис. 2. (последнее определялось, конечно, из вариантов с выключенным шумом). В приближении (3.7) обе эти величины пропорциональны $1/\gamma$. Если строить график в дважды логарифмическом масштабе, как на рис. 4, точки должны располагаться вблизи прямой с углом наклона $\pi/4$. С помощью метода наименьших квадратов получен тангенс угла наклона, который можно назвать критическим показателем, равный 0.764.

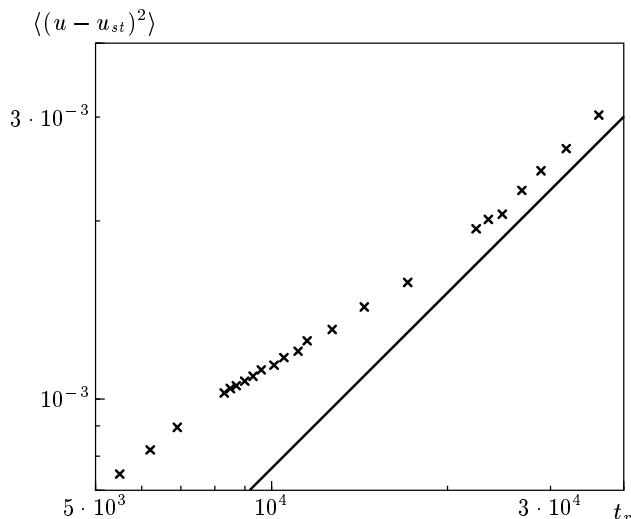


Рис. 4. Соотношение между дисперсией пульсаций скорости $\langle(u - u_{st})^2\rangle$ и временем релаксации к равномерно движущейся волне ($u = u_{st}$). Точки отвечают значениям $S = 4444, 4348, 4255, 4167, 4149, 4132, 4115, 4098, 4082, 4065, 4057$. Для удобства на рисунке помещена прямая с углом наклона $\pi/4$

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Подробный анализ результатов численного моделирования показал, что поведение скорости волн и ее флюктуаций описывается на качественном уровне квазистационарным уравнением в той области параметров, где флюктуации малы.

Если исходить из равенства $2v^2 = s$, определяющего [3] скорость стационарных волн вблизи порога, можно предположить, что малые отклонения v от v_{st} подчиняются квазистационарному уравнению (2.18). При этом, однако, параметр t_* остается неопределенным. Вывод уравнения (2.18) в рамках задачи (2.3)–(2.6) позволяет найти t_* , причем условие (2.11) оказывается выполненным. «Парabolическая» форма правой части (2.18) отвечает любому случаю взрывной неустойчивости (слияния двух ветвей решения). Установившийся режим (например, автоволна) вблизи точки слия-

ния формально устойчив к бесконечно малым возмущениям. Вместе с тем бассейн притяжения к такому режиму в пространстве состояний мал, что, как видим, ведет к росту интенсивности низкочастотных флюктуаций (мягких мод) и их корреляционного времени. В этом отношении, жесткий переход, который совершает система в результате развития взрывной неустойчивости, не отличается от мягкого. Параметры нового режима, который формируется жестким переходом, с помощью квазистационарного уравнения определить нельзя. Но вблизи точки бифуркации процесс перехода включает медленную стадию, что позволяет оценить его характерное время.

Авторы благодарны А. Г. Мержанову и Л. Н. Шуру за полезные замечания. Работа осуществлена при поддержке РФФИ (проект 01-02-17487).

ЛИТЕРАТУРА

1. В. А. Васильев, Ю. М. Романовский, В. Г. Яхно, УФН **128**, 625 (1979).
2. A. G. Merzhanov and E. N. Rumanov, Rev. Mod. Phys. **71**, 1173 (1999).
3. Я. Б. Зельдович, ЖЭТФ **11**, 159 (1941).
4. А. П. Алдушин, С. Г. Каспарян, ДАН **244**, 67 (1979).
5. А. Г. Мержанов, В. В. Барзыкин, В. Г. Абрамов, Хим. физика **15**, 3 (1996).
6. P. Manneville and Y. Pomeau, Physica D **1**, 219 (1980).
7. А. Ю. Довженко, С. В. Маклаков, Э. Н. Руманов, ДАН **374**, 321 (2000).
8. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Статистическая физика*, Наука, Москва (1995), ч. 1, с. 405.
9. M. B. Weissman, Rev. Mod. Phys. **60**, 537 (1988).
10. А. А. Самарский, *Теория разностных схем*, Наука, Москва (1989), с. 279.