



**ΕΘΝΙΚΟ ΚΑΙ ΚΑΠΟΔΙΣΤΡΙΑΚΟ ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ
ΑΘΗΝΩΝ**

**Σχολή Θετικών Επιστημών
Τμήμα Φυσικής**

**Φαινόμενα Συγχρονισμού σε Πλέγματα
Συζευγμένων Ταλαντωτών**

**Διδακτορική Διατριβή
Ευαγγελία Παναγάκου**

Τριμελής Επιβλέπουσα Επιτροπή
**Φώτιος Διάκονος, Δημήτριος Φραντζεσκάκης, Αστέρω
Προβατά**

Ιούνιος 2015

Αφιερώνεται

Στους γονείς μου Ιωάννη και Ελένη, και στον αδερφό μου Γρηγόρη.

Ευχαριστίες

Στη μακρά πορεία της εκπόνησης της παρούσας διδακτορικής διατριβής, βίωσα πολλές εμπειρίες, πάλεψα με δύσκολες καταστάσεις, γνώρισα καλύτερα τον εαυτό μου, αγωνίστηκα. Έμαθα και κατανόησα πολλές, όμορφες και πολύ ενδιαφέρουσες έννοιες της Φυσικής, συνειδητοποίησα τη σημασία της έρευνας, της εντρύφησης σε επιστημονικά προβλήματα, της ολοκληρωτικής αφοσίωσης στην επιστήμη, στην προσπάθεια, στον στόχο να βαδίσω προς την προσέγγιση της ενηλικίωσής μου ως επιστήμονα. Ταξίδεψα για να επικοινωνήσω τα αποτελέσματα της δουλειάς μου, γνώρισα άξιους ανθρώπους και όμορφα μέρη, ωρίμασα, και έφτασα εδώ, στο τέλος αυτής της διαδικασίας, της πορείας, του ταξιδιού, με εφόδια να περάσω σε μια καινούργια φάση της ζωής μου

Σε όλη αυτήν τη διαδρομή είχα οδηγούς, συνοδοιπόρους, βοηθούς, φίλους, πολλούς ανθρώπους, για τους οποίους αισθάνομαι ευγνωμοσύνη που στάθηκαν δίπλα μου όλα αυτά τα χρόνια.

Βασική οδηγός μου στο έργο αυτό υπήρξε η επιβλέπουσα της διατριβής, Δρ. Αστέρω Προβατά, την οποία θερμά ευχαριστώ για ό,τι έχει κάνει για μένα. Με εμπιστεύθηκε, αρχικά, να είμαι η φοιτήτριά της, όταν ξεκίνησα το διδακτορικό, και από τότε δουλέψαμε μαζί, για να επιτύχουμε την απρόσκοπτη ολοκλήρωση της συνεργασίας μας και την εκπόνηση της διατριβής. Με εκπαιδευσε, με βοήθησε να αναπτύξω τη σκέψη μου, να παράγω ιδέες, να ξεπεράσω τις αδυναμίες μου, να δυναμώσω την αυτοπεποίθησή μου, να ανοίξω πόρτες για την εξέλιξή μου, να μάθω να παίρνω πρωτοβουλίες ως ερευνήτρια και ως άνθρωπος, να παλεύω πιο δυνατά όταν δυσκολεύομαι, να αγαπάω τον εαυτό μου. Για όλα όσα μου προσέφερε, την ευχαριστώ από την καρδιά μου και της εύχομαι να είναι πάντα καλά, μαζί με την οικογένειά της.

Συγχρόνως χρωστάω ένα πολύ μεγάλο ευχαριστώ στους Καθηγητές μου κο Φώτη Διάκονο και κο Δημήτρη Φραντζεσκάκη. Η συνεισφορά τους υπήρξε καθοριστική για την ολοκλήρωση της διατριβής. Τους ευχαριστώ για τα εποικοδομητικά σχόλιά τους και τις συμβουλές τους σε κάθε βήμα της δουλειάς μου. Περισσότερο, όμως, απ' όλα,

τους ευχαριστώ για την εμπιστοσύνη που μου έδειξαν και την εκτίμησή τους. Από τότε που ήμουνα προπτυχιακή φοιτήτρια στο τμήμα Φυσικής, πιστέψανε σε μένα και στις δυνατότητές μου και δεν έπαψαν ποτέ να με εμπνέουν, να στοχεύω ψηλά, και να χαίρονται με την πρόοδό μου. Ο Καθ. Δ. Φραντζεσκάκης, εκτός από καθηγητής μου, υπήρξε και ο επιβλέπων καθηγητής στην πτυχιακή μου εργασία ως προπτυχιακή φοιτήτρια, και από τότε μου δίδαξε τον τρόπο να εργάζομαι, να θέτω ψηλούς στόχους και να πιστεύω στον εαυτό μου. Τον Καθ. Φ. Διάκονο τον ευχαριστώ ακόμα, που, ως ο κύριος υπεύθυνος της τριμελούς επιτροπής του διδακτορικού, με βοήθησε, ώστε όλα τα στάδια και όλες οι διαδικασίες της εκπόνησης της διατριβής να ολοκληρωθούν ομαλά και αποτελεσματικά.

Ευχαριστώ ακόμα τον Δρ. Θάνο Στούμπο, ο οποίος σαν πατέρας υπήρξε συμβουλότητάς μου στα θέματα της επιστημονικής μου πορείας και ο οποίος, επίσης, όλα τα χρόνια του διδακτορικού με εμπνέει να συνεχίζω να προσπαθώ. Επίσης, ευχαριστώ τους Δρ. Γιάννη Αλμυράντη, Δρ. Μίωβα Αξενίδη, Δρ. Γιάννη Οικονόμου, Δρ. Βασίλη Κωνσταντούδη για τις εποικοδομητικές συζητήσεις μας.

Θα ήθελα, επίσης, να ευχαριστήσω τον Καθ. Γεώργιο Μπουλουγούρη, τόσο για την επιστημονική συνεισφορά του στην εργασία "Effective mean field approach to kinetic Monte Carlo simulations in limit cycle dynamics with reactive and diffusive rewiring", όσο και για τις επιστημονικές και γενικότερες συζητήσεις μας, μέσα από τις οποίες με βοήθησε να έχω αυτοπεποίθηση και να γνωρίσω καλύτερα την ταυτότητα του υποψήφιου διδάκτορα, ως ανθρώπου ο οποίος, είναι λογικό να έχει απορίες και κενά στις γνώσεις του, αλλά δεν πρέπει ποτέ να χάνει το θάρρος να ρωτά, να ψάχνει, να ερευνά.

Περαιτέρω, θα ήθελα να ευχαριστήσω τη Δρ. Ιωάννα Χιτζανίδη, τόσο για την άριστη συνεργασία μας στη δουλειά μας "Chimera States in Population Dynamics: Networks with Fragmented and Hierarchical Connectivities", όσο και για την αλληλεπίδραση που είχαμε ως συνάδελφοι και φίλες, ως μέλη της ίδιας επιστημονικής ομάδας στο ΕΚΕΦΕ "Δημόκριτος", υπό την επίβλεψη της Δρ. Α. Προβατά.

Στο σημείο αυτό, θα ήθελα να ευχαριστήσω όλους τους συναδέλφους μου, τέως και νυν μέλη της ομάδας της Δρ. Α. Προβατά, αλλά και της γειτονικής ομάδας του Δρ. Γ. Οικονόμου, στο ΕΚΕΦΕ "Δημόκριτος". Ευχαριστώ τον Δρ. Παναγιώτη Κατσαλούλη, ο οποίος "έσωζε" τους υπολογιστές μας πολύ συχνά από διάφορα προβλήματα. Για τον ίδιο λόγο, ευχαριστώ τον τέως τεχνικό του τότε Ινστιτούτου Φυσικοχημείας του ΕΚΕΦΕ "Δημόκριτος", τον κο Απόστολο Πραγκαστή, ο οποίος, επιπρόσθετα, για πολλούς μήνες

μου είχε δανείσει δικό του φορητό υπολογιστή, για να μπορώ να συμμετέχω σε επιστημονικά συνέδρια και να παρουσιάζω τα ερευνητικά αποτελέσματα της ομάδας μας. Ευχαριστώ τη Δρ. Ελένη Ανδρουλάκη για τις συζητήσεις μας, με την οποία κοινωνούσαμε όμοιες απόψεις για διάφορα, επιστημονικά και μη, θέματα. Ιδιαίτερα ευχαριστώ την κα Νεφέλη Τσίγκρη για την αληθινή φιλία της. Με την παρουσία της την τελευταία χρονιά στον "Δημόκριτο" μετέτρεψε την καθημερινότητά μου στο ερευνητικό κέντρο σε πιο διασκεδαστική, ενώ οι φιλικές συζητήσεις μαζί της, αποσυμφορίζαν πολλές φορές τη συναισθηματική μου πίεση και έτσι μπορούσα αποτελεσματικά να συνεχίζω τη δουλειά μου απερίσπαστη.

Θα ήθελα να ευχαριστήσω και τους Γερμανούς συναδέλφους μας από το εργαστήριο "BCCN-Nachwuchsgruppe: Nonlinear Dynamics and Control in Neuroscience" του Τεχνικού Πανεπιστημίου του Βερολίνου, Δρ. Philipp Hövel, Καθ. Eckehard Schöll και Δρ. Iryna Omelchenko, για τη συνεργασία που είχαμε τον τελευταίο ενάμιση χρόνο σχετικά με τη δουλειά μας "Chimera States in Population Dynamics: Networks with Fragmented and Hierarchical Connectivities" και για τη φιλοξενία τους, όταν επισκέφτηκα το εργαστήριό τους τον Νοέμβριο του 2013.

Ακόμα, θα ήθελα να ευχαριστήσω τους Καθηγητές μου κο Αλέξανδρο Καρανίκα, κο Νίκο Τετράδη, κο Βασίλη Γεωργαλά, κο Ευστράτιο Μανουσάκη, από τους οποίους διδάχθηκα τα μεταπτυχιακά μαθήματα "Κβαντομηχανική" και "Στατιστική Φυσική", τα οποία παρακολούθησα στα πλαίσια του διδακτορικού.

Ένα μεγάλο ευχαριστώ αξίζει στον Καθηγητή του Μαθηματικού τμήματος του Πανεπιστημίου των Πατρών, κο Τάσο Μπούνη, για τα εξαιρετικά θερινά σχολεία "Mathematical Modeling of Complex Systems" που διοργανώνει, και τα οποία παρακολούθησα την περίοδο 2011-2014 και στα οποία εμπλούτισα σε μεγάλο βαθμό τις γνώσεις μου πάνω σε θέματα σχετικά με την ερευνητική μου δουλειά. Σ' αυτά τα σχολεία, παράλληλα, γνώρισα πολλούς επιστήμονες, οι οποίοι στην πορεία είτε υπήρξαν συνεργάτες μου είτε αποτέλεσαν πρότυπα για την πορεία μου.

Δεν ξεχνώ να ευχαριστήσω την αγαπημένη μου κα Ελένη Χολέβα, η οποία, ως μέλος του Γραμματειακού Δυναμικού του τμήματος Φυσικής, συντέλεσε και αυτή, με τον τρόπο της, στην ολοκλήρωση των διαδικαστικών εργασιών σχετικά με τη διατριβή μου.

Αισθάνομαι συγκίνηση και δέος, όταν αναλογίζομαι τον πολύ σημαντικό ρόλο που έχει διαδραματίσει στην πορεία μου, ο Καθηγητής στο Ανοικτό Πανεπιστήμιο της Αγγλίας, υπεύθυνος του εργαστηρίου "Centre for Complexity and Design", κος Jeff

Johnson, ο οποίος με έχει χρίσει μέλος της ομάδας του στο Ανοιχτό Πανεπιστήμιο, μου έχει δώσει τη δυνατότητα να συνεργάζομαι μαζί του στην προσπάθειά του να αναπτύξει τον τρόπο διδασκαλίας των Πολύπλοκων Συστημάτων, και ο οποίος χρηματοδότησε, μέσω διαφόρων προγραμμάτων, τη συμμετοχή μου σε πολλά από τα συνέδρια και σχολεία που παρακολούθησα ως υποψήφια διδάκτορας, αλλά και τα σχετικά έξοδα μετακίνησης και διαμονής. Δε θα ήταν υπερβολή, αν ομολογούσα ότι αποτελεί για μένα "αμετακίνητο βράχο" θέλησης, προσφοράς, αγάπης προς τους νέους οραματιστές, υποδειγματικής και συνεχούς υποκίνησης για αδιάλειπτο αγώνα σ' όσους αγαπούν πραγματικά τη δημιουργία.

Ευχαριστώ επίσης τη Φιλόλογο κα Νόρα Κοντογιάννη, η οποία με συμβούλεψε ως προς την ορθογραφία του κειμένου της διατριβής, αλλά και για τις γνώσεις και την αγάπη που απλόχερα μου έχει προσφέρει από τότε που ως έφηβη υπήρξα μαθήτριά της. Η διδαχή κοντά της με καθόρισε ως άνθρωπο και αποτέλεσε σταθμό στη ζωή μου.

Ευχαριστώ ακόμα τους δασκάλους μου Κάτια, Σπύρο και Γιώργο που μου έμαθαν να ακούω την καρδιά μου και με βοήθησαν με αυτόν τον τρόπο να βαδίζω στέρεα στο ταξίδι του διδακτορικού.

Ευχαριστώ πολύ και τη φίλη μου κα Ειρήνη Λούκου, γιατί από την πρώτη στιγμή στάθηκε δίπλα μου και γιατί, οι όμορφες στιγμές που έχουμε μοιραστεί, μου έδιναν πάντα ανάσα ανεφοδιασμού για την εντονότερη αφοσίωσή μου στο διδακτορικό.

Ευχαριστώ ακόμα τον συνάδελφό μου Δρ. Matteo Chinazzi για τις παραγωγικές συζητήσεις μας σε σχέση με την ερευνητική μου δουλειά, για την εκπαιδευτική βοήθεια που μου πρόσφερε σε θέματα προγραμματισμού, αλλά και για την ψυχολογική στήριξη που μου παρείχε με τη στάση του.

Ευχαριστώ την ευρύτερη οικογένειά μου, της οποίας τα μέλη, με την αγάπη τους και τον τρόπο τους το καθένα, με στήριξαν ουσιαστικά όλα αυτά τα χρόνια.

Τέλος, ευχαριστώ με όλη μου την καρδιά, τον αδελφό μου Γρηγόριο, τη μητέρα μου Ελένη και τον πατέρα μου Ιωάννη, γιατί σ' αυτούς χρωστώ ό,τι είμαι και ό,τι έχω καταφέρει έως σήμερα. Οι θυσίες που χωρίς δισταγμό πραγματοποίησαν και η αφοσίωσή τους, από κάθε άποψη, στη διαπαιδαγώγισή μου, στη διαμόρφωση της προσωπικότητάς μου, στην καθοδήγηση της σκέψης μου, στην απελευθέρωση του πνεύματός μου και στην προστασία, την εκδήλωση και τη θρέψη της ψυχής μου, αποτελούν τμήματα της τεράστιας προσφοράς τους σε μένα. Η διαρκής στήριξή τους, οικονομική, πρακτική, συμβουλευτική, ψυχολογική, με βοήθησε να μπορέσω να αφοσιωθώ στο έργο που είχα

αναλάβει να εκπληρώσω, και η αγάπη τους αυτή αναζωπύρωνε τη δική μου αγάπη για τη δουλειά μου και με δυνάμωνε στην προσπάθειά μου να εξακολουθώ να οραματίζομαι και να αντέχω με πείσμα εκείνες τις στιγμές τις δύσκολες που αντιμετωπίζει ο υποψήφιος διδάκτορας. Η αγωγή και οι αρχές, που μου δώσανε από τότε που ήμουνα μικρή, αποδείχθηκαν πολύτιμοι συνοδοιπόροι μου, και η αγάπη για την επιστήμη, τη φύση, τον άνθρωπο, τη ζωή, που μου εμφύσησαν από τότε που γεννήθηκα, υπήρξε ο κύριος οδηγός μου στην πορεία μου.

Ελληνική Περίληψη

Στην παρούσα διδακτορική διατριβή μελετώνται φαινόμενα συγχρονισμού και σχηματισμοί δομών που εμφανίζονται όταν πολλοί ταλαντωτές – αντιδρώντα συζεύγνυνται μεταξύ τους σε ένα πλεγματοεικό δίκτυο ή σε ένα σειριακό σχηματισμό. Οι μέθοδοι προσομοίωσης που χρησιμοποιούνται είναι η Kinetic Monte Carlo και η αριθμητική ολοκλήρωση κατά Euler. Η μελέτη πραγματοποιείται για το μοντέλο του Πλεγματοεικού Οριακού Κύκλου (ΠΟΚ) ή Lattice Limit Cycle (LLC), ένα μη-γραμμικό δυναμικό σύστημα τέταρτης τάξης το οποίο περιγράφει αλληλεπιδράσεις γεννέσεως-θανάτου (birth-and-death), σε κυκλικό σχηματισμό.

Η διατριβή αποτελείται από έξι κεφάλαια.

Στο εισαγωγικό (πρώτο) κεφάλαιο παρουσιάζονται τα κίνητρα για τη μελέτη των φαινομένων συγχρονισμού, γίνεται εκτενής αναφορά στην πρόσφατη βιβλιογραφία και εισάγονται θεωρητικές έννοιες, όπως οι εξισώσεις αντίδρασης-διάχυσης, οι μορφοκλασματικές δομές καθώς και τα δίκτυα, που λειτουργούν ως βάση για τη μελέτη των φαινομένων συγχρονισμού και της δημιουργίας χωροχρονικών δομών.

Στο δεύτερο κεφάλαιο εισάγεται το μοντέλο LLC, αναλύονται σε βάθος τα χαρακτηριστικά του μοντέλου και περιγράφεται ο αλγόριθμος που το προσομοιώνει. Παρουσιάζεται πώς η δυναμική του συστήματος διαφέρει από την πρόβλεψη της θεωρίας του Μέσου Πεδίου όταν περιορίζεται σε μικρές χωρικές διαστάσεις, τόσο εξαιτίας των περιορισμών που προκύπτουν από τη χωρική διάταξη, όσο και λόγω του περιβαλλοντικού θορύβου που εισάγεται με τη μέθοδο προσομοίωσης αλλά και από τις αρχικές συνθήκες.

Στο τρίτο κεφάλαιο προτείνεται μία μέθοδος σύγκρισης της συμπεριφοράς του συστήματος στο Μέσο Πεδίο με τις προσομοιώσεις Monte Carlo, λαμβάνοντας υπ'όψη τη στοχαστικότητα της μεθόδου προσομοίωσης και τις συνέπειες αυτής. Επιλέγοντας είτε την περίπτωση αλληλεπιδράσεων μικρής απόστασης (κοντινών γειτόνων) είτε την

περίπτωση μεγάλης απόστασης και εφαρμόζοντας σύζευξη αντίδρασης ή διάχυσης γίνεται ο υπολογισμός ενεργών παραμέτρων οι οποίες επιτρέπουν μία "ενεργό" περιγραφή Μέσου Πεδίου. Οι αριθμητικές μας προσομοιώσεις δείχνουν ότι όταν η σύζευξη είναι του τύπου αντίδρασης σε μικρή ή μεγάλη κλίμακα και όταν οι ρυθμοί των αντιδράσεων αντικατασταθούν από τις ενεργές τιμές αυτών τότε οι μέσες συγκεντρώσεις των αντιδρώντων μπορούν σωστά να προβλεφθούν από τις εξισώσεις του Μέσου Πεδίου. Δεν ισχύει όμως το ίδιο όταν η σύζευξη είναι του τύπου διάχυσης, καθώς η διάχυση δεν προβλέπεται στις εξισώσεις του Μέσου Πεδίου.

Στο τέταρτο κεφάλαιο παρουσιάζεται η μέθοδος αφηρημένου σταθμισμένου δικτύου για την περιγραφή των διεργασιών που λαμβάνουν χώρα στο LLC σύστημα. Ο χώρος φάσεων των μεταβλητών χωρίζεται σε ένα διακριτό αριθμό διαμερίσεων, τα οποία αποτελούν τους κόμβους του αφηρημένου δικτύου. Η δυναμική του συστήματος καθορίζει τις μεταβάσεις μεταξύ των κόμβων και οδηγεί στο σχηματισμό των συνδέσμων μεταξύ των κόμβων. Έτσι οι ιδιότητες του αφηρημένου δικτύου αντικατοπτρίζουν τη δυναμική του LLC συστήματος. Τα στοιχεία του πίνακα μεταβάσεων υπολογίζονται μέσω προσομοιώσεων Kinetic Monte Carlo. Οι υπολογισμοί μας δείχνουν ότι για το LLC μοντέλο η κατανομή του βαθμού του δικτύου ακολουθεί νόμο δύναμης με εκθέτη ~ -1 , ενώ ο μέσος συντελεστής συσσωμάτωσης ακολουθεί πάλι νόμο δύναμης με εκθέτη ~ -1.46 . Οι εκθέτες αυτοί ταξινομούν το αφηρημένο δίκτυο στην κατηγορία των δικτύων ελεύθερης κλίμακας και επιβεβαιώνουν παλαιότερες μελέτες που δείχνουν το σχηματισμό χωρικών μορφοκλασματικών δομών εξαιτίας της στοχαστικότητας της μεθόδου προσομοίωσης και της συσσωμάτωσης όμοιων αντιδρώντων.

Στο πέμπτο κεφάλαιο παρουσιάζεται η διερεύνηση εμφάνισης καταστάσεων χίμαιρας, δηλαδή η ταυτόχρονη συνύπαρξη συγχρονισμένων και ασυγχρόνιστων ταλαντωτών τύπου LLC, όταν αυτοί συζεύγνυνται σε σχηματισμό δακτυλίου. Μελετάται το εύρος τιμών των παραμέτρων ελέγχου, οι οποίες σε αυτήν την περίπτωση είναι α) ο ρυθμός της βασικής αντίδρασης του μοντέλου, που χρησιμοποιείται και ως η παράμετρος διακλάδωσης του συστήματος και β) ο αριθμός των συζευγμένων γειτόνων. Για ένα εύρος τιμών των παραμέτρων του συστήματος εμφανίζονται χιμαιρικές καταστάσεις και υπολογίζεται ένα μέγεθος που χαρακτηρίζει αυτές τις καταστάσεις, η μέση φασική ταχύτητα (mean phase velocity profile). Τα αριθμητικά μας αποτελέσματα υποδεικνύουν ότι καθώς η παράμετρος ελέγχου τείνει στο κρίσιμο σημείο της διακλάδωσης (Hopf) οι ασυγχρόνιστες περιοχές επεκτείνονται, ενώ το πλάτος των σχηματισμών μειώνεται δραστικά για να μηδενιστεί πάνω στο κρίσιμο σημείο.

Στο τελευταίο κεφάλαιο αναλύονται συνολικά τα συμπεράσματα της διατριβής και προτείνονται ιδέες προς υλοποίηση στο μέλλον.

Αγγλική Περίληψη

In this thesis we study synchronization phenomena and pattern formation emerging when many oscillators representing birth-and-death processes are coupled in a lattice network or in a serial topology. The simulation methods used are the Kinetic Monte Carlo and the Euler numerical integration. The oscillators follow the Lattice Limit Cycle (LLC) model, a nonlinear dynamical system of fourth order, which describes birth-and-death interactions in a cyclic order.

The thesis is divided in six chapters.

In the introductory (first) chapter we present the motivation to study synchronization phenomena, we give a lengthy account on the current literature and we introduce theoretical principles and concepts necessary for the description of synchronization phenomena and spatiotemporal pattern formation.

In the second chapter we introduce the LLC model, we analyze in depth its properties and we describe the Kinetic Monte Carlo algorithm which simulates the model. We present how the dynamics of the system deviates from the prediction of the Mean Field theory when the system is restricted on a low-dimensional support, due to the constraints imposed by the spatial support and to the environmental noise induced by the simulation method and the initial conditions.

In the third chapter we propose an effective Mean Field method to describe the Kinetic Monte Carlo simulation results, taking into account the stochasticity of the simulation method and its consequences. We let the system interact in small and large scales and we impose reactive or diffusive coupling. We calculate effective parameters which allow for an effective Mean Field description. Our numerical simulations show that when the coupling is reactive and when the reaction rates are changed to the effective ones, then both in small and large distances the mean concentrations of the reactants are correctly predicted by the Mean Field equations. The effective Mean Field description does not

hold in the case of diffusive coupling (of short or long distance), since the diffusive coupling is not accounted for in the Mean Field equations.

In the fourth chapter we present the method of an abstract weighted network for the description of the processes taking place in the LLC system. The phase space of the variables is partitioned in a discrete number of sites which form the nodes of the corresponding abstract network. The dynamics of the system determines the transitions between the nodes and leads to the formation of the links between the nodes. This way the dynamics of the LLC system is mirrored by the properties of the abstract network. The elements of the transition matrix of the network are computed via Kinetic Monte Carlo simulations. The numerical simulations show that the LLC network's degree distribution follows a power law with exponent ~ -1 , while the mean clustering coefficient also follows a power law with exponent ~ -1.46 . These exponents classify this abstract network in the category of the scale free networks and verify earlier studies which show the formation of spatial fractals due to the stochasticity of the simulation method and the clustering of similar reactants.

In the fifth chapter we investigate the appearance of chimera states, i.e. the coexistence of synchronous and asynchronous LLC oscillators, when nonlocally coupled on a ring topology. We investigate the range of the control parameters which support the existence of chimera states: a) the rate of the fourth order reactive step, which serves as the bifurcation parameter of the system and b) the number of coupled neighbors. For a range of the system's parameters, the existence of chimera states is obtained. Especially multi-chimera states are observed. We calculate the mean phase velocity of the coupled oscillators, a characteristic measure of the chimera states. Our numerical results suggest that as the control parameter approaches the critical bifurcation point the incoherent regions expand while their amplitude shrinks until it reaches zero, right on the critical point.

In the last chapter we recapitulate the main conclusions of this thesis and we discuss open problems for future studies.

Περιεχόμενα

Αφιερώνεται	i
Ευχαριστίες	ii
Ελληνική Περίληψη	vii
Αγγλική Περίληψη	x
Περιεχόμενα	xii
Κατάλογος Σχημάτων	xv
1 Εισαγωγή	1
1.1 Κίνητρο	2
1.2 Συστήματα Αντίδρασης-Διάχυσης	5
1.3 Μορφοκλασματικές Δομές	7
1.4 Κλασσικό μοντέλο θηρευτή-θηράματος Lotka - Volterra (LV)	9
1.5 Πλεγματικό Μοντέλο Lotka-Volterra - LLV	12
1.5.1 Εξισώσεις Μέσου Πεδίου για το LLV	13
1.5.2 Συμπεριφορά των συγκεντρώσεων στο Μέσο Πεδίο	13
1.6 Η μέθοδος προσομοίωσης Kinetic Monte Carlo (KMC)	15
1.7 Δίκτυα και χαρακτηριστικά τους	17
1.7.1 Ορισμός Δικτύου	17
1.7.2 Κατηγορίες Δικτύων	18
1.7.3 Αφηρημένα Δίκτυα Δυναμικών Συστημάτων Αντίδρασης	20
1.7.4 Πίνακας Μεταβάσεων	21
1.7.5 Χαρακτηριστικά Μεγέθη Δικτύων	21
1.7.6 Πώς η Δυναμική του Συστήματος Επηρεάζει τη Μορφή του Πίνακα Μεταβάσεων στην περίπτωση Αφηρημένων Δικτύων	24
1.8 Θεωρητική Προσέγγιση Γράφου για την Ανάλυση της Άρχουσας Εξί- σωσης στο Μέσο Πεδίο	25
1.9 Σύζευξη ταλαντωτών - Συγχρονισμός Ταλαντωτών	26
1.9.1 Είδη Σύζευξης Ταλαντωτών σε Τοπολογία Δακτυλίου	26
1.9.2 Συγχρονισμός και Χαρακτηριστικά Μεγέθη του	27
1.10 Το Φαινόμενο Συγχρονισμού "Χίμαιρα"-Χιμαιρικές Καταστάσεις	28

1.11	Δομή της Διατριβής	30
2	Το Πλεγματικό μοντέλο Οριακού Κύκλου (LLC)	32
2.1	Δομή του Κεφαλαίου	32
2.2	Το Πλεγματικό Μοντέλο Οριακού Κύκλου	32
2.3	Η Κλασσική Θεωρία Μέσου Πεδίου	34
2.4	Αλγόριθμος KMC για το μοντέλο LLC	38
2.5	Συμπεράσματα	43
3	Ενεργές Παράμετροι, Αντίδραση και Διάχυση Μεγάλης Απόστασης στο μοντέλο LLC	45
3.1	Δομή του Κεφαλαίου	45
3.2	Προσέγγιση Μέσου Πεδίου με τη χρήση Ενεργών Παραμέτρων	45
3.3	Αντίδραση Μεγάλης Απόστασης	48
3.4	Διάχυση Μεγάλης Απόστασης	53
3.5	Συμπεράσματα	56
4	Το LLC ως Αφηρημένο Δίκτυο Κόμβων	58
4.1	Δομή του Κεφαλαίου	58
4.2	Εισαγωγικά Στοιχεία	58
4.3	Αναπαράσταση των διαδικασιών αντίδρασης από ένα αφηρημένο δίκτυο	59
4.4	Υπολογισμός των Χαρακτηριστικών του Αφηρημένου Δικτύου	60
4.5	Συμπεράσματα	68
5	Χιμαιρικές Καταστάσεις στο μοντέλο Πλεγματικού Οριακού Κύκλου	69
5.1	Δομή του Κεφαλαίου	69
5.2	Το LLC ως πρότυπο για τη μελέτη των χιμαιρικών καταστάσεων	69
5.3	Δομή της διάταξης προς ανάλυση	71
5.4	Μέθοδος Ολοκλήρωσης	72
5.5	Μεταβάλλοντας το εύρος σύζευξης R	74
5.6	Μεταβάλλοντας την παράμετρο διακλάδωσης p_1	77
5.7	Συμπεράσματα	80
6	Συμπεράσματα-Ιδέες για Μελλοντική Μελέτη	86
6.1	Συμπεράσματα	86
6.2	Ανοιχτά Προβλήματα	89
	Παράρτημα Α - Υπολογισμός των Σημείων Ισορροπίας του Μοντέλου LLC	92
	Παράρτημα Β - Ανάλυση Ευστάθειας των Λύσεων του Συστήματος LLC	94
	Παράρτημα Γ - Αλγόριθμοι	100
	Βιβλιογραφία	119

Βιογραφικό

133

Κατάλογος σχημάτων

1.1	Μοντέλο Lotka-Volterra. Το διάγραμμα φάσης του συστήματος για $r_1 = 0.5$, $r_2 = 1.0$ και $r_3 = 0.8$ και για διάφορες αρχικές συνθήκες (x_0, y_0) .	11
1.2	Μοντέλο Lotka-Volterra. Οι συγκεντρώσεις x και y ως συνάρτηση του χρόνου για $r_1 = 0.5$, $r_2 = 1.0$ και $r_3 = 0.8$. Αριστερά οι αρχικές συνθήκες είναι $(x_0, y_0) = (1.90, 0.45)$. Δεξιά οι αρχικές συνθήκες είναι $(x_0, y_0) = (0.33, 0.33)$.	11
1.3	Μοντέλο LLV. Το διάγραμμα φάσης του συστήματος για $r_1 = r_2 = r_3 = 1.0$ και για διάφορες αρχικές συνθήκες (x_0, y_0) .	14
1.4	Μοντέλο LLV. Οι συγκεντρώσεις x και y ως συνάρτηση του χρόνου για $r_1 = r_2 = r_3 = 1.0$. Αριστερά οι αρχικές συνθήκες είναι $(x_0, y_0) = (0.58, 0.23)$. Δεξιά οι αρχικές συνθήκες είναι $(x_0, y_0) = (0.33, 0.33)$.	15
1.5	Τυχαίο Παράδειγμα Δικτύου. Οι κόμβοι συμβολίζονται με κόκκινους κύκλους και οι σύνδεσμοι με μαύρα τόξα. Σε κάθε σύνδεσμο υπάρχουν ένα ή δύο βέλη, αναλόγως αν η σύνδεση είναι μονόδρομη ή αμφίδρομη.	19
1.6	Είδη Σύζευξης Ταλαντωτών σε Τοπολογία Δακτυλίου. Αριστερά η τοπική σύζευξη, στο κέντρο η ολική σύζευξη και δεξιά η μη τοπική σύζευξη. Το σύνολο των ταλαντωτών είναι N . Στην περίπτωση της μη τοπικής σύζευξης, δεξιά, οι συζευγένοι γείτονες είναι R από τα δεξιά και R από τα αριστερά.	26
2.1	Το διάγραμμα φάσης του συστήματος για $p_1 = 30$, $p_2 = 0.5$ και $p_3 = 0.8$.	36
2.2	Ο οριακός κύκλος του συστήματος για τρεις διαφορετικές τιμές της παραμέτρου διακλάδωσης p_1 . Η κόκκινη γραμμή αντιστοιχεί σε $p_1 = 10$ η μπλε γραμμή αντιστοιχεί σε $p_1 = 30$ και η μαύρη γραμμή αντιστοιχεί σε $p_1 = 300$. Οι άλλες παράμετροι και στις τρεις περιπτώσεις είναι $p_2 = 0.5$ και $p_3 = 0.8$.	37
2.3	Οι ταλαντώσεις της συγκέντρωσης x στο Μέσο Πεδίο. Το πλάτος τους εξαρτάται από την παράμετρο διακλάδωσης, p_1 . Η κόκκινη γραμμή αντιστοιχεί σε $p_1 = 10$ η μπλε γραμμή αντιστοιχεί σε $p_1 = 30$ και η μαύρη γραμμή αντιστοιχεί σε $p_1 = 300$. Οι άλλες παράμετροι και στις τρεις περιπτώσεις ισούνται με $p_2 = 0.5$ και $p_3 = 0.8$.	38
2.4	Παράδειγμα τρόπου πραγματοποίησης των αντιδράσεων, σε τοπικό επίπεδο, στο πλέγμα. Αριστερά φαίνεται η αρχική κατάσταση κάποιων τυχαία επιλεγμένων σωματιδίων στο πλέγμα και αριστερά φαίνεται η τελική τους κατάσταση, αφού έχουν πραγματοποιηθεί οι αντίστοιχες αντιδράσεις.	40

- 2.5 Χρονική εξέλιξη της συγκέντρωσης x στο μοντέλο LLC για τιμές των παραμέτρων $p_1 = 0.9585$, $p_2 = 0.016$, $p_3 = 0.026$ και μέγεθος πλέγματος $L = 2^7$. Η συνεχής μαύρη γραμμή αναπαριστά την ολοκλήρωση στο Μέσο Πεδίο με καθαρά περιοδική ταλάντωση, ενώ η παχιά κόκκινη γραμμή αναπαριστά την προσομοίωση KMC με ακανόνιστη διαλειπτική ταλάντωση. 41
- 2.6 Χρονοσειρά της μέσης συγκέντρωσης του είδους X (δηλαδή της συγκέντρωσης $x(t)$) για διαφορετικά πλεγματικά μεγέθη. Παρατηρούνται διαλειπτικές ταλαντώσεις. Οι τιμές των παραμέτρων είναι $p_1 = 0.9585$, $p_2 = 0.016$ και $p_3 = 0.026$. Η διακεκομμένη μαύρη γραμμή δηλώνει τη θέση της κατάστασης ισορροπίας στο Μέσο Πεδίο, σύμφωνα με την Εξ. 2.6. 42
- 2.7 Αναπαραστατικά στιγμιότυπα της χρονικής μεταβολής των συγκεντρώσεων των ειδών στο σύστημα. Το κόκκινο χρώμα συμβολίζει το είδος X (θήραμα), το κίτρινο χρώμα συμβολίζει το είδος Y (κυνηγός), ενώ το μαύρο χρώμα συμβολίζει το πλασματικό είδος S . Οι χρόνοι σημειώνονται και στα διαγράμματα: α) $T = 0MCS$, β) $T = 10000MCS$, γ) $T = 20000MCS$ και δ) $T = 50000MCS$ 44
- 3.1 Μέση "ενεργός" πιθανότητα αντίδρασης p'_1 ως συνάρτηση της επιβεβλημένης αρχικά πιθανότητας αντίδρασης p_1 . Οι τιμές των άλλων παραμέτρων είναι: $p_2 = 0.016$ και $p_3 = 0.026$ και το μέγεθος του συστήματος είναι $L = 2^9$. Ο μέσος όρος υπολογίζεται πάνω σε 10 προσομοιώσεις του συστήματος. Οι γραμμές σφάλματος στις τιμές p'_1 είναι της τάξης του 4×10^{-4} 47
- 3.2 Μέση "ενεργός" συγκέντρωση x'_1 (κόκκινη γραμμή με σταυρούς) και μέση KMC μερική συγκέντρωση $\langle x \rangle$ (μαύρη γραμμή με κύκλους) ως συνάρτηση της επιβεβλημένης σύζευξης αντίδρασης (reactive coupling) p_1 . Προς σύγκριση, σχεδιάζεται επίσης και η μερική συγκέντρωση Μέσου Πεδίου x (χρησιμοποιώντας τις αρχικές τιμές p_i). Οι τιμές των άλλων παραμέτρων είναι: $p_2 = 0.016$ και $p_3 = 0.026$ και το μέγεθος του συστήματος είναι: $L = 2^9$. Οι μέσες τιμές $\langle x \rangle$, $\langle x' \rangle$ έχουν υπολογιστεί πάνω σε δέκα προσομοιώσεις. 48
- 3.3 Παράδειγμα τρόπου πραγματοποίησης των αντιδράσεων μεγάλης απόστασης στο πλέγμα. Συγκεκριμένα αναπαριστά πώς γίνεται η αντίδραση 2.1.α. Το πλέγμα κάθε στιγμή είναι γεμάτο με X , Y και S , αλλά εδώ επικεντρωνόμαστε στο τί συμβαίνει σε ένα τυχαίο σωματίδιο X . Στα αριστερά φαίνεται η αρχική κατάσταση και στα δεξιά η τελική κατάσταση. 49
- 3.4 Μερική συγκέντρωση του X ως συνάρτηση του ρυθμού επανασύνδεσης r . Η μαύρη συνεχής γραμμή δείχνει τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων KMC , ενώ η κόκκινη διακεκομμένη γραμμή δείχνει την ενεργό συγκέντρωση του Μέσου Πεδίου x . Οι τιμές των παραμέτρων είναι: $(p_1, p_2, p_3) = (0.95, 0.016, 0.026)$ και το μέγεθος του συστήματος είναι $L = 2^9$. Οι μέσοι όροι υπολογίζονται από δέκα προσομοιώσεις, και τα σφάλματα φαίνονται επίσης στο σχήμα. 51
- 3.5 Η παράγωγος dx^{mod}/da ως συνάρτηση του a 52

- 3.6 Παράδειγμα τρόπου πραγματοποίησης της διάχυσης μεγάλης απόστασης στο πλέγμα σύμφωνα με τον αλγόριθμο KMC. Ολόκληρο το πλέγμα είναι γεμάτο από σωματίδια X , Y και S , αλλά εδώ επικεντρωνόμαστε σε δύο σωματίδια που έχουν επιλεγεί τυχαία. Η αρχική κατάσταση φαίνεται στα αριστερά και η τελική κατάσταση φαίνεται στα δεξιά. Τα δύο σωματίδια ανταλλάσσουν τις θέσεις τους σε μεγάλη απόσταση μέσα στο πλέγμα. 54
- 3.7 Μέση μερική συγκέντρωση x ως συνάρτηση της σύζευξης διάχυσης μεγάλης απόστασης (diffusive coupling) p_d . Η μαύρη συνεχής γραμμή παριστάνει τα αποτελέσματα των KMC προσομοιώσεων και η κόκκινη διακεκομμένη γραμμή παριστάνει την "ενεργό" τιμή Μέσου Πεδίου της x . Οι τιμές των παραμέτρων είναι $(p_1, p_2, p_3) = (0.95, 0.016, 0.026)$ και το μέγεθος του συστήματος είναι $L = 2^9$. Οι μέσοι όροι υπολογίζονται από 10 τρεξίματα. Είναι εμφανή και τα αντίστοιχα σφάλματα. 56
- 4.1 Εικονική αναπαράσταση του χώρου φάσεων διαμερισμένου σε κελία n διαστάσεων. Υπό την επίδραση της δυναμικής του συστήματος, η τροχιά του κινείται από ένα κελίο σε άλλο. 61
- 4.2 Η κατανομή μεγέθους των στοιχείων του πίνακα μετάβασης M_{ij} στις μονοδιάστατες αναπαραστάσεις του φασικού χώρου: α) Κατανομή μεγέθους των στοιχείων του πίνακα μετάβασης ως προς τη μεταβλητή x . Η συνεχής ευθεία γραμμή παριστά ακριβή νόμο δύναμης με εκθέτη -1 . β) Αθροιστική κατανομή μεγέθους των στοιχείων του πίνακα μετάβασης για τη μεταβλητή x . Η συνεχής γραμμή επαληθεύει τη λογαριθμική εξάρτηση. γ) Κατανομή μεγέθους των στοιχείων του πίνακα μετάβασης ως προς τη μεταβλητή y . Η συνεχής ευθεία γραμμή παριστά ακριβή νόμο δύναμης με εκθέτη -1 . δ) Αθροιστική κατανομή μεγέθους των στοιχείων του πίνακα μετάβασης για τη μεταβλητή y . Η συνεχής γραμμή επαληθεύει τη λογαριθμική εξάρτηση. Οι τιμές των παραμέτρων είναι και πάλι $p_1 = 0.9585, p_2 = 0.016, p_3 = 0.026$. Το μέγεθος του πλέγματος είναι $L \times L = 2^8 \times 2^8$. Ο χρόνος προσομοίωσης είναι $T = 5 \cdot 10^7$ MCS. 63
- 4.3 Η κατανομή μεγέθους των στοιχείων του σύνθετου πίνακα μετάβασης M_{ij} στη διδιάστατη αναπαράσταση του φασικού χώρου. Η συνεχής ευθεία γραμμή επαληθεύει νόμο δύναμης με εκθέτη -1.08 . Οι τιμές των παραμέτρων είναι ξανά $p_1 = 0.9585, p_2 = 0.016, p_3 = 0.026$ και το μέγεθος του συστήματος $L \times L = 2^8 \times 2^8$. Ο χρόνος προσομοίωσης είναι της τάξης των $5 \cdot 10^7$ MCS. 65
- 4.4 Η αθροιστική κατανομή του βαθμού των κόμβων του δικτύου στη διδιάστατη αναπαράσταση του φασικού χώρου. Οι τιμές των παραμέτρων είναι ξανά $p_1 = 0.9585, p_2 = 0.016, p_3 = 0.026$ και το μέγεθος του συστήματος $L \times L = 2^8 \times 2^8$. Ο χρόνος προσομοίωσης είναι της τάξης των $5 \cdot 10^7$ MCS. 66
- 4.5 Ο μέσος συντελεστής συσσωμάτωσης ως συνάρτηση του μεγέθους του δικτύου. Οι τιμές των παραμέτρων είναι ξανά $p_1 = 0.9585, p_2 = 0.016, p_3 = 0.026$ και το μέγεθος του συστήματος $L \times L = 2^8 \times 2^8$. Ο χρόνος προσομοίωσης είναι της τάξης των $5 \cdot 10^7$ MCS. 67

5.1	Η διάταξη των ταλαντωτών του συστήματος. Οι N ταλαντωτές βρίσκονται σε δομή δακτυλίου. Κάθε ταλαντωτής εσωτερικά αποτελεί ένα σύστημα ΠΟΚ (LLC) όπως το έχουμε μελετήσει στο πρώτο κεφάλαιο. Επίσης κάθε ταλαντωτής είναι συζευγμένος, με γραμμική σύζευξη, με R γείτονες από τα δεξιά και R γείτονες από τα αριστερά του.	70
5.2	Χιμαιρικές καταστάσεις στο Μοντέλο LLC. Προφίλ των συγκεντρώσεων x σε όλους τους ταλαντωτές: α) για $R = 100$, γ) για $R = 340$. Αντίστοιχα προφίλ της μέσης φασικής ταχύτητας: β) για $R = 100$, δ) για $R = 340$. Χρόνος ολοκλήρωσης $t = 5000$ ($n = 50$). $N = 1000$, $\sigma = 0.015$, $p_1 = 300$, $p_2 = 0.5$ και $p_3 = 0.8$	73
5.3	Ένα στιγμιότυπο (x, y) στο συζευγμένο σύστημα (κόκκινοι σταυροί) και ο οριακός κύκλος στο αρχικό, μη συζευγμένο σύστημα (μαύρη συνεχής γραμμή). Χρόνος ολοκλήρωσης $t = 3000$ ($n = 30$), $N = 1000$, $R = 350$, $\sigma = 0.015$, $p_1 = 300$, $p_2 = 0.5$ και $p_3 = 0.8$	74
5.4	Στιγμιότυπα της τιμής x για διάφορες τιμές του εύρους σύζευξης R . Η τιμή του R αυξάνεται κατά 20 κάθε φορά. Οι υπόλοιπες παράμετροι του συστήματος είναι $N = 1000$, $\sigma = 0.015$, $p_1 = 300$, $p_2 = 0.5$, $p_3 = 0.8$, χρόνος ολοκλήρωσης $t = 10000$ ($n = 100$).	75
5.5	Μέση φασική ταχύτητα ω_k για διάφορες τιμές του εύρους σύζευξης R . Η τιμή του R αυξάνεται κατά 20 κάθε φορά. Οι υπόλοιπες παράμετροι του συστήματος είναι $N = 1000$, $\sigma = 0.015$, $p_1 = 300$, $p_2 = 0.5$, $p_3 = 0.8$, χρόνος ολοκλήρωσης $t = 10000$ ($n = 100$).	76
5.6	Στιγμιότυπα της τιμής x για διάφορες τιμές του εύρους σύζευξης R . Η τιμή του R αυξάνεται κατά 20 κάθε φορά. Οι υπόλοιπες παράμετροι του συστήματος είναι $N = 1000$, $\sigma = 0.015$, $p_1 = 300$, $p_2 = 0.5$, $p_3 = 0.8$, χρόνος ολοκλήρωσης $t = 10000$ ($n = 100$).	77
5.7	Μέση φασική ταχύτητα ω_k για διάφορες τιμές του εύρους σύζευξης R . Η τιμή του R αυξάνεται κατά 20 κάθε φορά. Οι υπόλοιπες παράμετροι του συστήματος είναι $N = 1000$, $\sigma = 0.015$, $p_1 = 300$, $p_2 = 0.5$, $p_3 = 0.8$, χρόνος ολοκλήρωσης $t = 10000$ ($n = 100$).	78
5.8	Εξάρτηση του αριθμού των συγχρονισμένων (και ασυγχρόνιστων) περιοχών της μεταβλητής x από το εύρος σύζευξης R , για δύο διαφορετικές αρχικές συνθήκες του συστήματος. Οι υπόλοιπες παράμετροι του συστήματος είναι $N = 1000$, $\sigma = 0.015$, $p_1 = 300$, $p_2 = 0.5$, $p_3 = 0.8$, χρόνος ολοκλήρωσης $t = 10000$ ($n = 100$).	79
5.9	Στιγμιότυπα των συγκεντρώσεων x_k των ταλαντωτών για διάφορες τιμές της παραμέτρου διακλάδωσης p_1 . Η τιμή του p_1 μειώνεται κατά 50 κάθε φορά. Οι υπόλοιπες παράμετροι του συστήματος είναι $R = 220$, $N = 1000$, $\sigma = 0.015$, $p_2 = 0.5$, $p_3 = 0.8$, χρόνος ολοκλήρωσης $t = 10000$ ($n = 100$).	80
5.10	Μέση φασική ταχύτητα ω_k των ταλαντωτών για διάφορες τιμές της παραμέτρου διακλάδωσης p_1 . Η τιμή του p_1 μειώνεται κατά 50 κάθε φορά. Οι υπόλοιπες παράμετροι του συστήματος είναι $R = 220$, $N = 1000$, $\sigma = 0.015$, $p_2 = 0.5$, $p_3 = 0.8$, χρόνος ολοκλήρωσης $t = 10000$ ($n = 100$).	81

5.11	Στιγμιότυπα των συγκεντρώσεων x_k των ταλαντωτών για διάφορες τιμές της παραμέτρου διακλάδωσης p_1 . Η τιμή του p_1 μειώνεται κατά 50 κάθε φορά. Οι υπόλοιπες παράμετροι του συστήματος είναι $R = 160$, $N = 1000$, $\sigma = 0.015$, $p_2 = 0.5$, $p_3 = 0.8$, χρόνος ολοκλήρωσης $t = 10000$ ($n = 100$).	82
5.12	Μέση φασική ταχύτητα ω_k των ταλαντωτών για διάφορες τιμές της παραμέτρου διακλάδωσης p_1 . Η τιμή του p_1 μειώνεται κατά 50 κάθε φορά. Οι υπόλοιπες παράμετροι του συστήματος είναι $R = 160$, $N = 1000$, $\sigma = 0.015$, $p_2 = 0.5$, $p_3 = 0.8$, χρόνος ολοκλήρωσης $t = 10000$ ($n = 100$).	83
5.13	Στιγμιότυπα των συγκεντρώσεων x_k των ταλαντωτών για διάφορες τιμές της παραμέτρου διακλάδωσης p_1 . Η τιμή του p_1 μειώνεται κατά 50 κάθε φορά. Οι υπόλοιπες παράμετροι του συστήματος είναι $R = 100$, $N = 1000$, $\sigma = 0.015$, $p_2 = 0.5$, $p_3 = 0.8$, χρόνος ολοκλήρωσης $t = 10000$ ($n = 100$).	84
5.14	Μέση φασική ταχύτητα ω_k των ταλαντωτών για διάφορες τιμές της παραμέτρου διακλάδωσης p_1 . Η τιμή του p_1 μειώνεται κατά 50 κάθε φορά. Οι υπόλοιπες παράμετροι του συστήματος είναι $R = 100$, $N = 1000$, $\sigma = 0.015$, $p_2 = 0.5$, $p_3 = 0.8$, χρόνος ολοκλήρωσης $t = 10000$ ($n = 100$).	85
5.15	Εξάρτηση του αριθμού των συγχρονισμένων (και ασυγχρόνιστων) περιοχών της μεταβλητής x από την παράμετρο διακλάδωσης p_1 , για τρεις διαφορετικές τιμές του εύρους σύζευξης $R = 100$ (μπλε γραμμή), $R = 160$ (κόκκινη γραμμή) και $R = 220$ (πράσινη γραμμή). Οι υπόλοιπες παράμετροι του συστήματος είναι $N = 1000$, $\sigma = 0.015$, $p_2 = 0.5$, $p_3 = 0.8$, χρόνος ολοκλήρωσης $t = 10000$ ($n = 100$).	85
B.1	Ο φασικός χώρος του LLC. Ο οριζόντιος άξονας αντιστοιχεί στη συγκέντρωση x και ο κατακόρυφος άξονας αντιστοιχεί στη συγκέντρωση y	95
B.2	Η συμπεριφορά του P_4 ανάλογα με τις τιμές των παραμέτρων p_1 , p_2 και p_3 . Η παράμετρος k_3 αντιστοιχεί στη δικιά μας p_3	99

Κεφάλαιο 1

Εισαγωγή

Η παρούσα μελέτη εστιάζει στα χαρακτηριστικά των φαινομένων συγχρονισμού που παρατηρούνται σε πλέγματα συζευγμένων ταλαντωτών, οι οποίοι χαρακτηρίζονται από έντονη μη γραμμικότητα. Στόχο αποτελεί η ανάλυση της συμπεριφοράς συστημάτων ταλαντωτών που χαρακτηρίζονται από καταναλωτική δυναμική, η διερεύνηση του ρόλου του συγχρονισμού στη δημιουργία χωροχρονικών δομών και η μελέτη της ευστάθειας αυτών. Ενώ τα φαινόμενα συγχρονισμού έχουν μελετηθεί εκτενώς σε πεδία όπως η Ηλεκτρονική, η Ακουστική και η Θεωρία Σημάτων, η ανάλυση φαινομένων συγχρονισμού σε συστήματα Πληθυσμών (Population Dynamics) είναι ελλιπής. Ειδικότερα σε μοντέλα θηρευτή-θηράματος έχουν πραγματοποιηθεί αρκετές μελέτες [1, 2, 3, 4, 5] πάνω στον συγχρονισμό των ανταγωνιζόμενων ειδών, αλλά δεν υπάρχουν μέχρι στιγμής θεωρητικές μελέτες που να ασχολούνται με, ένα νέο σχετικά, φαινόμενο συγχρονισμού, τις χιμαιρικές καταστάσεις.

Μεθοδολογικά χρησιμοποιούνται τόσο ημιαναλυτικές μέθοδοι που βασίζονται στη θεωρία μέσου πεδίου, αριθμητική ολοκλήρωση τύπου Euler, καθώς και προσομοιώσεις τύπου Kinetic Monte Carlo. Το μοντέλο που χρησιμοποιείται για τη μελέτη, ονομάζεται Μοντέλο Πλεγματού Οριακού Κύκλου (Π.Ο.Κ.) ή αλλιώς Lattice Limit Cycle (LLC). Είναι ένα μοντέλο που παρουσιάζει τέταρτης τάξης μη γραμμικότητα, υποστηρίζει καλά αλληλεπιδράσεις τύπου αντίδρασης-διάχυσης και εφαρμόζεται αποτελεσματικά σε δομή πλέγματος ώστε να είναι δυνατή η πραγματοποίηση των αναγκαίων προσομοιώσεων.

1.1 Κίνητρο

Η θεωρία της δυναμικής αντιδράσεων είχε περιοριστεί για μεγάλο χρονικό διάστημα σε μελέτες μακροσκοπικών, φαινομενολογικών εξισώσεων Μέσου Πεδίου (Mean Field-MF). Ως επακόλουθο, φαινόμενα όπως τοπικές αντιδράσεις, χωρικοί περιορισμοί, ατέλειες, τοπικά στοχαστικά φαινόμενα, κ.ά., αγνοούνταν συχνά ή προσθέτονταν *ad hoc*. Τα τελευταία χρόνια, με την ανάπτυξη των Κινητικών-Kinetic (ή Δυναμικών-Dynamic) Monte Carlo προσομοιωτικών μεθόδων, είναι δυνατόν να συμπεριληφθούν οι παραπάνω παράγοντες και να ακολουθηθεί η δυναμική εξέλιξη του συστήματος από μία κατάσταση σε άλλη [6, 7, 8, 9, 10, 11, 12]. Παράγοντας μία τροχιά από κατάσταση σε κατάσταση, μπορούμε να διερευνήσουμε ολόκληρο το χώρο καταστάσεων καθώς το σύστημα κατευθύνεται προς την κατάσταση ισορροπίας του.

Τα κίνητρά μας για τη μελέτη αυτή είναι τα εξής:

- α. Η παρουσία χωρικού υποστρώματος και η γεωμετρία αυτού επηρεάζει τη δυναμική σε ένα σύστημα. Για το λόγο αυτό παρουσιάζει ενδιαφέρον η μελέτη ενός μοντέλου όταν αυτό υλοποιείται σε ένα συγκεκριμένο υπόστρωμα και η ανάλυση της συμπεριφοράς του συστήματος σε σχέση με την πρόβλεψη της θεωρίας.
- β. Συγχρόνως εξίσου προσελκύει ενδιαφέρον η ανάλυση της συμπεριφοράς ενός συστήματος υπό την επίδραση πρόσθετης δυναμικής, όπως είναι η διάχυση των αντιδρώντων μέσα στο υπό μελέτη υπόστρωμα.
- γ. Τέλος αξίζει να πραγματοποιήσουμε τις παραπάνω ιδέες για κάποιο μοντέλο αντίδρασης-διάχυσης με μη γραμμικότητα μεγάλης τάξης που να παρουσιάζει μία όχι και τόσο απλή περίπτωση ευστάθειας. Ένα παράδειγμα αποτελούν τα καταναλωτικά μοντέλα τύπου οριακού κύκλου.

Στο σημείο αυτό θα κάνουμε μία σύντομη ιστορική αναδρομή στην πορεία κατανόησης των φαινομένων αντίδρασης-διάχυσης και στα εμπόδια τα οποία συνάντησε μέχρι να γίνει αποδεκτή. Στο παρελθόν έχουν γίνει σειρές μελετών, σε φυσικά, χημικά, βιολογικά και οικολογικά συστήματα έχοντας ως βασικά κίνητρα ένα ή περισσότερα από τα παραπάνω. Συγκεκριμένα, όσον αφορά την επίδραση της γεωμετρίας του υποστρώματος στη δυναμική (κίνητρο α) υπάρχουν μελέτες σε μοντέλα χημικής καταλυτικής δυναμικής [7, 9, 11, 13, 14, 15, 16, 17], οικολογικά μοντέλα [5, 18, 19] και επιδημιολογικά μοντέλα [20, 21, 22, 23], οι οποίες δείχνουν πως η ύπαρξη ενός χωρικού υποβάθρου, που δρα ως εξωτερικός παράγοντας, είναι κρίσιμη και δύναται να μεταβάλλει

σημαντικά την προσέγγιση Μέσου Πεδίου (MF). Σε τέτοια συστήματα το υπόβαθρο μπορεί να παρουσιάζει συγκεκριμένο βαθμό πολυπλοκότητας. Για παράδειγμα, στα οικολογικά συστήματα τα διάφορα είδη ζουν και αλληλεπιδρούν σε φυσικά περιβάλλοντα που εμφανίζουν διαφορές ως προς τη δομή, από μία υποπεριοχή σε μία άλλη [18, 22, 24]. Όπως αναφέρεται στην [24], στον χημικό, βιολογικό και οικολογικό κόσμο, ένα πολύ συνηθισμένο φαινόμενο είναι ο σχηματισμός μορφωμάτων και πρέπει πάντα να λαμβάνεται υπ'όψη, σε σχετικά μοντέλα, αφού αυτά τα μορφώματα επηρεάζουν τη δυναμική ανάμεσα στα διάφορα είδη.

Σε μία κλασσική εργασία, [14], μελετήθηκε η αντίδραση μονοξειδίου του αζώτου με μονοξείδιο του άνθρακα ($\text{NO} + \text{CO}$) πάνω σε επιφάνεια λευκόχρυσου (Pt) και ερευνήθηκαν τοπικές κινητικές ταλαντώσεις, χωρίς, όμως, να ληφθούν υπ'όψη χωρικές επιπτώσεις. Σε πιο πρόσφατες διερευνήσεις του ίδιου συστήματος [15, 16, 17], παρατηρήθηκε ότι η δυναμική που οδηγεί στην αυτο-οργάνωση επιδρά στη χωρο-χρονική οργάνωση των χημικών καταλυτικών αντιδράσεων.

Στην εργασία [18], μελετήθηκε ο συγχρονισμός μεταξύ πληθυσμών διαφορετικών ειδών που αλληλεπιδρούσαν ως κυνηγοί-καταναλωτές-τροφή. Η δυναμική τέτοιων συστημάτων είναι τύπου οριακού κύκλου. Παρατηρήθηκε ότι υπάρχει μία ισχυρή σχέση μεταξύ του συγχρονισμού των πληθυσμών και των χωρικό-χρονικών χαρακτηριστικών του συστήματος. Αυτό το μοντέλο λαμβάνει υπ' όψη και την πιθανή "αποδήμιση τύπου διάχυσης" μερικών ειδών σε γειτονικές ή πιο μακρινές περιοχές.

Στα επιδημιολογικά μοντέλα τα χωρικά χαρακτηριστικά του υπό μελέτη συστήματος παίζουν πολύ σημαντικό ρόλο. Σε πολλές μελέτες, για παράδειγμα στις [20, 21, 22] έχειδειχθεί ότι η δομή ενός κοινωνικού δικτύου επηρεάζει τη δυναμική της εξάπλωσης μιας ασθένειας [20] ή ότι ο κατευθυνόμενος εμβολιασμός των ανθρώπων-κόμβων του δικτύου-που είναι καλύτερα συνδεδεμένοι προκαλεί τον περιορισμό της ασθένειας σε τοπικό επίπεδο [21].

Επιπλέον έχειδειχθεί [25, 26, 27, 28, 29, 30] ότι απλά μοντέλα τα οποία δεν παρουσιάζουν ταλαντώσεις στο Μέσο Πεδίο, όταν υλοποιούνται σε κάποιο χωρικό υπόστρωμα, μπορούν, σε συνδυασμό με την κινητική του συστήματος, να εμφανίσουν χωροχρονικούς σχηματισμούς, ακόμα και ομαλή ή μη ομαλή (χαοτική) ταλαντωτική συμπεριφορά. Μία ιδιαίτερη απόδειξη αυτού του φαινομένου παρουσιάζεται για την περίπτωση της αντίδρασης $\text{CO} + \text{NO}$ στην [15].

Όσον αφορά το κίνητρο β υπάρχουν μελέτες [5, 18] που δείχνουν πως η διάχυση των ειδών σε κάποιο οικολογικό σύστημα μπορεί συχνά να τροποποιήσει τις διεργασίες που λαμβάνουν χώρα στο σύστημα αυτό. Επίσης είναι καλό να αναφερθούμε σε ένα κλασσικό σύστημα για τη μελέτη χωροχρονικών φαινομένων, το Πλεγματοτικό Lotka Volterra (LLV) σύστημα, το οποίο είναι ένα σύστημα με δυναμική τύπου "κέντρου" και εισήχθηκε στη βιβλιογραφία το 1999 [31]. Υπολογίστηκε πως όταν το σύστημα περιορίζεται σε υποστρώματα μικρών διαστάσεων οι συγκεντρώσεις των αλληλεπιδρώντων ειδών παρουσιάζουν τοπικές ταλαντώσεις. Τα χαρακτηριστικά των ταλαντώσεων αυτών εξαρτώνται από το μέγεθος του πλέγματος, τον αριθμό αλληλεπιδρώντων γειτόνων και των γενικών χωρικών περιορισμών. Όπως θα δείξουμε παρακάτω, η φύση των αλληλεπιδράσεων είναι τέτοια που επιβάλλει την ταλαντωτική συμπεριφορά τύπου κέντρου και όχι οριακού κύκλου. Αργότερα, στο ίδιο μοντέλο LLV προστέθηκε [32] ο μηχανισμός διάχυσης μεγάλης απόστασης. Αποδείχθηκε ότι στην περίπτωση αυτή οι εκτός φάσης τοπικές ταλαντώσεις μετατρέπονται σε κατά φάση συγχρονισμένες και δίνουν ολικές ταλαντώσεις που είναι σταθερές. Μετά από ένα κρίσιμο σημείο, και μία διακλάδωση "τύπου Hopf" το σύστημα μπαίνει σε δυναμική Οριακού Κύκλου.

Σε σχέση με το τρίτο (γ) κίνητρό μας, αναφερόμαστε στο μοντέλο Πλεγματοτικού Οριακού Κύκλου (ΠΟΚ) ή Lattice Limit Cycle (LLC), το οποίο εισήχθηκε το 2002 [33, 34] και ονομάστηκε έτσι γιατί στο Μέσο Πεδίο (MF) περιλαμβάνει δυναμική οριακού κύκλου. Παρατηρήθηκε επίσης ότι η συμπεριφορά στο Μέσο Πεδίο και στο πεδίο των προσομοιώσεων (της Κινητικής Monte Carlo μεθόδου) είναι διαφορετική. Στο Μέσο Πεδίο οι συγκεντρώσεις των συμμετεχόντων ειδών ταλαντώνονται με σταθερό πλάτος, ανεξαρτήτως των αρχικών συνθηκών. Αυτό άλλωστε σημαίνει η δυναμική Οριακού Κύκλου. Όταν, όμως, λαμβάνουν χώρα οι προσομοιώσεις σε ένα τετραγωνικό πλέγμα, τότε παρατηρούνται τοπικές και εκτός φάσης ταλαντώσεις σε διαφορετικές υποπεριοχές του πλέγματος. Και πάλι οι χωρικοί περιορισμοί και το μέγεθος του συστήματος αποδείχθηκαν πολύ σημαντικοί παράγοντες για τη δυναμική του συστήματος. Το μοντέλο αυτό θα αναλυθεί περαιτέρω στο δεύτερο κεφάλαιο, καθώς αποτελεί το βασικό μοντέλο οριακού κύκλου, πάνω στο οποίο μελετώνται φαινόμενα συγχρονισμού, δημιουργία μορφωμάτων και χιμαιρικών καταστάσεων.

Στα παρακάτω εδάφια, 1.2-1.11, θα υπενθυμίσουμε έννοιες και μεγέθη από τη βιβλιογραφία που χρησιμοποιούνται στην παρούσα μελέτη.

1.2 Συστήματα Αντίδρασης-Διάχυσης

Τα συστήματα Αντίδρασης-Διάχυσης είναι συστήματα τα οποία περιλαμβάνουν συστατικά που αλληλεπιδρούν μεταξύ τους σε τοπικό επίπεδο μέσω χημικών αντιδράσεων και που μεταφέρονται στο χώρο μέσω διάχυσης [35]. Το 1921 ο χημικός William Bray παρατήρησε μία αντίδραση χημικής ταλάντωσης, μελετώντας την αλληλεπίδραση μεταξύ του υπεροξειδίου του υδρογόνου και του ιωδίου, όμως η παρατήρησή του δεν έγινε αποδεκτή από την επιστημονική κοινότητα καθώς ήταν κοινή και ισχυρή αντίληψη ότι ο δεύτερος νόμος της θερμοδυναμικής απαγόρευε με οποιοδήποτε τρόπο τις χημικές ταλαντώσεις. Ενώ κάποιες αναφορές σε ηλεκτροχημικές ταλαντώσεις υπήρχαν από το 1828 [36], η επιστημονική άποψη μέχρι και το 1970, συνέχιζε να απορρίπτει τις χημικές ταλαντώσεις ως παραβίαση του δεύτερου θερμοδυναμικού νόμου [37]. Έτσι, όταν το 1921 ο Bray έγραψε την αναφορά [38] στους χημικούς ταλαντωτές, η επιστημονική κοινότητα τον επέκρινε. Παράλληλα, τη δεκαετία του 1950 ο Ρώσος χημικός Boris Belousov ανακάλυψε κι αυτός κάποιες χημικές ουσίες οι οποίες όταν αλληλεπιδρούν προκαλούν ταλάντωση στις συγκεντρώσεις τους. Ούτε όμως τα δικά του ερευνητικά αποτελέσματα έγιναν αποδεκτά, καθώς ακόμα η επιστημονική κοινότητα δε μπορούσε να δεχθεί την πιθανότητα χημικών ταλαντώσεων [39]. Κατάφερε μόνο να δημοσιεύσει μία συνοπτική σημείωση στα πρακτικά ενός ασήμαντου συνεδρίου [37, 40].

Η κατανόηση αυτού του φαινομένου επιτεύχθηκε το 1952, όταν ο Βρετανός μαθηματικός Alan Turing εισήγαγε ένα μοντέλο αντίδρασης-διάχυσης με το οποίο μελέτησε τη μορφογένεση πάνω σε χημικά υποστρώματα [41]. Συγκεκριμένα θεωρώντας δύο διαφορετικά μεταξύ τους αλληλεπιδρώντα μόρια, εξήγησε τη δημιουργία χημικών διαβαθμίσεων, σχεδίων και μορφωμάτων απουσία προγενέστερης ασυμμετρίας, στη φύση, στο δέρμα των ζώων, σε ιστούς, στον αριθμό των φύλλων και των ριζών των φυτών [42].

Χωρίς αρχικά να γνωρίζουν την εργασία του Turing, το 1972 δύο βιολόγοι, οι Hans Meinhardt και Alfred Gierer ανέπτυξαν μία θεωρία για τη βιολογική δημιουργία μορφωμάτων την οποία εξήγησαν αργότερα με βάση τη δημοσίευση του Turing [39].

Στη δεκαετία του 1960 ένας μεταπτυχιακός φοιτητής βιοχημείας στη Μόσχα, ο Anatoly Zhabotinsky μελετούσε το ρυθμικό χαρακτήρα του μεταβολισμού της γλυκόζης, όταν παρατήρησε την ύπαρξη ενός μείγματος ουσιών, που έμοιαζε με εκείνο του Belousov. Οι συγκεντρώσεις των ουσιών αυτών ταλαντώνονταν και το χρώμα του μείγματος άλλαζε μεταξύ κόκκινου και μπλε. [43]. Από τότε έγινε αποδεκτό το χαρακτηριστικό της ταλάντωσης σε χημικά συστήματα αντίδρασης-διάχυσης. Οι ταλαντώσεις

αυτές θεωρούνται πλέον σήμερα ως μία συνέπεια της ύπαρξης ισορροπίας μεταξύ των ρυθμών αντίδρασης και διάχυσης όταν διεργασίες αυτοκαταλυτικού χαρακτήρα λαμβάνουν χώρα σε συστήματα αντίδρασης-διάχυσης [39]. Επιπλέον η αντίδραση που παρατήρησαν οι δύο άντρες ξεχωριστά, ο Belousov και ο Zhabotinsky φέρει το όνομά τους (αντίδραση Belousov-Zhabotinsky) και αποτελεί ένα από τα βασικά παραδείγματα χημικών ταλαντωτών στην επιστημονική βιβλιογραφία.

Στις αρχές του 1970 οι Field, Körös και Noyes (FKN) εξήγησαν τον μηχανισμό της αντίδρασης Belousov-Zhabotinsky και απέδειξαν με προσομοιώσεις την ύπαρξη ταλαντωτικής συμπεριφοράς [37, 44, 45]. Σταδιακά λοιπόν, τα συστήματα αντίδρασης-διάχυσης άρχισαν να έλκουν την προσοχή των επιστημόνων. Στόχος των πειραματικών επιστημόνων ήταν αφενός η κατασκευή συστημάτων χημικών ταλαντωτών και αφετέρου η παρατήρηση μοτίβων του Turing [39]. Το 1981 οι De Kepper, Kustin και Epstein κατασκεύασαν [46] τον πρώτο χημικό ταλαντωτή (αντίδραση chlorite-iodate-arsenite) [37]. Συγχρόνως μελετούσαν την ταλαντωτική αντίδραση CIMA (chlorite-iodide-malonic acid) η οποία περιλαμβάνει κάποια από τα συστατικά της αντίδρασης Belousov-Zhabotinsky και τη δημιουργία μορφωμάτων στο μείγμα των στοιχείων. Μετά από αρκετά χρόνια, το 1990 ο De Kepper κατάφερε με την ομάδα του να παρατηρήσει μία δέσμη κουκίδων πάνω σε μία λωρίδα ζελατίνης όπου τα αντιδραστήρια είχαν διαχυθεί από αντίθετες κατευθύνσεις [47]. Την εξήγηση της δημιουργίας των μοτίβων αυτών στην αντίδραση CIMA έδωσαν το 1991 οι Irving Epstein και István Lengyel [48] οι οποίοι διαπίστωσαν ότι το άμυλο, που χρησιμοποιείται ως χρωματικός δείκτης του ιωδίου στην αντίδραση, προκαλεί συσσωμάτωση ιωδίου και αμύλου το οποίο διαχέεται αργά μέσα στη ζελατίνη. Αυτή η καθυστέρηση στη διάχυση του ιωδίου προκαλεί την εμφάνιση των μοτίβων του Turing. Ο I. Epstein επιτελεί ένα μακροχρόνιο έργο σε συστήματα χημικών ταλαντωτών, έχει συνεργαστεί με τους A. Zhabotinsky, K. Showalter και άλλους επιστήμονες, τόσο σε θεωρητικό όσο και σε πειραματικό επίπεδο, και ηγείται τα τελευταία χρόνια της ομάδας Μη Γραμμικής Δυναμικής (nonlinear dynamics group) του Πανεπιστημίου Brandeis, στο Waltham της Μασσαχουσέτης στις Η.Π.Α [49, 50, 51, 52, 53, 54, 55].

Νωρίτερα ο Ilya Prigogine, Ρώσος στην καταγωγή, ο οποίος όμως εργάστηκε στις Βρυξέλλες, ασχολήθηκε με τις μη αντιστρεπτές διαδικασίες στη φύση. Για να τις εξηγήσει, εισήγαγε, με το συνάδελφό του Paul Glansdorff τις καταναλωτικές δομές (dissipative structures), δηλαδή σταθερές και σε τάξη καταστάσεις που μπορούν να προκύψουν, μέσω διαταραχών, σε ένα σύστημα όταν αυτό βρίσκεται εκτός ισορροπίας [56]. Αυτές οι καταστάσεις διατηρούν την τάξη τους δίνοντας ενέργεια στο περιβάλλον.

Σε αυτό το σύστημα, όπως έδειξε ο Prigogine, ισχύει η ελαχιστοποίηση της εντροπίας [57, 58, 59]. Αξίζει να αναφέρουμε εδώ ότι πρώτος ο Prigogine εισήγαγε την αρχή της ελάχιστης παραγωγής εντροπίας (MINEP) το 1947 στην εργασία του για τις μη αντιστρεπτές διεργασίες [58, 59]. Για την εργασία του αυτή, ο Prigogine έλαβε το Νόμπελ Χημείας το 1977. Αρχικά η θεωρία είχε αναπτυχθεί στον τομέα της υδροδυναμικής, όμως η ομάδα του Prigogine παρατήρησε ότι εφαρμόζεται με επιτυχία και σε συστήματα αντίδρασης-διάχυσης. Η θεωρία αυτή έδωσε μεγαλύτερη επιστημονική βάση στην εργασία του Turing σχετικά με την ανάπτυξη των ομώνυμων μορφωμάτων [56].

Ας σημειώσουμε ότι δύο πολλοί σημαντικοί μαθητές του Prigogine οι οποίοι εργάστηκαν στα συστήματα αντίδρασης-διάχυσης ήταν ο René Lefever και ο Gregoire Nicolis [57, 60, 61, 62, 63, 64]. Μαζί τους ανέπτυξε ένα κινητικό μοντέλο, που μετέπειτα ονομάστηκε από τον J. Tyson ως μοντέλο Brusselator [65]. Η έρευνα αυτή συνεχίστηκε με την ανάλυση χωροχρονικών δομών που προκύπτουν από τη συνέργεια μεταξύ χημικής δυναμικής και διάχυσης ([66, 67, 68, 69, 70]), και αφορά κυρίως το σχηματισμό δομών σε επιφάνειες όπου λαμβάνουν χώρα χημικές αντιδράσεις, την ανάπτυξη μορφωμάτων στο δέρμα διάφορων ζώων, καθώς και χημικά συστήματα εκτός ισορροπίας και την αντίστοιχη θεωρία διακυμάνσεων (fluctuations).

Με τον τομέα των συστημάτων αντίδρασης και διάχυσης ασχολείται και η ομάδα των πολύπλοκων συστημάτων στο κέντρο Max Planck στο Βερολίνο. Εκεί, ενδεικτικά, ο A. Mikhailov έχει μελετήσει φαινόμενα συγχρονισμού σε απλά ταλαντωτικά συστήματα αντίδρασης-διάχυσης [71], αλλά και σε συστήματα αντίδρασης-διάχυσης πάνω σε δομές δικτύου [72, 73], ενώ ο G. Ertl, ο οποίος επίσης πολλά χρόνια εργαζόταν σε συστήματα αντίδρασης-διάχυσης μελετώντας αντιδράσεις ετερογενούς κατάλυσης και ανάπτυξη μορφωμάτων [13, 74], έλαβε το 2007 το Νόμπελ Χημείας για την έρευνά του πάνω σε χημικές αντιδράσεις σε στερεές επιφάνειες [75].

1.3 Μορφοκλασματικές Δομές

Συχνά σε συστήματα αντίδρασης-διάχυσης αναπτύσσονται κάποια μοτίβα που ονομάζονται μορφοκλασματικές δομές (fractals). Αυτές οι δομές είναι ιδιαίτερες και ξεχωριστές από άλλου είδους μορφώματα, γιατί δεν έχουν χαρακτηριστικό μήκος [76], [77]. Απεναντίας τις χαρακτηρίζει η ιδιότητα της αυτοομοιότητας [78]. Μία μορφοκλασματική δομή δεν είναι ομαλή και ομοιογενής [79]. Αντίθετα, όσο μελετάει κανείς τη

δομή πιο βαθιά, δηλαδή σε βαθύτερη ανάλυση της δομής, συναντά και πάλι σχέση κλιμάκωσης. Παραδείγματα μορφοκλασματικών δομών που υπάρχουν στη φύση γύρω μας είναι τα δέντρα, τα σύννεφα, οι ακτογραμμές, κ.λ.π. Επιπλέον όμως υπάρχουν και ανατομικές δομές, όπως η καρδιά και οι πνεύμονες που παρουσιάζουν μορφοκλασματικές ιδιότητες [80, 81]. Τέλος μορφοκλασματικές δομές παρατηρούνται και σε δυναμικές διαδικασίες, καθώς υπάρχουν χρονοσειρές που δίνουν περισσότερη πληροφορία όσο μικραίνει η κλίμακα μελέτης. Η αυτοομοιότητα, λοιπόν, σχετίζεται με την έννοια της κλιμάκωσης. Η πολυπλοκότητα ενός σύνθετου αντικειμένου ή διαδικασίας αναδεικνύεται με μία σειρά σμικρύνσεων σε κάποια κλίμακα [81].

Το χαρακτηριστικό μέγεθος μίας μορφοκλασματικής δομής είναι η μορφοκλασματική διάσταση (fractal dimension) D_f . Υπάρχουν πολλοί τρόποι προσέγγισης της μορφοκλασματικής διάστασης μιας δομής. Ο πιο εύκολος τρόπος να γίνει κατανοητή η διάσταση μίας μορφοκλασματικής δομής είναι να θεωρήσουμε ότι εάν ένα σχήμα αποτελείται (χωρίς κενά ή αλληλεπικαλύψεις) από $b = \alpha^D$ όμοια σχήματα μεγέθους $1/\alpha$, τότε ο εκθέτης D αντιστοιχεί στη "διάσταση ομοιότητας" D_S [78]. Στην περίπτωση αυτή ισχύει:

$$D_S = \frac{\log(b)}{\log(\alpha)}. \quad (1.1)$$

Πιο χρήσιμος, όμως, ορισμός της μορφοκλασματικής διάστασης είναι η "διάσταση χωρητικότητας" D_c η οποία προτάθηκε από τον Kolmogorov [78, 82]. Θεωρούμε ότι έχουμε ένα σχήμα περιορισμένο σε έναν Ευκλείδειο χώρο d διαστάσεων. Αν γεμίσουμε αυτό το σχήμα με σφαίρες d διαστάσεων και ίδιας ακτίνας $1/\varepsilon$, τότε η διάσταση χωρητικότητας [78, 81, 83] ισούται με:

$$D_c = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\log N(\varepsilon)}{\log 1/\varepsilon}, \quad (1.2)$$

όπου το $N(\varepsilon)$ δηλώνει τον ελάχιστο αριθμό σφαιρών, ώστε να επικαλύπτεται πλήρως το σχήμα.

Αντίστοιχα για μία καμπύλη, η οποία μπορεί να καλυφθεί από $N(r)$ τμήματα, μήκους r , στη σχέση $N(r) = c \cdot r^{-D}$, D είναι η μορφοκλασματική διάσταση της καμπύλης [78, 84] (c είναι σταθερά).

Η μορφοκλασματική διάσταση χρησιμεύει ως μέτρο πολυπλοκότητας μίας μορφοκλασματικής δομής. Δεν είναι αναγκαστικά ακέραιος αριθμός, σε αντίθεση με τη

χωρική διάσταση. Για παράδειγμα μία μορφοκλασματική δομή διάστασης 1.585, "ζει" ανάμεσα στις χωρικές διαστάσεις $d = 1$ και $d = 2$.

1.4 Κλασσικό μοντέλο θηρευτή-θηράματος Lotka - Volterra (LV)

Το μοντέλο Lotka-Volterra είναι το πιο παλιό μοντέλο που περιγράφει αλληλεπιδράσεις ανάμεσα σε ανταγωνιζόμενα είδη (θηρευτές-θηράματα). Είναι ένα σχετικά απλό, μη γραμμικό, μοντέλο, το οποίο έχει μελετηθεί εκτενώς και αποτελεί τη βάση για την ανάπτυξη και μελέτη άλλων πιο περίπλοκων μοντέλων που αφορούν τέτοιου είδους, ανταγωνιστικά, συστήματα αντίδρασης-διάχυσης. Οφείλει το όνομά του σε δύο επιστήμονες, τους Lotka ([85, 86, 87]) και Volterra [90, 91], οι οποίοι ανεξάρτητα το πρότειναν στην επιστημονική κοινότητα. Ο Lotka το 1910 θέλησε να περιγράψει με αυτό ένα σύστημα αυτοκαταλυτικών χημικών αντιδράσεων [85], και το 1920 με δύο άρθρα του [86, 87] συμπεριέλαβε και την περιγραφή ενός συστήματος δύο ανταγωνιζόμενων ειδών ή ενός είδους και του περιβάλλοντός του, και έδειξε ότι ένα τέτοιο σύστημα μπορεί να ταλαντώνεται περιοδικά [88, 89]. Κάποια χρόνια αργότερα ο Volterra [90, 91] θέλησε ακριβώς να περιγράψει τη μη γραμμική αλληλεπίδραση ανάμεσα σε θηρευτές και θηράματα. Όπως σημείωσε ο ίδιος το σύστημα που έλαβε υπόψη του αποτελείται από δύο είδη, εκ των οποίων το ένα τρέφεται από το άλλο, ενώ αν αφεθούν μόνα τους το ένα θα εξαφανισθεί λόγω έλλειψης τροφής, ενώ το άλλο θα αυξάνεται επ'αόριστον, όταν υπάρχει αρκετή τροφή στο περιβάλλον του. Διαπίστωσε και αυτός ότι η αυξομείωση των συγκεντρώσεων των δύο ειδών είναι περιοδική. Από τότε το μοντέλο Lotka-Volterra έχει καθιερωθεί ως το σημείο αναφοράς στη μελέτη συστημάτων αντίδρασης-διάχυσης και κυρίως θηρευτή-θηράματος σε διάφορους επιστημονικούς τομείς, όπως εκείνοι της χημείας, της οικολογίας, της επιδημιολογίας [92].

Συμβολίζοντας με X το θήραμα και με Y τον θηρευτή, το μοντέλο Lotka-Volterra είναι σχηματικά το ακόλουθο:



Η αντίδραση 1.3.α περιγράφει πώς το θήραμα X πολλαπλασιάζεται καταναλώνοντας την τροφή A . Η αντίδραση 1.3.β περιγράφει πώς ο θηρευτής Y καταναλώνει το θήραμα X . Τέλος η αντίδραση 1.3.γ περιγράφει πώς ο θηρευτής Y πεθαίνει (B). r_1, r_2, r_3 είναι οι αντίστοιχοι ρυθμοί πραγματοποίησης των αντιδράσεων, ενώ τα A και B είναι σταθερές που σχετίζονται με ένα σταθερό περιβάλλον (reservoir) που περιβάλλει το σύστημα.

Το μοντέλο αυτό είναι πολύ απλουστευμένο καθώς θεωρεί μόνο τον ανταγωνισμό μεταξύ διαφορετικών ειδών, αλλά και γιατί δεν προβλέπει τον κορεσμό του θηράματος σε περίπτωση έλλειψης του θηρευτή. Επιπλέον παρατηρούμε ότι ο συνολικός αριθμός των ειδών δεν παραμένει σταθερός σε κάθε αντίδραση ξεχωριστά. Για την ακρίβεια στην αντίδραση 1.3.α ένα είδος X δίνει τη θέση του σε δύο είδη X , ενώ στην αντίδραση 1.3.γ ένα είδος Y εξαφανίζεται τελείως. Αυτό το χαρακτηριστικό δεν επιτρέπει την προσομοίωση του συστήματος σε κάποιο πλεγματοτικό υπόστρωμα, αφού για την αναπαράσταση μίας αλληλεπίδρασης σε πλέγμα, είναι απαραίτητη προϋπόθεση η διατήρηση του συνολικού χώρου (αριθμού κελίων) που διατίθενται για την αντίδραση.

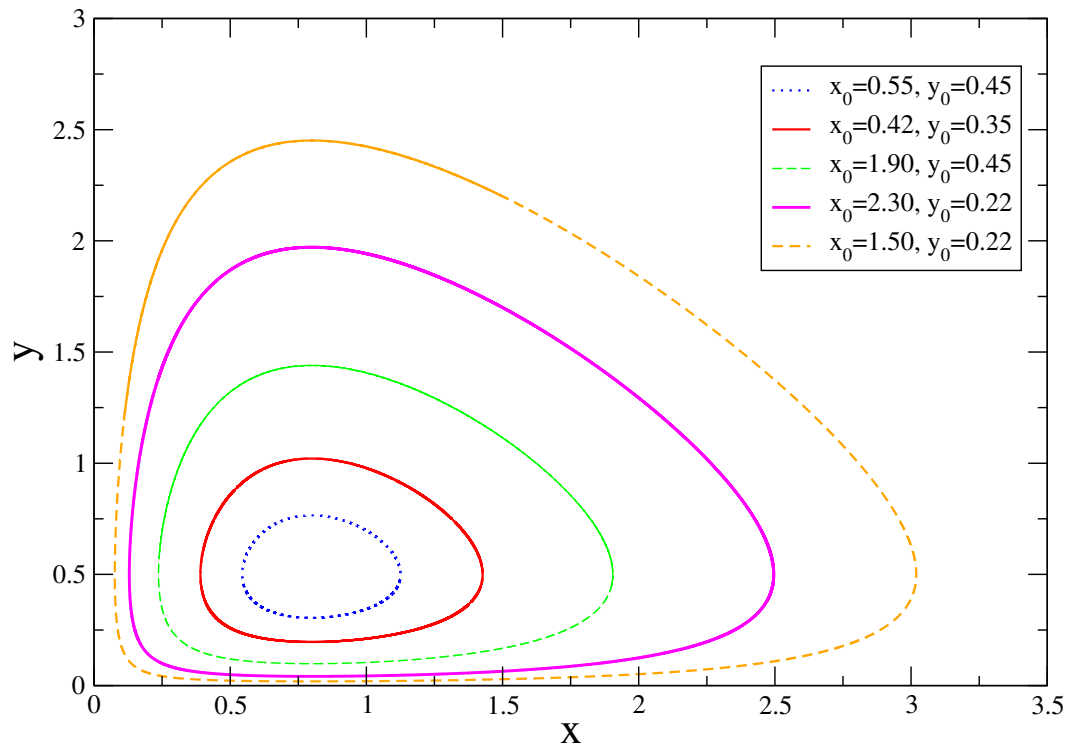
Οι κινητικές εξισώσεις για τη μεταβολή των συγκεντρώσεων x και y , των ειδών X και Y αντίστοιχα, είναι οι ακόλουθες:

$$\frac{dx}{dt} = r_1x - r_2xy \quad (1.4.α)$$

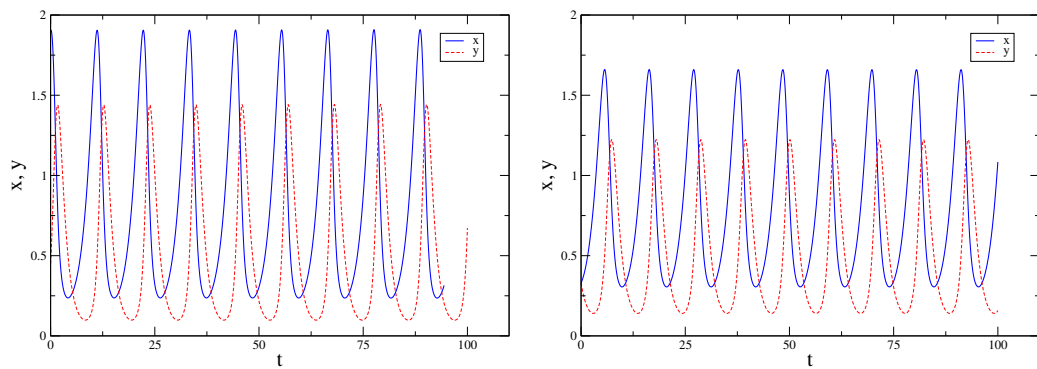
$$\frac{dy}{dt} = r_2xy - r_3y \quad (1.4.β)$$

Το σύστημα αυτό παρουσιάζει δύο σημεία ισορροπίας το $(0, 0)$ και το $(\frac{r_3}{r_2}, \frac{r_1}{r_2})$.

Πραγματοποιώντας γραμμική ανάλυση ευστάθειας ([93]) καταλήγουμε πως το $(0, 0)$ είναι σάγμα, ενώ το $(\frac{r_3}{r_2}, \frac{r_1}{r_2})$ είναι τύπου κέντρου, αφού διαθέτει δύο συζυγείς και φανταστικές ιδιοτιμές. Η συμπεριφορά αυτή αντιστοιχεί σε ταλάντωση των συγκεντρώσεων x και y , στο επίπεδο του Μέσου Πεδίου. Ο φασικός χώρος του απλού μοντέλου Lotka-Volterra φαίνεται στο Σχήμα 1.1. Εμφανίζονται διάφορες περιπτώσεις αρχικών τιμών. Στο Σχήμα 1.2 βλέπουμε την ταλάντωση των συγκεντρώσεων ως συνάρτηση του χρόνου και παρατηρούμε ταλαντωτική συμπεριφορά.



Σχήμα 1.1: Μοντέλο Lotka-Volterra. Το διάγραμμα φάσης του συστήματος για $r_1 = 0.5$, $r_2 = 1.0$ και $r_3 = 0.8$ και για διάφορες αρχικές συνθήκες (x_0, y_0) .



Σχήμα 1.2: Μοντέλο Lotka-Volterra. Οι συγκεντρώσεις x και y ως συνάρτηση του χρόνου για $r_1 = 0.5$, $r_2 = 1.0$ και $r_3 = 0.8$. Αριστερά οι αρχικές συνθήκες είναι $(x_0, y_0) = (1.90, 0.45)$. Δεξιά οι αρχικές συνθήκες είναι $(x_0, y_0) = (0.33, 0.33)$.

1.5 Πλεγματοτικό Μοντέλο Lotka-Volterra - LLV

Μέχρι στιγμής έχουμε αντιμετωπίσει το κλασσικό μοντέλο Lotka Volterra ως ένα γενικό και θεωρητικό μοντέλο. Αν θελήσουμε να το προσομοιώσουμε σε κάποιο υποστρώμα, θα πρέπει να εφαρμόσουμε και κάποιες συνθήκες υλοποίησης και να λάβουμε υπ'όψη την τοπικότητα των αλληλεπιδράσεων. Επιπροσθέτως θα απαιτήσουμε τη διατήρηση του αριθμού των σωματιδίων σε κάθε στοιχειώδη αλληλεπίδραση. Το νέο μοντέλο που προκύπτει ονομάζεται Πλεγματοτικό Μοντέλο Lotka-Volterra (Lattice Lotka-Volterra ή LLV) [31, 94, 95].

Σε μία τυπική υλοποίηση του συστήματος σε δύο διαστάσεις, το πλέγμα είναι τετραγωνικό και αποτελείται από τετραγωνικά κελία. Τα άδεια κελία τα συμβολίζουμε με S . Θεωρούμε το S ως ένα εικονικό είδος. Κάθε κελίο του πλέγματος επιτρέπεται να περιέχει ένα μόνο είδος εκ των τριών X , Y , S . Όταν μία στοιχειώδης αλληλεπίδραση λαμβάνει χώρα, τότε η κατάσταση ενός ή περισσότερων κελίων μεταβάλλεται. Σχηματικά το Πλεγματοτικό Μοντέλο Lotka-Volterra (LLV) [31] είναι το εξής:



όπου X , Y , S είναι οι τρεις καταστάσεις στις οποίες δύνανται να βρεθούν τα κελία του πλέγματος, ενώ k_1 , k_2 , k_3 είναι οι κινητικοί ρυθμοί με τους οποίους λαμβάνουν χώρα οι αντιδράσεις (1.5.α), (1.5.β), (1.5.γ).

Παρατηρούμε ότι το μοντέλο είναι κυκλικό και το σύστημα παραμένει αναλλοίωτο σε κυκλική μετάθεση των δεικτών 1,2,3. Επίσης σε κάθε αλληλεπίδραση ο συνολικός αριθμός των ειδών διατηρείται σταθερός. Τέλος κάθε στοιχειώδης αλληλεπίδραση παρουσιάζει αυτοκαταλυτικό χαρακτήρα, δηλαδή σε κάθε στοιχειώδη αλληλεπίδραση είναι απαραίτητη η ύπαρξη ενός είδους (X , ή Y ή S) ώστε η αλληλεπίδραση να πραγματοποιηθεί και έτσι στη συνέχεια να αυξηθεί η συγκέντρωση του συγκεκριμένου είδους, με αντίστοιχη μείωση ενός ή περισσότερων από τα άλλα είδη.

1.5.1 Εξισώσεις Μέσου Πεδίου για το LLV

Οι κινητικές εξισώσεις που δείχνουν τη μεταβολή με το χρόνο της συγκέντρωσης των ειδών στο πλέγμα είναι οι εξής:

$$\frac{dx}{dt} = k_2xs - k_1xy \quad (1.6.\alpha)$$

$$\frac{dy}{dt} = k_1yx - k_3ys \quad (1.6.\beta)$$

$$\frac{ds}{dt} = k_3sy - k_2sx \quad (1.6.\gamma)$$

Το παραπάνω σύστημα των εξισώσεων είναι τριών διαστάσεων και παρουσιάζει δεύτερης τάξης μη γραμμικότητα. Όπως έχουμε επιβάλει, ισχύει ότι το άθροισμα των συγκεντρώσεων x, y, s είναι σταθερό: $x + y + s = \text{const}$.

1.5.2 Συμπεριφορά των συγκεντρώσεων στο Μέσο Πεδίο

Ως μερικές συγκεντρώσεις τα μεγέθη x, y και s μπορούν να θεωρηθούν επιμέρους καταλήψεις του συνολικού πλέγματος και τότε μπορούμε να πούμε ότι εκφράζουν την πιθανότητα ένα κελίο του πλέγματος να βρίσκεται στην κατάσταση X ή Y ή S . Στην περίπτωση αυτή η σταθερά const θεωρείται ίση με τη μονάδα, οπότε ισχύει ότι

$$x + y + s = 1. \quad (1.7)$$

Λύνοντας την Εξίσωση 1.7 ως προς s παίρνουμε ότι

$$s = 1 - x - y. \quad (1.8)$$

Από τις Εξισώσεις 1.6 και 1.8 προκύπτει ένα δισδιάστατο σύστημα κινητικών εξισώσεων:

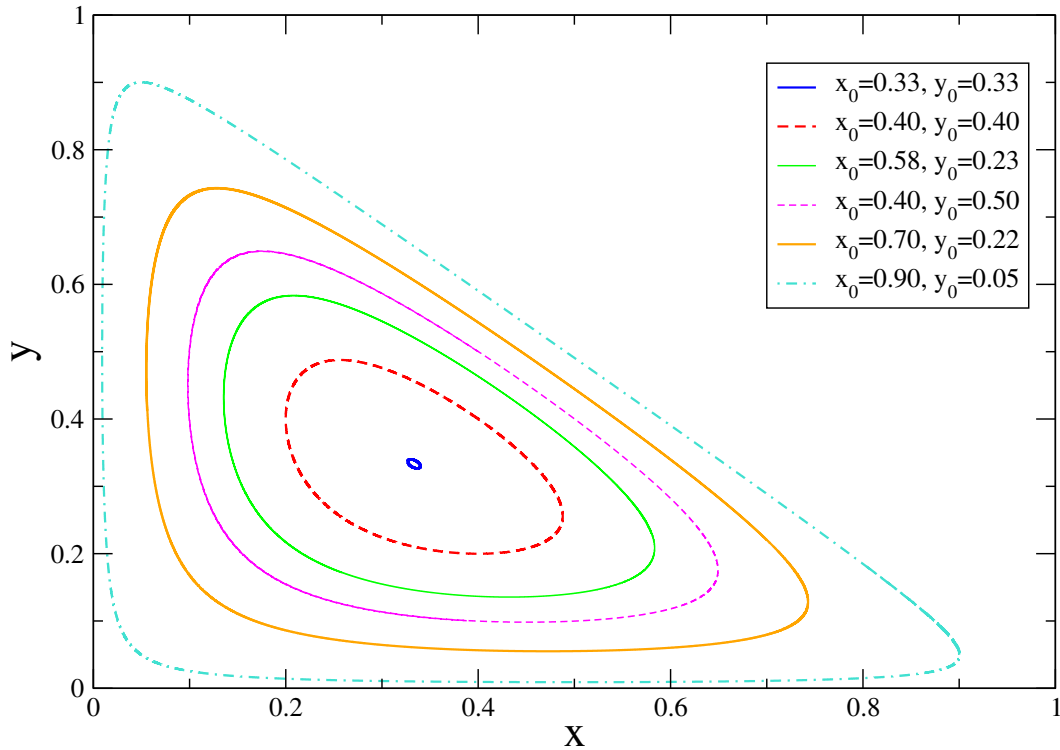
$$\frac{dx}{dt} = x[k_2 - k_2x - (k_2 + k_1)y] \quad (1.9.\alpha)$$

$$\frac{dy}{dt} = y[-k_3 + k_3y + (k_3 + k_1)x]. \quad (1.9.\beta)$$

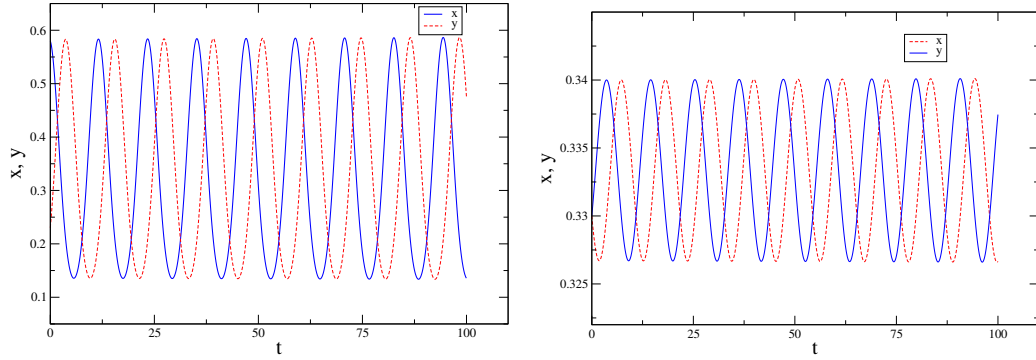
Το σύστημα αυτό παρουσιάζει τέσσερα σημεία ισορροπίας. Το $(0, 0)$ που αντιστοιχεί σε άδειο πλέγμα, το $(0, 1)$ που αντιστοιχεί σε πλέγμα που έχει γεμίσει από το είδος Y , το $(1, 0)$ που αντιστοιχεί σε πλέγμα το οποίο έχει γεμίσει από το είδος X και τέλος στο $(\frac{k_3}{k_1+k_2+k_3}, \frac{k_2}{k_1+k_2+k_3})$. Πραγματοποιώντας γραμμική ανάλυση ευστάθειας καταλήγουμε ότι τα τρία πρώτα σημεία ισορροπίας είναι τετριμμένες λύσεις και τύπου σάγματος. Το τέταρτο σημείο ισορροπίας αντιστοιχεί σε Ιακωβιανή ορίζουσα με συζυγείς και φανταστικές ιδιοτιμές και συνεπώς η μη τετριμμένη αυτή λύση είναι τύπου κέντρου. Η συχνότητα που σχετίζεται με την ταλάντωση των περιοδικών τροχιών γύρω από το κέντρο, είναι [31]:

$$\omega = \sqrt{\frac{k_1 k_2 k_3}{k_1 + k_2 + k_3}}. \quad (1.10)$$

Στη συνέχεια, στο Σχήμα 1.3 παραθέτουμε το διάγραμμα φάσης του συστήματος για διάφορες περιπτώσεις αρχικών συνθηκών, ενώ στο Σχήμα 1.4 βλέπουμε τις συγκεντρώσεις x και y ως συνάρτηση του χρόνου.



Σχήμα 1.3: Μοντέλο LLV. Το διάγραμμα φάσης του συστήματος για $r_1 = r_2 = r_3 = 1.0$ και για διάφορες αρχικές συνθήκες (x_0, y_0) .



Σχήμα 1.4: Μοντέλο LLV. Οι συγκεντρώσεις x και y ως συνάρτηση του χρόνου για $r_1 = r_2 = r_3 = 1.0$. Αριστερά οι αρχικές συνθήκες είναι $(x_0, y_0) = (0.58, 0.23)$. Δεξιά οι αρχικές συνθήκες είναι $(x_0, y_0) = (0.33, 0.33)$.

1.6 Η μέθοδος προσομοίωσης Kinetic Monte Carlo (KMC)

Η μέθοδος του Μέσου Πεδίου δίνει μία γενική εικόνα για το σύνολο των σωματιδίων ενός συστήματος. Γνωρίζουμε ότι η θεωρία του Μέσου Πεδίου περιγράφει αποτελεσματικά τα συστήματα αντίδρασης, μόνο όταν τα συστατικά των συστημάτων αυτών είναι καλά ανακατεμένα, έτσι ώστε κάθε στοιχείο να μπορεί να αλληλεπιδρά ισότιμα με όλα τα άλλα σωματίδια στο σύστημα, χωρίς να παίζει ρόλο η θέση και η απόσταση. Αντίθετα, σε συστήματα όπου οι αντιδράσεις γίνονται σε τοπικό επίπεδο, το Μέσο Πεδίο δε δύναται να προσεγγίσει τη συμπεριφορά του συστήματος [31, 173, 96, 64].

Στην περίπτωση μας, επιζητείται η προσομοίωση της συμπεριφοράς κάθε ενός σωματιδίου του συστήματος και ο αριθμός των σωματιδίων αυτών είναι αρκετά μεγάλος, της τάξης των εκατοντάδων χιλιάδων ή ακόμα και εκατομμυρίων σωματιδίων. Όταν απαιτείται μία λεπτομερής περιγραφή της δυναμικής του συστήματος, όπου λαμβάνονται υπ' όψη διακυμάνσεις, χωρικοί περιορισμοί και στοχαστικά φαινόμενα, ενδείκνυται η μέθοδος της πιθανοκρατικής Άρχουσας Εξίσωσης (Master Equation) [64], η οποία περιγράφει λεπτομερώς τη χρονική εξέλιξη του συστήματος από μία κατάσταση σε μία άλλη. Συγκεκριμένα, εάν το σύστημα υποστηρίζει ένα διακριτό αριθμό καταστάσεων $i = 1, 2, \dots, N$, τότε η πιθανότητα $P(j, t)$ να βρεθεί το σύστημα σε κατάσταση j , σε χρόνο t , δίνεται από την Άρχουσα Εξίσωση ως:

$$P(j, t) = \sum_{k=1}^N w_{kj} P(k, t-1) - \sum_{l=1}^N w_{jl} P(j, t-1) \quad (1.11)$$

όπου το στοιχείο πίνακα w_{jk} αναπαριστά την πιθανότητα μετάβασης από την κατάσταση j στην κατάσταση k . Ο πίνακας W με στοιχεία w_{jk} , $j, k = 1 \cdots N$ ονομάζεται πίνακας πιθανοτήτων μετάβασης. Είναι ευκολονόητο ότι η επίλυση της Αρχουσας Εξίσωσης είναι απλή όταν ο αριθμός των καταστάσεων N είναι μικρός. Στην περίπτωση, όμως, συστημάτων με μεγάλο αριθμό καταστάσεων, όπως είναι το μοντέλο Πλεγματού Οριακού Κύκλου (LLC), η επίλυση της Αρχουσας Εξίσωσης καθίσταται αδύνατη. Για παράδειγμα, για ένα πλεγματού μοντέλο σε δισδιάστατο πλέγμα μεγέθους $V = L \times L = 1024 \times 1024$ χρειάζεται να επιλύσουμε ένα σύστημα $2 \cdot (L \times L)$ εξισώσεων. Μία εναλλακτική μέθοδος στην οποία η κατάσταση του συστήματος δειγματοποιείται στοχαστικά-και για το λόγο αυτό δίνει μία πολύ καλή προσεγγιστική λύση της Αρχουσας Εξίσωσης-είναι η μέθοδος Kinetic Monte Carlo ή KMC.

Σε αντίθεση με την κλασσική μέθοδο Monte Carlo (Metropolis Monte Carlo) η οποία εφαρμόζεται σε συστήματα ισορροπίας, η μέθοδος Kinetic Monte Carlo χρησιμοποιείται για τη μελέτη ανοιχτών συστημάτων, δηλαδή συστημάτων που βρίσκονται εκτός ισορροπίας [97, 98, 99, 100]. Παρά το γεγονός αυτό και οι δύο μέθοδοι, KMC και Metropolis Monte Carlo, κάνουν χρήση τυχαίων αριθμών και έτσι δικαιολογούν το όνομα Monte Carlo. (Ας θυμηθούμε ότι ο Nicolas Metropolis είναι ο δημιουργός του πρώτου αλγορίθμου Monte Carlo [101, 102, 103]). Κινητική (kinetic) ονομάζεται η μέθοδος επειδή οι αλγόριθμοι που εισάγονται πρωτοαναπτύχθηκαν για να μελετηθεί η κινητική χημικών αντιδράσεων. Αντί του όρου "κινητική" μπορούμε να συναντήσουμε τον όρο "δυναμική" ή "χρονοεξαρτώμενη". Στη βιβλιογραφία η μέθοδος Kinetic Monte Carlo αναφέρεται συχνά και ως Dynamic Monte Carlo. Σημαντικά σημεία προς σημείωση είναι τα εξής: Στην KMC μέθοδο ορίζουμε τις πιθανότητες των γεγονότων εξωτερικά. Ως γεγονός θεωρείται η πραγματοποίηση μίας εκ των αντιδράσεων του συστήματος, οδηγώντας το σύστημα από μία κατάσταση σε μία άλλη. Επιπλέον οι τυχαίοι αριθμοί και η στοχαστικότητα της μεθόδου συνδέονται με το θόρυβο που γνωρίζουμε ότι υπάρχει στα ανοιχτά συστήματα όπως αυτό που μελετάμε.

Είναι μεγάλης σημασίας η κατανόηση της δομής του αλγορίθμου KMC. Ένας τέτοιος αλγόριθμος περιλαμβάνει δύο κύρια στοιχεία. Το πρώτο είναι το επονομαζόμενο Elementary Time Step (ETS) και το δεύτερο είναι το Monte Carlo Time Step (MCS). Το στοιχειώδες ETS αποτελείται από τις εξής διεργασίες: Αρχικά, με τυχαίο τρόπο, επιλέγεται ένα κελίο του πλέγματος. Στη συνέχεια γίνεται η δοκιμή για τη δυνατότητα πραγματοποίησης, για το συγκεκριμένο κελίο, όλων των αντιδράσεων. (Φυσικά απαιτείται και ο έλεγχος των κοντινών γειτόνων ώστε να είναι εφικτή οποιαδήποτε από τις αντιδράσεις). Από τη στιγμή που επιτρέπεται η πραγματοποίηση κάποιας αντίδρασης,

εκείνη λαμβάνει χώρα με μία συγκεκριμένη και ορισμένη εξωτερικά, όπως προαναφέρθηκε, πιθανότητα. Τότε ολοκληρώνεται το στοιχειώδες ETS, ο χρόνος αυξάνεται κατά ένα ETS και ξεκινάει ένα καινούργιο ETS. Το MCS περιλαμβάνει ένα αριθμό βημάτων ETS, ο οποίος ισούται με το μέγεθος του πλέγματος του συστήματος. Για τετραγωνικά πλέγματα πλευράς L , όπως αυτά που χρησιμοποιούμε στην παρούσα διατριβή, το μέγεθος του πλέγματος είναι L^2 , και τότε $1\text{ MCS} = L^2\text{ ETS}$. Σε ένα MCS κάθε σωματίδιο έχει αντιδράσει κατά μέσο όρο μία φορά. Ο αλγόριθμος θα γίνει πιο συγκεκριμένος στην ενότητα 2.4 όπου θα χρησιμοποιηθεί για την προσομοίωση του μοντέλου LLC.

1.7 Δίκτυα και χαρακτηριστικά τους

Στο τέταρτο κεφάλαιο θα μελετηθεί το μοντέλο LLC σαν ένα αφηρημένο δίκτυο κόμβων. Για το λόγο αυτό στις επόμενες ενότητες ανακαλούμε πληροφορίες σχετικά με τον ορισμό και την ορολογία των δικτύων, όπως αυτές παρουσιάζονται σε διάφορες εκτενείς αναφορές, όπως η [104].

1.7.1 Ορισμός Δικτύου

Ένα δίκτυο είναι ένα σύνολο στοιχείων-αντικειμένων-ειδών τα οποία ονομάζονται *κόμβοι* (*vertices* ή *nodes*). Ανάμεσα στους κόμβους υπάρχουν συνδέσεις που ονομάζονται *σύνδεσμοι* (*edges*). Αυτό σημαίνει ότι οι κόμβοι του δικτύου επικοινωνούν με κάποιους άλλους κόμβους του δικτύου (αν είναι συνδεδεμένοι μεταξύ τους). Στα μαθηματικά τα δίκτυα περιγράφονται με τη θεωρία των γράφων και πολλές φορές αναφερόμαστε σε ένα δίκτυο ως *γράφο*.

Οι κόμβοι ενός δικτύου δεν είναι πάντα υλικά αντικείμενα. Για παράδειγμα ως κόμβοι μπορούν να θεωρηθούν οι υπολογιστές-τερματικά σε ένα δίκτυο ηλεκτρονικών υπολογιστών, αλλά και οι χρήστες ενός δικτύου κινητής τηλεφωνίας. Ομοίως κόμβοι μπορεί να είναι οι μετοχές στις οποίες επενδύουν εταιρείες που ανήκουν σε ένα οικονομικό δίκτυο. Στην περιοχή των συστημάτων αντίδρασης-διάχυσης, κόμβοι μπορούν να θεωρηθούν οι συγκεντρώσεις των ειδών που λαμβάνουν χώρα σε ένα σύστημα αντίδρασης-διάχυσης, όπως σε ένα οικολογικό δίκτυο. Οι σύνδεσμοι στην περίπτωση αυτή, θα αντιπροσωπεύουν τον τρόπο με τον οποίο επικοινωνούν ή συνδέονται οι κόμβοι. Μπορούν να αντιπροσωπεύουν αόριστες έννοιες, όπως η φιλία ή κάποιο συναίσθημα, πόσο καλά γνωρίζονται κάποιοι άνθρωποι, τη γεωγραφική απόσταση των κόμβων, κ.ά.

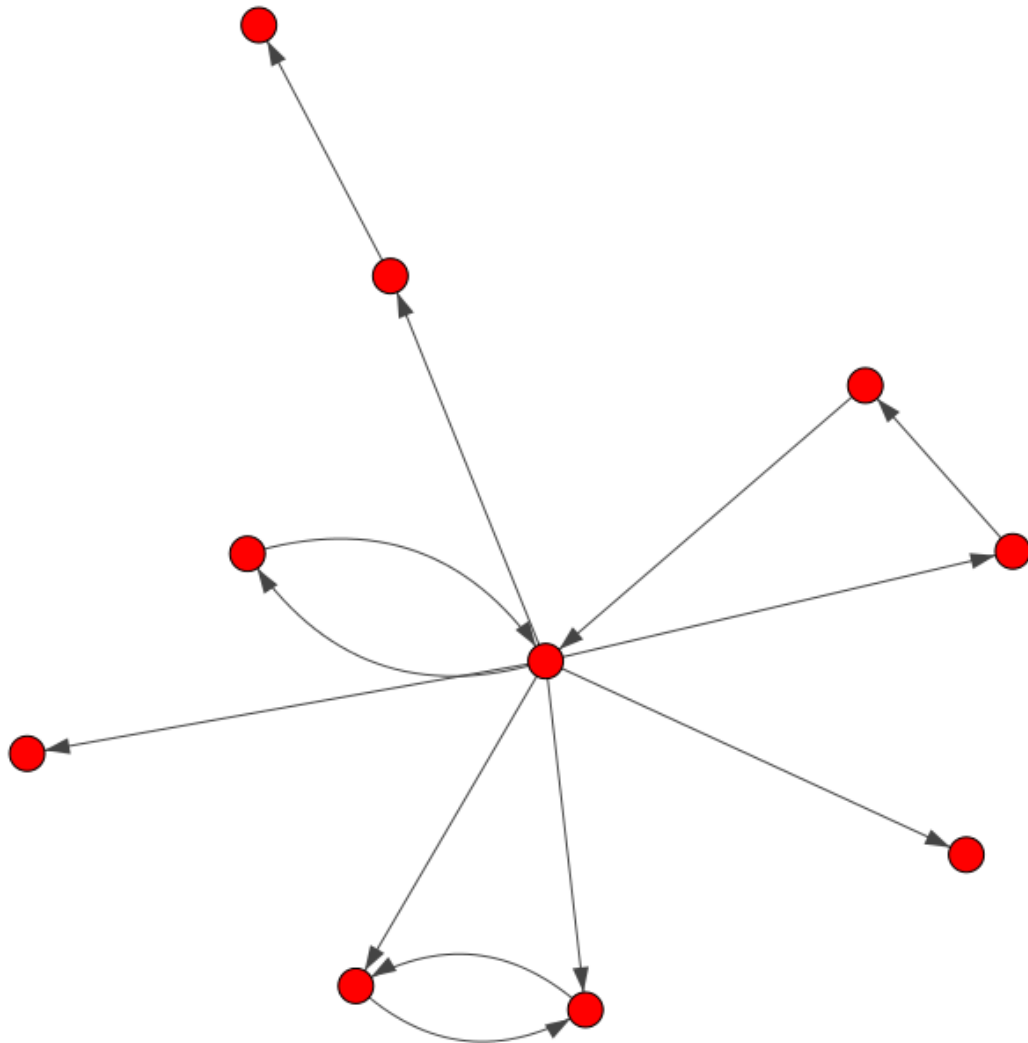
Οι σύνδεσμοι μπορούν να φέρουν κάποιο *βάρος* (*weight*), στην περίπτωση που ο τρόπος που επικοινωνούν οι κόμβοι παρουσιάζει διαβαθμίσεις. Στην περίπτωση αυτή το δίκτυο θα λέγεται *ζυγισμένο ή σταθμισμένο* (*weighed*).

Ακόμα οι σύνδεσμοι μπορούν να δείχνουν κάποια *κατεύθυνση* (*direction*). Δηλαδή γίνεται ένας σύνδεσμος να οδηγεί από έναν κόμβο σε έναν άλλο μόνο - οπότε τότε δείχνουν σε μία μόνο κατεύθυνση - ή γίνεται να οδηγεί από τον έναν κόμβο στον άλλο αμφίδρομα, οπότε τότε θα δείχνει προς δύο αντίθετες κατευθύνσεις. Στην περίπτωση που οι σύνδεσμοι σε ένα δίκτυο δείχνουν μόνο προς τη μία κατεύθυνση, το δίκτυο λέγεται *κατευθυνόμενο* (*directed*). Ένα κατευθυνόμενο δίκτυο μπορεί να είναι *κυκλικό* αν περιέχει κλειστούς βρόχους ή αλλιώς, *μη κυκλικό*. Υπάρχουν και οι *υπερσύνδεσμοι* (*hyperedges*) οι οποίοι ενώνουν μεταξύ τους περισσότερους από δύο κόμβους. Ένα δίκτυο που περιέχει υπερσυνδέσμους λέγεται *υπεργράφος* (*hypergraph*).

Στο Σχήμα 1.5 βλέπουμε ένα παράδειγμα δικτύου. Στο συγκεκριμένο δίκτυο υπάρχουν σύνδεσμοι που δείχνουν σε μία κατεύθυνση αλλά και άλλοι που δείχνουν και στις δύο κατευθύνσεις. Επίσης υπάρχουν ανοιχτοί αλλά και κλειστοί βρόχοι.

1.7.2 Κατηγορίες Δικτύων

Μία μεγάλη ποικιλία φυσικών, τεχνολογικών και κοινωνικών συστημάτων που απαιτούν συνεργασία μεταξύ πολλών μοναδιαίων οντοτήτων, λειτουργούν ως δίκτυα. Δύο σημαντικές κατηγορίες δικτύων, ανάλογα με το είδος ανταλλαγής μεταξύ των κόμβων του δικτύου, είναι τα χωρικά δίκτυα και τα κοινωνικά δίκτυα [105, 106]. Το χαρακτηριστικό των χωρικών δικτύων είναι ότι μεταξύ των κόμβων ανταλλάσσεται μάζα. Παραδείγματα τέτοιων δικτύων είναι τα μεγάλα δίκτυα υποδομών, τα δίκτυα μεταφορών, τα οδικά δίκτυα καθώς και τα αεροπορικά και σιδηροδρομικά δίκτυα, τα δίκτυα ηλεκτροδότησης και παροχής νερού, κ.ά. [107, 108]. Μία πολύ σημαντική τάξη χωρικών δικτύων είναι τα βιολογικά δίκτυα τα οποία περιλαμβάνουν τα νευρωνικά δίκτυα, τα δίκτυα αρτηριών, το βρογχικό δέντρο, τα δίκτυα των ριζών ενός δέντρου, κλπ. Στη δεύτερη μεγάλη κατηγορία, αυτή των κοινωνικών δικτύων, η ποσότητα που μοιράζεται και ανταλλάσσεται μεταξύ των κόμβων του δικτύου, είναι η πληροφορία. Παραδείγματα κοινωνικών δικτύων είναι το Ίντερνετ, το "Facebook", το "LinkedIn", το "Twitter", το δίκτυο των ηθοποιών, το δίκτυο των συμμαθητών, κ.ά. [107, 109]. Και οι δύο παραπάνω κατηγορίες έχουν κερδίσει πολλή προσοχή και έχουν περιγραφεί λεπτομερώς σε πολλές δημοσιεύσεις και βιβλία τα τελευταία δεκαπέντε χρόνια [105, 106, 110, 111, 112, 104, 113].



Σχήμα 1.5: Τυχαίο Παράδειγμα Δικτύου. Οι κόμβοι συμβολίζονται με κόκκινους κύκλους και οι σύνδεσμοι με μαύρα τόξα. Σε κάθε σύνδεσμο υπάρχουν ένα ή δύο βέλη, αναλόγως αν η σύνδεση είναι μονόδρομη ή αμφίδρομη.

Μία τρίτη κατηγορία, η οποία έχει λάβει λιγότερη προσοχή είναι τα δίκτυα "state-space" ή "φασικού χώρου". Τα δίκτυα αυτά αφορούν συστήματα που μεταβαίνουν ανάμεσα σε διάφορες καταστάσεις και είναι συχνά συνδεδεμένα με χρονοσειρές [114, 115, 116]. Για τέτοια συστήματα μπορεί κανείς να προσδιορίσει το αντίστοιχο "αφηρημένο δίκτυο", του οποίου οι κόμβοι είναι οι διάφορες καταστάσεις και οι σύνδεσμοι είναι οι μεταβάσεις από μία κατάσταση σε μία άλλη. Ως τέτοια, τα αφηρημένα δίκτυα ταξινομούνται ως σταθμισμένα δίκτυα, αφού οι σύνδεσμοι μεταξύ των διαφόρων καταστάσεων-κόμβων καθορίζονται (σταθμίζονται) από τις πιθανότητες μετάβασης. Εδώ επικεντρωνόμαστε στις ιδιότητες του αφηρημένου δικτύου καταστάσεων που αντιπροσωπεύει ένα

σύστημα αντίδρασης, όταν ο συνεχής χώρος φάσεων του χωρίζεται σε ένα διακριτό αριθμό κόμβων (δίκτυο καταστάσεων).

Σε προηγούμενες εργασίες έχουν μελετηθεί αφηρημένα δίκτυα που δημιουργούνται από τη δυναμική συμβολοσειρών με συγκεκριμένες εφαρμογές στις ακολουθίες DNA, στην αναγνώριση μοτίβων και σε χαοτικές απεικονίσεις [117, 118]. Αυτά τα δίκτυα βασίζονται σε διακριτούς χώρους φάσεων οι οποίοι αποτελούνται από πεπερασμένες ακολουθίες συμβόλων. Οι κόμβοι προσδιορίζονται από συνδυασμούς πεπερασμένων συμβόλων ή από συγκεκριμένα μοτίβα, ενώ οι σύνδεσμοι προσδιορίζονται είτε με γειτνίαση (proximity) [117] είτε με συνύπαρξη [118] διαφόρων μοτίβων. Τα αφηρημένα δίκτυα στη μορφή γράφων έχουν μελετηθεί επίσης σε σύνδεση με βιολογικές και χημικές διεργασίες από τη δεκαετία 1970 [119]. Στην [119] είχε χρησιμοποιηθεί η θεωρία γράφων για την επίλυση της Άρχουσας Εξίσωσης, περιγράφοντας τις μεταβάσεις δύο μοντέλων (του μοντέλου Schlögl [120] στη Χημεία και του μοντέλου Πόρων Βιολογικών Μεμβρανών (Biological Membrane Pore) στη Βιολογία) μεταξύ των διακριτών χώρων καταστάσεών τους. Και τα δύο μοντέλα περιέχουν μία μεταβλητή και περιγράφονται στο επίπεδο του Μέσου Πεδίου.

1.7.3 Αφηρημένα Δίκτυα Δυναμικών Συστημάτων Αντίδρασης

Ο όρος "αφηρημένα δίκτυα", σε συστήματα αντίδρασης-διάχυσης που παρουσιάζονται και αναπτύσσονται εδώ, δε θα πρέπει να συγχέεται με το κλασσικό πεδίο των "Δικτύων Χημικών Αντιδράσεων" ("Chemical Reaction Networks-CNRs") που έχει μία μακρά ερευνητική ιστορία, κυρίως στη Θεωρητική Χημεία [121, 122]. Στην κλασσική βιβλιογραφία οι επιστήμονες αναφέρονται σε ένα "δίκτυο χημικών αντιδράσεων" ως ένα πεπερασμένο σύνολο αντιδράσεων ανάμεσα σε ένα πεπερασμένο σύνολο χημικών ειδών. Στα CNRs συχνά τα προϊόντα μίας αντίδρασης λειτουργούν ως αντιδραστήρια για άλλες αντιδράσεις. Τα CNRs βρίσκουν πολλαπλές εφαρμογές στη Βιοχημεία και την Αναλυτική Χημεία, ακόμα και στην Κατάλυση [123, 124, 125]. Τα κλασσικά CNRs, στις χωρικές τους αναπαραστάσεις, μπορούν επίσης να λειτουργήσουν υπό ορισμένες συνθήκες ως συστήματα αντίδρασης (ή αντίδρασης-διάχυσης) για την κατασκευή του αντίστοιχου "αφηρημένου δικτύου" όπως θα περιγραφεί στη συνέχεια.

Όπως αναφέραμε ήδη, ένα αφηρημένο δίκτυο κόμβων μπορεί να κατασκευαστεί στο χώρο φάσεων του συστήματος, όταν οι διάφορες διαμερίσεις (N συνολικά) του φασικού χώρου θεωρηθούν ως οι κόμβοι του αφηρημένου δικτύου. Τότε οι σύνδεσμοι

μεταξύ των κόμβων, δηλαδή οι μεταβάσεις από τον έναν κόμβο στον άλλο, θα αντικατοπτρίζουν τη δυναμική του συστήματος. Η διαμέριση του χώρου φάσεων του αφηρημένου δικτύου επιτρέπει τον ορισμό των χαρακτηριστικών του δικτύου αυτού. Καθώς τα κελία του χώρου φάσεων αποτελούν τους κόμβους του δικτύου, η δυναμική του συστήματος καθορίζει τις μεταβάσεις από τον ένα κόμβο (κελίο) στον άλλο. Εάν η δυναμική οδηγεί το σύστημα από ένα κελίο S_i σε ένα άλλο S_j στη διάρκεια ενός επαναληπτικού βήματος, τότε ένας σύνδεσμος δημιουργείται μεταξύ των δύο κόμβων S_i και S_j . Ο σύνδεσμος μεταξύ των κόμβων i και j σταθμίζεται με τη συχνότητα των μεταβάσεων από το κελίο S_i στο κελίο S_j στη συνολική διάρκεια της ολοκλήρωσης του συστήματος. Ο βαθμός (*degree*) d_i του κόμβου (κελίου) S_i ορίζεται ως το κλάσμα του χρόνου που το σύστημα περνάει στο κελίο S_i και ισούται με το άθροισμα των βαρών όλων των συνδέσμων που ξεκινάνε από οποιοδήποτε σημείο του φασικού χώρου και καταλήγουν στο κελίο S_i .

1.7.4 Πίνακας Μεταβάσεων

Σε αυτό το πνεύμα ορίζεται και ο πίνακας μεταβάσεων ή πίνακας συνδεσιμότητας, M , ενός δικτύου. Αλλιώς λέγεται και πίνακας γειτνίασης. Το στοιχείο M_{ij} του πίνακα δηλώνει το κλάσμα των μεταβάσεων από τον κόμβο i στον κόμβο j στη διάρκεια της ολοκλήρωσης του συστήματος. Ο βαθμός d_j του κόμβου j μπορεί να γραφεί ως ένα άθροισμα πάνω στα στοιχεία του πίνακα μεταβάσεων.

$$d_j = \sum_{i=1}^N M_{ij}, \quad \{i, j\} = 1, \dots, N. \quad (1.12)$$

Εν γένει ισχύει ότι $M_{ij} \neq M_{ji}$. Όσον αφορά τα στοιχεία του πίνακα μεταβάσεων, η παρουσία βρόχων σημαίνει ότι $M_{ii} \neq 0$. Στη θεωρία γράφων, γράφοι οι οποίοι περιέχουν βρόχους συχνά ονομάζονται "πολυγράφοι" (multigraphs).

1.7.5 Χαρακτηριστικά Μεγέθη Δικτύων

Για να μελετηθούν τα χαρακτηριστικά ενός δικτύου, χρησιμοποιούνται κάποιοι ποσοτικοί δείκτες οι οποίοι υπολογίζονται από τον πίνακα μεταβάσεων M_{ij} . Με βάση αυτούς τους δείκτες το δίκτυο μπορεί να κατηγοριοποιηθεί στις γενικές κατηγορίες

των τυχαίων (random), μικρού κόσμου (small world) ή κλιμακούμενο δίκτυο (scaling network), κ.ά. Οι ιδιότητες οι οποίες μελετώνται πιο συχνά είναι οι παράμετροι-εκθέτες συσσωμάτωσης και οι εκθέτες κλιμάκωσης. Ο συνολικός αριθμός κόμβων (κελίων) N που καλύπτουν το φασικό χώρο ονομάζεται *μέγεθος του δικτύου* (network size).

Η κατανομή των κόμβων που έχουν βαθμό d συμβολίζεται ως $P(d)$. Η πόσότητα $P(d)$ ονομάζεται *κατανομή βαθμού* (degree distribution), χαρακτηρίζει το δίκτυο συνολικά και το κατατάσσει στα δίκτυα ελεύθερης κλίμακας εάν η $P(d)$ παρουσιάζει κατανομές τύπου νόμου δύναμης [104, 112]:

$$P(d) \sim d^{-\gamma}. \quad (1.13)$$

γ είναι ο εκθέτης νόμου δύναμης που εκφράζει την ελεύθερης κλίμακας φύση του δικτύου και κυμαίνεται συνήθως στο εύρος $2 < \gamma < 3$, παρ'όλο που σε μερικές περιπτώσεις ο γ παίρνει τιμές εκτός αυτού του διαστήματος.

Ένας άλλος σημαντικός δείκτης είναι η *κατανομή $P(m)$ του μεγέθους των στοιχείων του πίνακα συνδεσιμότητας*, η οποία ορίζει το κλάσμα (ποσοστό) των στοιχείων του πίνακα που παίρνουν τιμές μεταξύ m και $m + dm$. Στην περίπτωση των δικτύων ελεύθερης κλίμακας, η κατανομή $P(m)$ ακολουθεί καμπύλη νόμου δύναμης.

$$P(m) \sim m^{-\lambda} \quad (1.14)$$

Οι εκθέτες λ and γ μπορούν να συσχετισθούν μέσω του Γενικευμένου Κεντρικού Οριακού Θεωρήματος (Generalised Central Limit Theorem-GCLT) [78, 126]. Σύμφωνα με αυτό το θεώρημα εάν η κατανομή μεγέθους των στοιχείων του πίνακα συνδεσιμότητας, $P(m)$, ακολουθεί νόμο δύναμης-ή ευσταθή κατανομή-με εκθέτη $1 \leq \lambda \leq 3$, τότε και ο βαθμός d , όντας το άθροισμα ενός αρκετά μεγάλου αριθμού ανεξάρτητων μεταξύ τους και τυχαίων μεταβλητών M_{ij} (από την Εξ.1.12) θα παρουσιάζει κατανομή νόμου δύναμης με τον ίδιο εκθέτη $\gamma = \lambda$. Σε περιπτώσεις όπου τα στοιχεία του πίνακα συνδεσιμότητας M_{ij} δεν είναι ανεξάρτητα μεταξύ τους ή εάν ο αριθμός των στοιχείων είναι περιορισμένος, τότε το Γενικευμένο Κεντρικό Οριακό Θεώρημα δεν ισχύει και τότε $\gamma \neq \lambda$.

Η τοπική παράμετρος συσσωμάτωσης c_l περιγράφει τη δομή του τοπικού δικτύου γύρω από τον ορισμένο κόμβο l και ορίζεται ως:

$$c_l = \frac{\sum_{i,j} M_{li} M_{ij} M_{jl}}{\sum_{i \neq j} M_{li} M_{jl}}, \quad \{i, j\} = 1, \dots, N. \quad (1.15)$$

Στην Εξ. 1.15 ο αριθμητής εκφράζει το συνολικό σταθμισμένο αριθμό κλειστών τριγώνων τα οποία ξεκινούν από και τελειώνουν στον κόμβο l , ενώ ο παρανομαστής εκφράζει τον μέγιστο αριθμό πιθανών τριγώνων που ξεκινούν από τον ίδιο κόμβο [127, 128].

Η κατανομή των συντελεστών συσσωμάτωσης $P(c)$ ορίζει έναν άλλο κρίσιμο εκθέτη β , ο οποίος παίρνει τη μορφή νόμου δύναμης στα δίκτυα ελεύθερης κλίμακας.

$$P(c) \sim c^{-\beta}. \quad (1.16)$$

Οι Watts και Strogatz έχουν δείξει ότι η $P(c)$ μειώνεται εκθετικά για τυχαία και ασυσχέτιστα δίκτυα [129, 130].

Ο ολικός συντελεστής συσσωμάτωσης $c(N)$ ορίζεται ως ο μέσος όρος των τοπικών συντελεστών συσσωμάτωσης και χαρακτηρίζει συνολικά τη συνδεσιμότητα μέσα στο δίκτυο. Εν γένει εξαρτάται από το μέγεθος N του δικτύου.

$$c(N) = \langle c_l \rangle = \frac{1}{N} \sum_{l=1}^N c_l. \quad (1.17)$$

Ο $c(N)$ κατέχει πολύ σημαντική θέση στον χαρακτηρισμό ενός δικτύου. Συγκεκριμένα, στα τυχαία και ασυσχέτιστα δίκτυα μειώνεται ως εξής [129, 104]:

$$c(N) \sim N^{-1}. \quad (1.18)$$

Στην περίπτωση δε των πολύπλοκων δικτύων ελεύθερης κλίμακας, τα οποία παρουσιάζουν και υψηλού βαθμού συσσωμάτωση, η παραπάνω Εξ. 1.17 διαφοροποιείται σε νόμο δύναμης με εκθέτη $\nu \neq 1$:

$$c(N) \sim N^{-\nu}. \quad (1.19)$$

1.7.6 Πώς η Δυναμική του Συστήματος Επηρεάζει τη Μορφή του Πίνακα Μεταβάσεων στην περίπτωση Αφηρημένων Δικτύων

Όπως είπαμε και στην ενότητα 1.7.3, στην περίπτωση των αφηρημένων δικτύων ο χώρος φάσεων χωρίζεται σε κελία και κάθε κελίο αντιστοιχεί σε έναν κόμβο του δικτύου. Η δε συνδεσιμότητα μεταξύ των κόμβων, καθώς, και ο αντίστοιχος πίνακας μετάβασης καθορίζεται από την τροχιά του συστήματος καθώς μεταβαίνει από ένα κελίο του φασικού χώρου σε άλλο. Στην ενότητα αυτή εξετάζουμε πώς η δομή του πίνακα μεταβάσεων αλλάζει ανάλογα με το δυναμικό σχήμα και τη μορφή του χώρου φάσεων. Ενδεικτικά παραδείγματα είναι [96]:

1. Όταν ο χώρος φάσεων περιέχει ένα μόνο σημείο ισορροπίας που είναι ελκυστής, τότε καθώς ο χρόνος πλησιάζει το άπειρο ($t \rightarrow \infty$) όλες οι αρχικές καταστάσεις θα συγκλίνουν σε αυτόν τον ελκυστή.

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow \infty} \vec{X}(t) &= \vec{X}_{fix} \\ &= (x_{1,f}, x_{2,f}, \dots, x_{n,f}) \end{aligned} \quad (1.20)$$

Σε αυτήν την περίπτωση ο πίνακας μεταβάσεων θα περιέχει μόνο ένα μη μηδενικό στοιχείο, το οποίο θα είναι το διαγώνιο στοιχείο που αντιστοιχεί στο κελίο που περιέχει τον ελκυστή.

2. Όταν ο χώρος φάσεων περιέχει πολλούς ελκυστές, τότε καθώς ο χρόνος τείνει στο άπειρο ($t \rightarrow \infty$) κάθε αρχική κατάσταση θα συγκλίνει σε έναν από αυτούς τους ελκυστές, ανάλογα με την αρχική θέση του διανύσματος στο φασικό χώρο. Σε αυτή την περίπτωση ο πίνακας μεταβάσεων θα περιέχει αρκετά μη μηδενικά στοιχεία τα οποία θα είναι διάσπαρτα και θα αντιστοιχούν στα κελία που περιέχουν τους ελκυστές.
3. Όταν ο χώρος φάσεων περιέχει περιοδικές ελκυστικές τροχιές (όπως είναι ο ντετερμινιστικός οριακός κύκλος), το διάνυσμα του χώρου φάσεων θα μπει σύντομα σε μία από αυτές και θα συνεχίσει να κινείται εκεί, ακολουθώντας την τροχιά. Τότε μόνο ένα μέρος του χώρου φάσεων θα είναι ενεργό μακροπρόθεσμα. Το ίδιο ισχύει και για συντηρητικά συστήματα όταν υπάρχει άπειρος αριθμός περιοδικών τροχιών. Αυτές οι συγκεκριμένες κλειστές τροχιές θα αντικατοπτρίζονται στη μορφή του πίνακα μεταβάσεων.

4. Όταν ο χώρος φάσεων περιέχει ένα χαοτικό ελκυστή, τότε το διάνυσμα του χώρου φάσεων θα μπει στον ελκυστή αυτόν και θα παγιδευτεί εκεί συνεχίζοντας να κινείται μόνο στην περιοχή που καλύπτεται από τον ελκυστή. Και σε αυτή την περίπτωση, η δομή του πίνακα μεταβάσεων και οι κρίσιμοι εκθέτες θα χαρακτηρίζουν τη δυναμική της χαοτικής τροχιάς.

Χρειάζεται να σημειωθεί στο σημείο αυτό, ότι για να είναι δυνατή η ακριβής παραγωγή του πίνακα μεταβάσεων, απαιτούνται μεγάλοι χρόνοι ολοκλήρωσης του συστήματος, έτσι ώστε οι αρχικές καταστάσεις να έχουν ξεχαστεί και η συνολική συνεισφορά τους στον πίνακα μεταβάσεων να είναι αμελητέα.

1.8 Θεωρητική Προσέγγιση Γράφου για την Ανάλυση της Άρχουσας Εξίσωσης στο Μέσο Πεδίο

Στην αναφορά [119], η δυναμική της Άρχουσας Εξίσωσης στο Μέσο Πεδίο αναλύεται με τη χρήση μίας θεωρητικής προσέγγισης γράφου. Οι μηχανισμοί αντίδρασης δίνονται από το μοντέλο του Schlögl [120]:



όπου οι A , B και C αποτελούν μοριακές συγκεντρώσεις και διατηρούνται σταθερές, ενώ η μοναδική μεταβλητή είναι η συγκέντρωση του είδους X .

Το σύστημα 1.7 μελετάται στο Μέσο Πεδίο, με τη χρήση μιας αναπαράστασης-δικτύου της Άρχουσας Εξίσωσης. Η αναπαράσταση αυτή περιγράφει τις μεταβάσεις από έναν αριθμό N των X -ατόμων προς έναν αριθμό $N \pm 1$. Στη συγκεκριμένη προσέγγιση, οι μετρητές N αναγνωρίζονται ως διακριτές καταστάσεις, ενώ οι μεταβάσεις επιτρέπονται μόνο μεταξύ καταστάσεων κοντινότερων γειτόνων. Ο φασικός χώρος του συστήματος αυτού (αριθμός των μορίων X) είναι ήδη διακριτός. Ο λόγος που η προσέγγιση στην [119] μπορεί άμεσα να εφαρμοσθεί, είναι ότι περιέχει μία μόνο μεταβλητή και δε λαμβάνει καθόλου υπόψη τους χωρικούς περιορισμούς. Σίγουρα θα ήταν ενδιαφέρον να επεκτείνει κανείς αυτή την προσέγγιση, θεωρώντας και τη διάταξη των μορίων στον χώρο, ακόμα και σε μία χωρική διάσταση (1D). Στο τέταρτο κεφάλαιο θα εφαρμόσουμε μία παρόμοια αντιμετώπιση, κατασκευάζοντας το αφηρημένο δίκτυο κόμβων

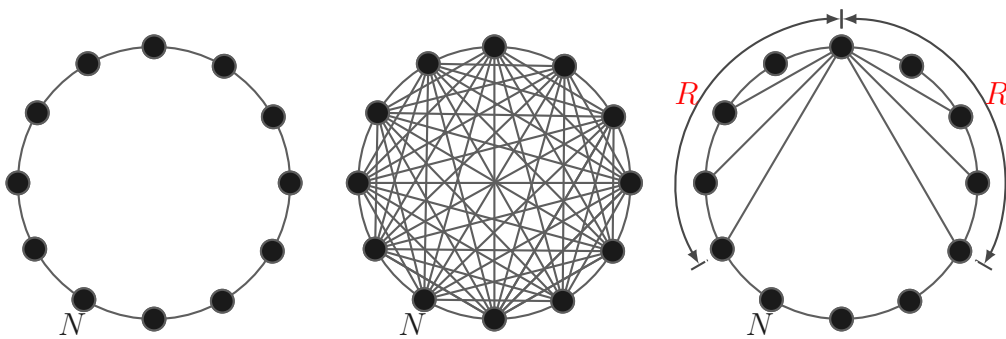
του χώρου φάσεων του μοντέλου LLC. Ο φασικός χώρος σε αυτήν την περίπτωση δεν είναι διακριτός και έτσι θα τον διακριτοποιήσουμε (διαμερίσουμε) εμείς. Επίσης, το μοντέλο μας αποτελείται από δύο μεταβλητές, γεγονός που προσθέτει πολυπλοκότητα στη διαδικασία.

1.9 Σύζευξη ταλαντωτών - Συγχρονισμός Ταλαντωτών

Στο πέμπτο κεφάλαιο θα μελετήσουμε τον συγχρονισμό συζευγμένων οριακών κύκλων LLC σε τοπολογία δακτυλίου. Στις παρακάτω ενότητες εισάγουμε τις έννοιες της σύζευξης και του συγχρονισμού.

1.9.1 Είδη Σύζευξης Ταλαντωτών σε Τοπολογία Δακτυλίου

Αν θεωρήσουμε ταλαντωτές σε τοπολογία δακτυλίου, τότε τα τρία πιο συνηθισμένα είδη σύζευξης των ταλαντωτών είναι α) ολική σύζευξη, στην οποία ο κάθε ταλαντωτής είναι συζευγμένος με όλους τους υπόλοιπους, β) μη τοπική σύζευξη, στην οποία ο κάθε ταλαντωτής είναι συζευγμένος με έναν αριθμό γειτόνων από τα δεξιά και με έναν (συνήα τον ίδιο) αριθμό γειτόνων από τα αριστερά, και γ) τοπική σύζευξη, στην οποία ο κάθε ταλαντωτής είναι συζευγμένος με τους κοντινότερους μόνο γείτονές του, δηλαδή με έναν μόνο ταλαντωτή από τα δεξιά και έναν μόνο ταλαντωτή από τα αριστερά. Οι περιπτώσεις σύζευξης φαίνονται στο Σχήμα 1.6.



Σχήμα 1.6: Είδη Σύζευξης Ταλαντωτών σε Τοπολογία Δακτυλίου. Αριστερά η τοπική σύζευξη, στο κέντρο η ολική σύζευξη και δεξιά η μη τοπική σύζευξη. Το σύνολο των ταλαντωτών είναι N . Στην περίπτωση της μη τοπικής σύζευξης, δεξιά, οι συζευγμένοι γείτονες είναι R από τα δεξιά και R από τα αριστερά.

1.9.2 Συγχρονισμός και Χαρακτηριστικά Μεγέθη του

Η λέξη συγχρονισμός είναι σύνθετη και παράγεται από τις δύο λέξεις "συν" και "χρόνος". Σημαίνει την προσαρμογή-συμφωνία των ρυθμών αυτοσυντηρούμενων [131] περιοδικών ταλαντωτών εξ' αιτίας της μεταξύ τους αλληλεπίδρασης. Όταν οι ταλαντωτές είναι συγχρονισμένοι οι φάσεις των ταλαντωτών είναι όπως λέμε "κλειδωμένες" και οι συχνότητές τους "εγκλωβισμένες". Έτσι δύο ταλαντωτές μπορούν να είναι μεταξύ τους συγχρονισμένοι α) σε φάση, β) σε αντί-φάση, γ) με τυχαία διαφορά φάσης [132, 133].

Το μέγεθος που χρησιμοποιούμε για να ελέγξουμε αν δύο ταλαντωτές είναι μεταξύ τους συγχρονισμένοι, είναι η διαφορά φάσης $\Delta\phi = \phi_2 - \phi_1$, όπου ϕ είναι η φάση της ταλάντωσης, $\frac{d\phi}{dt} = \nu_0$, και ν_0 είναι η φυσική συχνότητα της ταλάντωσης.

Ένα παρόμοιο μέγεθος με τη φάση της ταλάντωσης αποτελεί η μέση φασική ταχύτητα της ταλάντωσης. Η μέση φασική ταχύτητα συμβολίζεται με ω και ισούται με τον αριθμό των περιόδων M της ταλάντωσης ενός ταλαντωτή που υπάρχουν μέσα σε ένα αρκετά μεγάλο χρονικό διάστημα ΔT προς το χρονικό αυτό διάστημα ΔT [134, 135].

Στην περίπτωση που υπάρχουν πολλοί συζευγμένοι μεταξύ τους ταλαντωτές, για τον ταλαντωτή k ισχύει:

$$\omega_k = 2\pi M_k / \Delta T, \quad (1.22)$$

Στατιστικό μέγεθος της διαφοράς φάσης δύο ταλαντωτών i και j , είναι η διαφορά της μέσης φασικής ταχύτητας, $\Delta\omega_{ij} = \omega_j - \omega_i$.

Ο συγχρονισμός ανακαλύφθηκε, τη δεκαετία του 1960, από τον Huygens, ο οποίος το 1956 είχε εφεύρει το εκκρεμές ρολόι [136], στην προσπάθειά του να δημιουργήσει ρολόγια υψηλής ακρίβειας [137]. Σήμερα πλέον υπάρχουν ρολόγια που συγχρονίζονται μεταξύ τους και με ένα κεντρικό ρολόι, μέσω ενός ασθενούς σήματος που στέλνεται κάθε λεπτό και προσαρμόζει το ρυθμό τους (radio-controlled clocks) [133]. Αργότερα, το 1945 ο Lord Rayleigh (John William Strutt) περιέγραψε τον συγχρονισμό ακουστικών συστημάτων [133, 138].

Εκτός από τα κατασκευασμένα ρολόγια, υπάρχουν και τα βιολογικά ρολόγια των ζώντων οργανισμών, τα οποία ρυθμίζονται με σήματα από το περιβάλλον. Αυτές οι περιπτώσεις αντιστοιχούν στον συγχρονισμό εξ' αιτίας κάποιας εξωτερικής δύναμης.

Υπάρχουν, όμως, και περιπτώσεις στις οποίες περισσότεροι από δύο ταλαντωτές συγχρονίζονται μεταξύ τους χωρίς την εφαρμογή κάποιας εξωτερικής δύναμης. Ένα παράδειγμα είναι οι πληθυσμοί των πυγολαμπίδων. Σε έναν πληθυσμό πυγολαμπίδων παρατηρούμε ότι όλες αναβοσβήνουν ταυτόχρονα, είναι λοιπόν συγχρονισμένες και αποτελούν ένα σύνολο αμοιβαία συζευγμένων ταλαντωτών [139]. Η σύζευξη σε αυτή την περίπτωση λέγεται "ολική" (global). Σε κάποιες άλλες περιπτώσεις δε μπορούμε να διαχωρίσουμε τους ταλαντωτές μέσα σε ένα φυσικό σύστημα, όπως συμβαίνει με την αντίδραση Belousoz-Zhabotinsky και τότε θεωρούμε το σύστημα ως συνεχές ταλαντωτικό μέσο [133]. Είναι επίσης γνωστό ότι πολλά φυσικά συστήματα παράγουν χαοτικά σήματα και εμφανίζουν πολύπλοκη συμπεριφορά. Τα συστήματα αυτά, όταν ταλαντώνονται, ονομάζονται χαοτικοί ταλαντωτές και μπορούν να εκδηλώσουν συγχρονισμό, είτε φάσης (σε περίπτωση ασθενούς σύζευξης) είτε ολικό (σε περίπτωση ισχυρής σύζευξης) [133].

1.10 Το Φαινόμενο Συγχρονισμού "Χίμαιρα"-Χιμαιρικές Καταστάσεις

Το φαινόμενο που μελετούμε στην ενότητα αυτή ονομάζεται "χιμαιρική κατάσταση"-chimera state [134]. Η χιμαιρική κατάσταση ή αλλιώς κατάσταση χίμαιρας, είναι μία περίπτωση συγχρονισμού, στην οποία συνυπάρχουν συγχρονισμένοι (coherent) και ασυγχρόνιστοι (incoherent) όμοια συζευγμένοι ταλαντωτές. Αυτός ο σχηματισμός, στην εργασία [140], πήρε το όνομα ενός υβριδικού ζώου της Ελληνικής Μυθολογίας, της "Χίμαιρας", το οποίο είχε χαρακτηριστικά από τρία ζώα, ένα λιοντάρι, ένα φίδι και μία κατσίκα. Πρώτη φορά το φαινόμενο αυτό παρατηρήθηκε από τους Kuramoto και Battogtokh το 2002 [134] σε συστήματα μη τοπικά συζευγμένων ταλαντωτών φάσης, ενώ λίγο αργότερα, το 2004, επαληθεύτηκε από τους Abrams και Strogatz [140] όταν έλαβε και την ονομασία του, πάλι σε σύστημα μη τοπικά συζευγμένων ταλαντωτών φάσης, με λίγο διαφορετική συνάρτηση σύζευξης. Από τότε ένας μεγάλος αριθμός μελετών αφορά τη διερεύνηση ύπαρξης χιμαιρικών καταστάσεων σε διάφορα φυσικά συστήματα. Με αριθμητικό τρόπο έχουν μελετηθεί μοντέλα όπως οι ταλαντωτές φάσης του Kuramoto [141, 142], περιοδικές και χαοτικές απεικονίσεις [143], το μοντέλο των Stuart-Landau [144], αλλά και μοντέλα που περιγράφουν τη δυναμική νευρώνων, όπως το μοντέλο των ταλαντωτών FitzHugh-Nagumo [135] και το Hindmarch-Rose [145]. Αξίζει να σημειωθεί ότι χιμαιρικές καταστάσεις υπάρχουν ακόμα και σε μοντέλα που

εξετάζουν κοινωνικά συστήματα, όπως στην αναφορά [146]. Επίσης το 2014 βρέθηκαν χημειρικές καταστάσεις κατά τη μελέτη του συστήματος SNIPER [147].

Με την πάροδο του χρόνου, το 2012 πραγματοποιήθηκε και η επαλήθευση της ύπαρξης των χημειρικών καταστάσεων πειραματικά σε πληθυσμούς συζευγμένων χημικών ταλαντωτών (μελέτη της φωτοευαίσθητης αντίδρασης Belousov-Zhabotinsky) [148] και σε πλέγματα οπτικών συζευγμένων απεικονίσεων, αναπαραγώμενες από ρυθμιστές φωτός υγρών κρυστάλλων (optical coupled-map lattices realized by liquid-crystal light modulators) [149]. Σε ένα άλλο, καθαρά μηχανικό, πείραμα, το οποίο περιέλαμβανε δύο πληθυσμούς από ίδια μετρονόμια, συζευγμένα μεταξύ τους μέσω ελατηρίων, παρατηρήθηκε το 2013 και πάλι η αυθόρμητη δημιουργία των χημειρικών καταστάσεων [150]. Χημειρικές καταστάσεις παρατηρήθηκαν πρόσφατα και σε ένα πείραμα που αφορούσε ηλεκτρικούς μη γραμμικούς ταλαντωτές με καθυστέρηση [151]. Το 2013 πραγματοποιήθηκε και ένα άλλο πείραμα σε χημικό σύστημα ηλεκτροδιάλυσης νικελίου σε δομή δικτύου. Τα δίκτυα που μελετήθηκαν αποτελούνταν από μη γραμμικούς ομαλούς περιοδικούς, "χαλαρούς" (relaxation) περιοδικούς και χαοτικούς χημικούς ταλαντωτές [152]. Επίσης το 2014 παρατηρήθηκαν πειραματικά χημειρικές καταστάσεις στη μελέτη της ταλαντωτικής φωτοηλεκτροχημικής οξειδωσης του n-ενισχυμένου πυριτίου και της διάλυσης αυτού [153].

Από την πληθώρα πρόσφατων αναφορών στο πεδίο των χημειρικών καταστάσεων, είναι προφανές ότι έλκουν σημαντικό και αυξανόμενο επιστημονικό ενδιαφέρον. Ο λόγος πίσω από αυτή την πραγματικότητα είναι η πιθανή σύνδεση του φαινομένου των χημειρικών καταστάσεων με διάφορα βιολογικά και κοινωνικά φαινόμενα. Σε μία εκτενή αναφορά το 2014 οι Panaggio και Abrams [154] αναφέρουν ότι οι χημειρικές καταστάσεις θα μπορούσαν ίσως να εξηγήσουν το φαινόμενο του unihemispheric ύπνου των δελφινιών και κάποιων πουλιών που κοιμούνται με το ένα μάτι ανοιχτό [155], καθώς και την ασθένεια της κολπικής μαρμαρυγής [156]. Ακόμα μπορεί να προσφέρει εξήγηση στο φαινόμενο του συστήματος ηλεκτροδότησης-τάσης (power grid) οδηγώντας στην επίτευξη σταθερού συγχρονισμού μέσα από τη μελέτη των χημειρικών καταστάσεων [157]. Τέλος μπορεί να εξηγήσει την τροχιά κοινωνικών συστημάτων που αφορούν την εξάπλωση μίας άποψης ή μίας συνήθειας από κάποιο άτομο ή μία κοινωνική ομάδα σε άλλα άτομα ή ομάδες. Συγκεκριμένα στην εργασία [146] για τα κοινωνικά συστήματα το αντικείμενο της μελέτης ήταν δύο social agents συζευγμένοι μεταξύ τους. Τα μοντέλα που χρησιμοποιήθηκαν ήταν οι κοινωνικοί κανόνες του Axelrod [158] σχετικά με τη διάδοση του πολιτισμού (culture dissemination) και το περιορισμένο μοντέλο εμπιστοσύνης του Deffuant [159]. Οι ερευνητές εργάστηκαν με δύο πληθυσμούς εκ των οποίων

ο κάθε ένας βρισκόταν σε δομή δακτυλίου. Η σύζευξη μεταξύ των στοιχείων του κάθε πληθυσμού ήταν μη τοπική. Επιπλέον οι δύο πληθυσμοί ήταν μεταξύ τους συζευγμένοι με μία ολική-global σύζευξη. Το αποτέλεσμα ήταν τέσσερα είδη συγχρονισμού, και ένα από αυτά ήταν οι χιμαιρικές καταστάσεις, καθώς ο ένας υποπληθυσμός βρισκόταν σε κατάσταση συγχρονισμού ενώ ο άλλος υποπληθυσμός βρισκόταν σε κατάσταση μη συγχρονισμού [146].

1.11 Δομή της Διατριβής

Στο δεύτερο και στο τρίτο κεφάλαιο αναλύουμε το Πλεγματικό Μοντέλο Οριακού Κύκλου (LLC) και τις ιδιότητές του στο Μέσο Πεδίο. Προσομειώνουμε το σύστημα εφαρμόζοντας τη μέθοδο KMC σε διασδιάστατο πλέγμα και εισάγουμε μία "ενεργό" προσέγγιση του Μέσου Πεδίου. Μελετάμε δύο μηχανισμούς ανάμειξης του συστήματος, την αντίδραση μεγάλης απόστασης και τη διάχυση μεγάλης απόστασης. Παρουσιάζουμε πώς η στοχαστικότητα της μεθόδου και η χρήση του υποβάθρου διαφοροποιεί την KMC προσομοίωση από την πρόβλεψη του Μέσου Πεδίου. Επίσης δείχνουμε ότι στην περίπτωση αντίδρασης μικρής αλλά και μεγάλης απόστασης, η "ενεργός" προσέγγιση του Μέσου Πεδίου είναι ακριβής, ενώ δε συμβαίνει το ίδιο για την περίπτωση της διάχυσης μεγάλης απόστασης.

Στο τέταρτο κεφάλαιο κατασκευάζουμε ένα αφηρημένο δίκτυο κόμβων βασισμένο σε διαμερίσεις του φασικού χώρου του μοντέλου LLC. Στη συνέχεια, υπολογίζουμε βασικά χαρακτηριστικά του αφηρημένου δικτύου, σύμφωνα με τα οποία το κατατάσσουμε στην κατηγορία των δικτύων ελεύθερης κλίμακας.

Στο πέμπτο κεφάλαιο αναζητούμε την ύπαρξη χιμαιρικών καταστάσεων στο σύστημα LLC. Η δομή μας αποτελείται από μη τοπικά συζευγμένους LLC ταλαντωτές σε τοπολογία δακτυλίου. Για την επαλήθευση των χιμαιρικών καταστάσεων χρησιμοποιούμε τη μέση φασική ταχύτητα των ταλαντώσεων. Στη συνέχεια μεταβάλλουμε τις τιμές των βασικών παραμέτρων του συστήματος για να μελετήσουμε τη μεταβολή της συμπεριφοράς των χιμαιρικών καταστάσεων. Επιβεβαιώνουμε την ύπαρξη χιμαιρικών καταστάσεων και δείχνουμε πώς η μεταβολή των βασικών παραμέτρων του προβλήματος επηρεάζει την πολλαπλότητα των παρατηρούμενων χιμαιρικών καταστάσεων.

Στο έκτο κεφάλαιο παραθέτουμε τα συμπεράσματα της εργασίας μας καθώς και ιδέες και ανοιχτά προβλήματα προς μελέτη στο μέλλον. Επίσης στο τέλος έχουμε συμπεριλάβει τρία παραρτήματα στα οποία δίνονται κάποιες μαθηματικές αποδείξεις και τα κυριότερα σημεία των αλγορίθμων που αναπτύχθηκαν.

Κεφάλαιο 2

Το Πλεγματικό μοντέλο Οριακού Κύκλου (LLC)

2.1 Δομή του Κεφαλαίου

Στο κεφάλαιο αυτό θα μελετήσουμε το Μοντέλο Πλεγματικού Οριακού Κύκλου (ΠΟΚ) ή Lattice Limit Cycle Model (LLC). Θα δούμε τις ιδιότητες του μοντέλου στο Μέσο Πεδίο και θα αναλύσουμε τον τρόπο προσομοίωσης του μοντέλου, πάνω σε ένα υπόστρωμα δύο διαστάσεων και συγκεκριμένα πάνω σε ένα τετραγωνικό πλέγμα. Η μέθοδος προσομοίωσης που θα χρησιμοποιήσουμε είναι η KMC.

2.2 Το Πλεγματικό Μοντέλο Οριακού Κύκλου

Στο παρελθόν οικολογικά δυναμικά μοντέλα είχαν χρησιμοποιηθεί για την περιγραφή της αλληλεπίδρασης μεταξύ πολλαπλών ειδών-σωματιδίων, μέσω μιας προσέγγισης Μέσου Πεδίου για την ανάλυση γενικευμένων δυναμικών χαρακτηριστικών [92, 160] ή μέσω αριθμητικών προσομοιώσεων για την ανάλυση ιδιαίτερων λεπτομερειών των χωρικών και χρονικών χαρακτηριστικών των συστημάτων αυτών [31, 95, 161, 162].

Το μοντέλο Οριακού Πλεγματικού Κύκλου (ΠΟΚ) είναι ένα μη γραμμικό σύστημα που περιγράφει αντιδράσεις (reactions) και διαδικασίες γέννησης-θανάτου (birth-and-death processes) και μελετάει πώς οι συγκεντρώσεις διάφορων ειδών μεταβάλλονται με

το χρόνο, υπό την επίδραση συγκεκριμένων παραμέτρων ελέγχου. Συγκεκριμένα, περιγράφει τις αλληλεπιδράσεις ανάμεσα σε τρία ανταγωνιστικά σωματίδια-είδη, σε μία αλυσίδα αντιδράσεων κυνηγού-θηράματος [33, 163, 164]. Στις παρακάτω ενότητες θεωρούμε ότι το σύστημα ζει, αντιδρά και κινείται σε επιφάνεια δύο διαστάσεων, η οποία ορίζεται από ένα τετραγωνικό πλέγμα. Σημειώνουμε ότι παρ'όλο που η περιγραφή του συστήματος εδώ περιορίζεται στις δύο διαστάσεις (τετραγωνικό πλέγμα), η μέθοδος είναι γενική και μπορεί εύκολα να επεκταθεί σε περισσότερες διαστάσεις ή πλέγματα άλλης γεωμετρίας (π.χ. τριγωνικό, εξαγωνικό, κλπ). Τα σωματίδια λοιπόν, ζουν-υπάρχουν σε αυτό το δισδιάστατο τετραγωνικό πλέγμα όπου κάθε κελίο μπορεί να καταληφθεί από ένα μόνο σωματίδιο X ή Y ή μπορεί να είναι κενό. Κάθε είδος δρα ως κυνηγός για ένα από τα άλλα δύο είδη. Συμβολίζουμε με X , Y τα δύο αλληλεπιδρώντα σωματίδια, ενώ ως S θεωρούμε ένα πλασματικό (υποθετικό) σωματίδιο, που αναπαριστά ένα άδειο κελίο. Κάθε κελίο μπορεί να περιέχει ένα και μόνο ένα σωματίδιο ή μπορεί να είναι κενό. Τα άδεια κελία, τα οποία αντιπροσωπεύονται από τα σωματίδια S , αλληλεπιδρούν με τα κατειλημμένα κελία, όπως θα περιγράψουμε παρακάτω.

Αρχικά, τα σωματίδια (άτομα των ειδών X , Y και S) κατανέμονται τυχαία στο πλέγμα, υπό συγκεκριμένες αρχικές συνθήκες. Κάθε σωματίδιο μπορεί να αλληλεπιδρά με τους κοντινότερους γείτονές του με δεδομένο ρυθμό. Ο τρόπος με τον οποίο τα σωματίδια αλληλεπιδρούν το ένα με το άλλο αποδίδεται με το σχήμα:



Η σχέση 2.1.α περιγράφει την κύρια αλληλεπίδραση μεταξύ των σωματιδίων X και Y . Είναι μία αντίδραση με τέταρτης τάξης μη γραμμικότητα. Για να πραγματοποιηθεί αυτή η αντίδραση απαιτούνται δύο σωματίδια X και δύο σωματίδια Y . Όταν αυτά τα σωματίδια βρεθούν αρκετά κοντά (ως πρώτοι γείτονες) τότε, με ρυθμό p_1 , το ένα από τα δύο X μετατρέπεται σε Y , ενώ το δεύτερο X εξαφανίζεται (πεθαίνει) αφήνοντας το κελίο του κενό (S). Στην αντίδραση αυτή ως θηρευτής θεωρείται το είδος Y και ως θήραμα το είδος X . Η σχέση 2.1.β περιγράφει τον τρόπο με τον οποίο δημιουργείται το σωματίδιο X . Συγκεκριμένα, όταν ένα σωματίδιο X βρεθεί κοντά (ως πρώτος γείτονας) με ένα κενό κελίο S , τότε, με ρυθμό p_2 , ένα άλλο X δημιουργείται και καταλαμβάνει το προηγούμενως κενό κελίο S , του οποίου η κατάσταση αλλάζει από S σε

X . Στην αντίδραση αυτή το X λειτουργεί ως θηρευτής του S . Η σχέση 2.1.γ περιγράφει τον τρόπο με τον οποίο το σωματίδιο Y καταστρέφεται. Όταν ένα σωματίδιο Y βρεθεί κοντά (ως πρώτος γείτονας) σε ένα άδειο κελίο S , τότε, με ρυθμό p_3 , το σωματίδιο Y εξαφανίζεται, αφήνοντας το κελίο του κενό δηλαδή η κατάσταση του κελίου μετατρέπεται από Y σε S . Στην αντίδραση αυτή το S λειτουργεί ως θηρευτής του είδους Y . Στη συνέχεια, για τις ανάγκες της μεθόδου Kinetic Monte Carlo, στην ενότητα 2.4 οι ρυθμοί των αντιδράσεων θα μετατραπούν σε πιθανότητες αντίδρασης που θα χρησιμοποιηθούν στον αλγόριθμο προσομοίωσης.

2.3 Η Κλασσική Θεωρία Μέσου Πεδίου

Στην ενότητα αυτή μελετάμε τις ιδιότητες του συστήματος στο Μέσο Πεδίο. Πλέον εργαζόμαστε χρησιμοποιώντας τις συγκεντρώσεις (x, y, z) των ατόμων του κάθε είδους. Εάν N είναι ο συνολικός αριθμός των δυνατών θέσεων του πλέγματος τότε οι στιγμιαίες συγκεντρώσεις x, y, z ορίζονται ως: $x(t) = \frac{N_x(t)}{N}$, $y(t) = \frac{N_y(t)}{N}$, $z(t) = \frac{N_z(t)}{N}$ και $N_x(t)$, $N_y(t)$, $N_z(t)$ είναι ο συνολικός αριθμός των X, Y, Z σωματιδίων αντίστοιχα.

Οι μη γραμμικές κινητικές εξισώσεις, που περιγράφουν τη μεταβολή των συγκεντρώσεων των σωματιδίων, εμφανίζουν, όπως προαναφέραμε, τέταρτης τάξης μη γραμμικότητα και είναι οι εξής:

$$\frac{dx}{dt} = -2p_1x^2y^2 + p_2xs \quad (2.2.α)$$

$$\frac{dy}{dt} = p_1x^2y^2 - p_3ys \quad (2.2.β)$$

$$\frac{ds}{dt} = p_1x^2y^2 - p_2xs + p_3ys. \quad (2.2.γ)$$

Όπως και στο Μοντέλο LLV έτσι και στο LLC ισχύει ότι $\frac{d(x+y+s)}{dt} = 0$ και συνεπώς ικανοποιείται η συνθήκη διατήρησης του χώρου

$$x + y + s = \text{const.} \quad (2.3)$$

Σε κάθε αντίδραση δηλαδή, ο συνολικός αριθμός των σωματιδίων διατηρείται σταθερός. Έτσι ξέρουμε ότι το μοντέλο LLC μπορεί να εφαρμοσθεί πάνω σε ένα πλεγμα.

Η σταθερά διατήρησης επιλέγεται ίση με τη μονάδα, οπότε η συνθήκη διατήρησης γίνεται:

$$x + y + s = 1. \quad (2.4)$$

Με τον τρόπο αυτό οι συγκεντρώσεις x , y και s ερμηνεύονται πια ως μερικές συγκεντρώσεις των σωματιδίων X , Y και των άδειων κελίων (S) αντίστοιχα.

Χρησιμοποιώντας τώρα τη συνθήκη διατήρησης (Εξ. 2.4), το σύστημα των τριών εξισώσεων 2.2.α 2.2.β, 2.2.γ μειώνεται σε σύστημα δύο εξισώσεων (θέτοντας $s = 1 - x - y$):

$$\frac{dx}{dt} = -2p_1x^2y^2 + p_2x(1 - x - y) \quad (2.5.α)$$

$$\frac{dy}{dt} = p_1x^2y^2 - p_3y(1 - x - y) \quad (2.5.β)$$

Αυτό το μειωμένο σύστημα παρουσιάζει τέσσερις λύσεις ή αλλιώς καταστάσεις ισορροπίας (steady states), τρεις από τις οποίες είναι τετριμμένες και αντιστοιχούν σε πλήρη κατάληψη του πλέγματος από ένα από τα τρία είδη. Ο υπολογισμός των σημείων ισορροπίας παρουσιάζεται στο Παράρτημα Α. Οι τρεις τετριμμένες λύσεις μπορούν να παρουσιαστούν ως διανύσματα κατάστασης στις μειωμένες διαστάσεις (x και y). Συγκεκριμένα:

$$Q_1 = (0, 0) \text{ (άδειο πλέγμα),}$$

$$Q_2 = (0, 1) \text{ (πλέγμα πλήρως κατειλημμένο από τα } Y \text{) και}$$

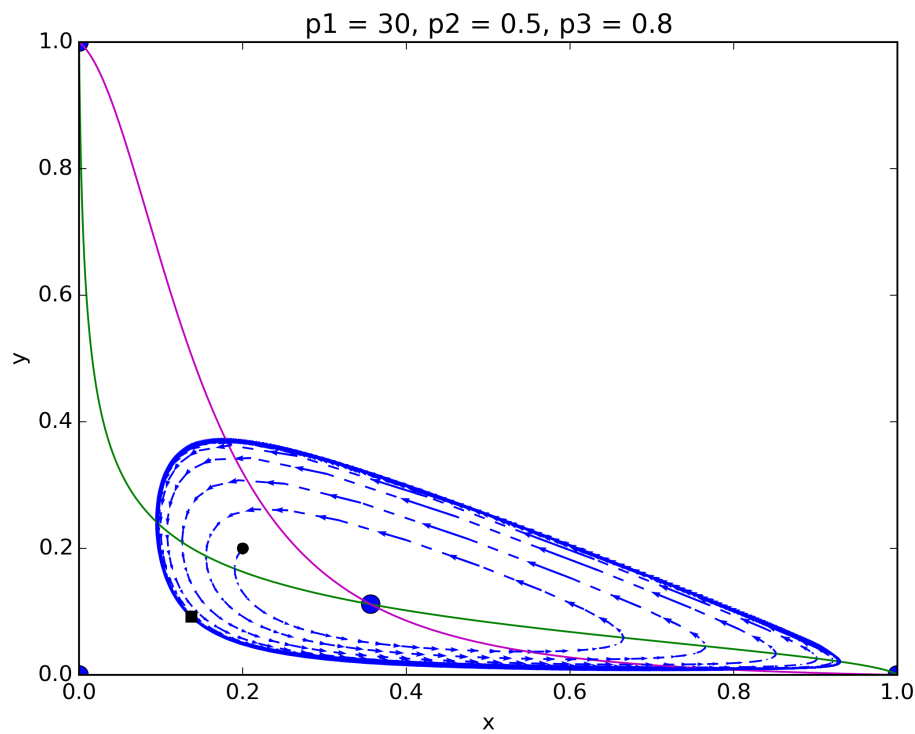
$$Q_3 = (1, 0) \text{ (πλέγμα πλήρως κατειλημμένο από τα } X \text{).}$$

Επιπρόσθετα το σύστημα 2.5 παρουσιάζει και μία τέταρτη λύση (βλέπε Παράρτημα Α) η οποία είναι μη τετριμμένη. Αυτή η λύση υποστηρίζει τη συνύπαρξη όλων των ειδών X , Y και S .

$$Q_4 = \left(\sqrt[3]{\frac{p_3^2}{p_1p_2} [1 + K]} + \sqrt[3]{\frac{p_3^2}{p_1p_2} [1 - K]}, \right. \\ \left. \sqrt[3]{\frac{p_2^2}{8p_1p_3} [1 + K]} + \sqrt[3]{\frac{p_2^2}{8p_1p_3} [1 - K]} \right) \quad (2.6)$$

όπου η σταθερά K είναι συνάρτηση των τριών ρυθμών αντίδρασης και ισούται με $K = \sqrt{1 + (2p_3 + p_2)^3 / (27p_1p_2p_3)}$.

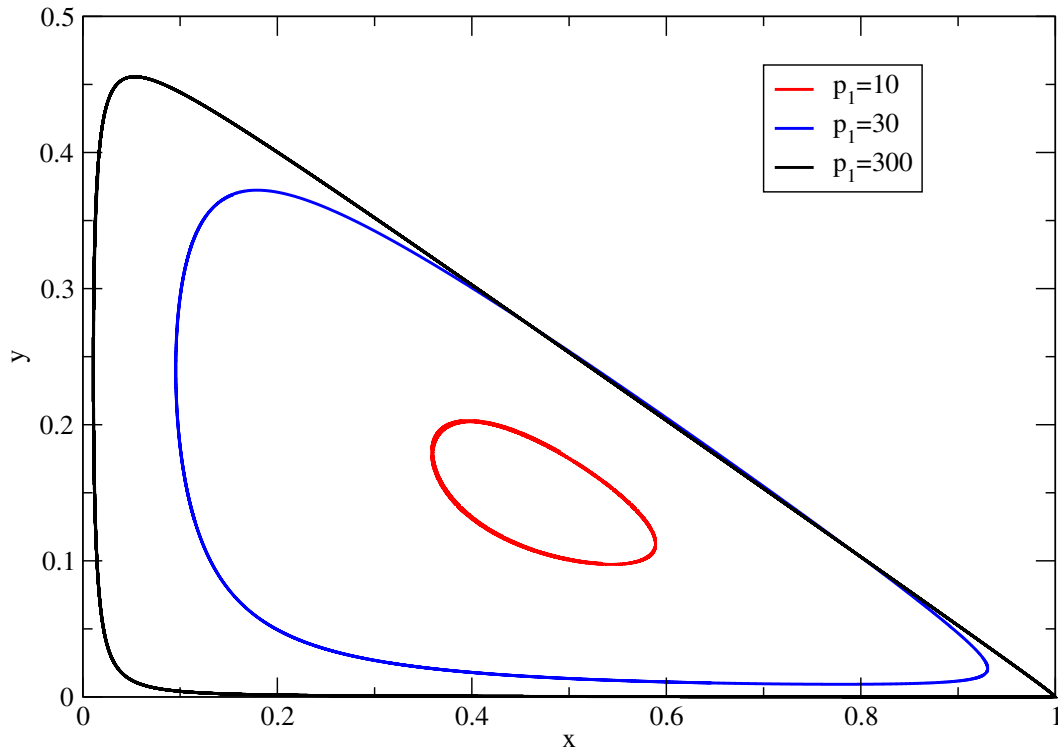
Για να κατανοήσουμε τη δομή του χώρου των φάσεων γύρω από τα σημεία ισορροπίας χρησιμοποιούμε ανάλυση ευστάθειας για τα σημεία ισορροπίας [33]. Οι αντίστοιχοι υπολογισμοί βρίσκονται στο Παράρτημα Β. Στο Σχήμα 2.1 φαίνεται το διάγραμμα φάσης του συστήματος. Εκτός από τα σημεία ισορροπίας, σχεδιάζουμε και τις γραμμές ροής μηδενικής κλίσης (nullclines) και παρατηρούμε ότι το κέντρο του οριακού κύκλου (παχιά μπλε γραμμή) ταυτίζεται με το σημείο τομής των δύο γραμμών ροής μηδενικής κλίσης. Ένα πιο λεπτομερειακό διάγραμμα δίνεται στο Παράρτημα Β.



Σχήμα 2.1: Το διάγραμμα φάσης του συστήματος για $p_1 = 30$, $p_2 = 0.5$ και $p_3 = 0.8$.

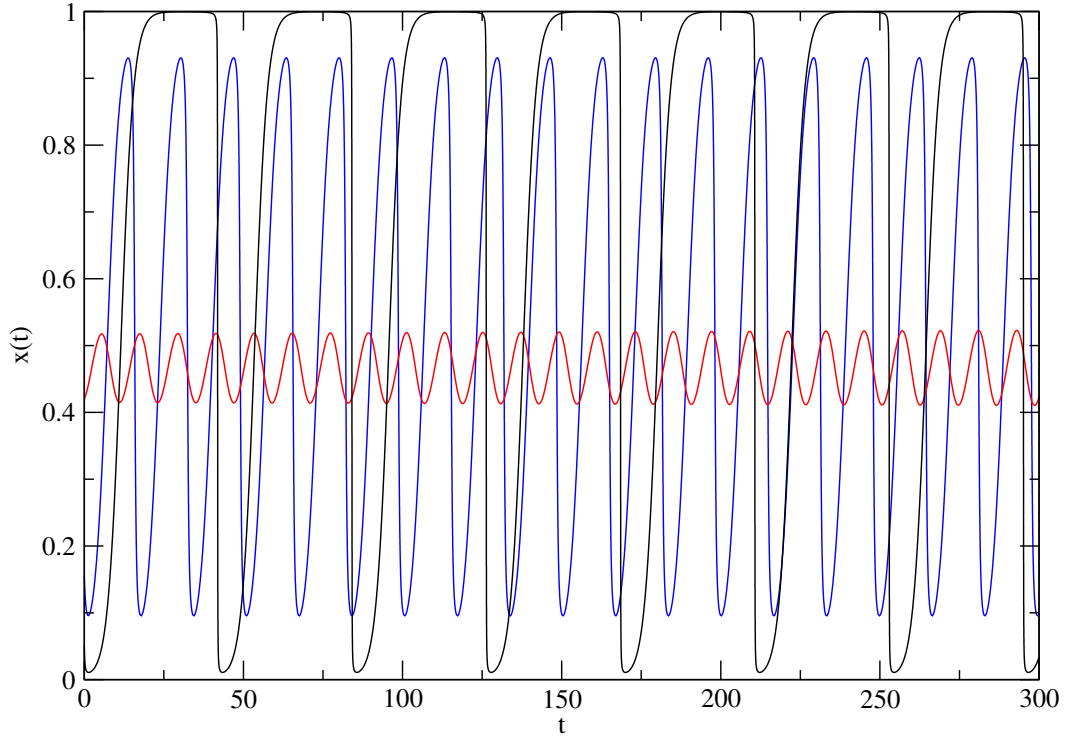
Όπως προκύπτει, τα τρία πρώτα τετριμμένα σταθερά σημεία είναι σάγματα ενώ η ευστάθεια του τέταρτου σταθερού σημείου εξαρτάται από τις τιμές των παραμέτρων. Για παράδειγμα για σταθερές παραμέτρους ($p_2 = 0.5$, $p_3 = 0.8$) το Q_4 περνάει από μία διακλάδωση τύπου Hopf όταν $p_{1c} = 9.8228$ και μετατρέπεται σε ασταθή εστία. Στην κοντινή περιοχή ένας οριακός κύκλος εμφανίζεται. Στο Σχήμα 2.2 βλέπουμε περιπτώσεις του οριακού κύκλου για διάφορες τιμές της παραμέτρου διακλάδωσης p_1 . Οι παράμετροι p_2 , p_3 διατηρούνε σταθερή τιμή ($p_2 = 0.5$, $p_3 = 0.8$). Βλέπουμε ότι όσο πιο κοντά είναι η τιμή της p_1 στο σημείο διακλάδωσης, τόσο πιο μικρός είναι ο οριακός κύκλος. Αντίθετα, αν $p_1 \gg p_{1c}$, δηλαδή αν η p_1 βρεθεί αρκετά μακριά από το σημείο

διακλάδωσης, παρατηρούμε ότι ο οριακός κύκλος μεγαλώνει και τείνει να αποκτήσει τριγωνική μορφή. Οι κορυφές του υποθετικού τριγώνου, που περιορίζουν τον οριακό κύκλο είναι τα τρία σημεία ισορροπίας Q_1 , Q_2 και Q_3 .



Σχήμα 2.2: Ο οριακός κύκλος του συστήματος για τρεις διαφορετικές τιμές της παραμέτρου διακλάδωσης p_1 . Η κόκκινη γραμμή αντιστοιχεί σε $p_1 = 10$ η μπλε γραμμή αντιστοιχεί σε $p_1 = 30$ και η μαύρη γραμμή αντιστοιχεί σε $p_1 = 300$. Οι άλλες παράμετροι και στις τρεις περιπτώσεις είναι $p_2 = 0.5$ και $p_3 = 0.8$.

Αντίστοιχα στο Σχήμα 2.3 βλέπουμε τις χρονικές μεταβολές της συγκέντρωσης του X για κάθε μία περίπτωση $p_1 = 300$, $p_1 = 30$ και $p_1 = 10$ και επαληθεύουμε ότι το πλάτος των ταλαντώσεων και γενικά η μορφή τους εξαρτάται από τις τιμές των παραμέτρων και συγκεκριμένα από την παράμετρο διακλάδωσης p_1 . Παρατηρούμε δηλαδή ότι όταν η p_1 παίρνει τιμές κοντά στην τιμή της διακλάδωσης, τότε οι ταλαντώσεις είναι σχεδόν αρμονικές και έχουν πολύ μικρό πλάτος (κόκκινη γραμμή), αντιστοιχώντας στον μικρό οριακό κύκλο. Όσο μεγαλώνει η p_1 τόσο αλλοιώνεται η αρμονικότητα των ταλαντώσεων και μεγαλώνει το πλάτος τους (μπλε γραμμή που αντιστοιχεί στο μεσαίο οριακό κύκλο και μαύρη γραμμή που αντιστοιχεί στον μεγάλο οριακό κύκλο). Δηλαδή στην περίπτωση του οριακού κύκλου οι συγκεντρώσεις των X και Y ταλαντώνονται περιοδικά, ενώ το πλάτος και η μορφή των ταλαντώσεων εξαρτάται και από τις παραμέτρους του συστήματος.



Σχήμα 2.3: Οι ταλαντώσεις της συγκέντρωσης x στο Μέσο Πεδίο. Το πλάτος τους εξαρτάται από την παράμετρο διακλάδωσης, p_1 . Η κόκκινη γραμμή αντιστοιχεί σε $p_1 = 10$ η μπλε γραμμή αντιστοιχεί σε $p_1 = 30$ και η μαύρη γραμμή αντιστοιχεί σε $p_1 = 300$. Οι άλλες παράμετροι και στις τρεις περιπτώσεις ισούνται με $p_2 = 0.5$ και $p_3 = 0.8$.

Στο σημείο αυτό θα ήταν καλό να σημειωθεί ότι η περιγραφή Μέσου Πεδίου είναι κατάλληλη για την περιγραφή των κύριων φαινομενολογικών τάσεων του συστήματος, αλλά δεν ενδείκνυται όταν υπάρχουν χωρικοί περιορισμοί και στοχαστικά φαινόμενα, όπως θα δούμε στην επόμενη ενότητα 2.4.

2.4 Αλγόριθμος KMC για το μοντέλο LLC

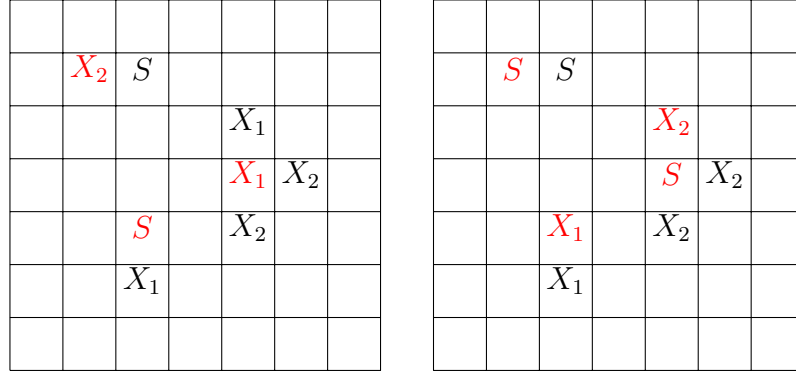
Όπως αναφέραμε στην Εισαγωγή, η μέθοδος προσομοίωσης KMC είναι μία μέθοδος διακριτών χρόνων στην οποία η προσομοίωση ξεκινάει από μία αρχικά τυχαία κατανομή των ειδών X , Y και S πάνω στο πλέγμα και στην οποία η εξέλιξη είναι τυχαία και σειριακή, ακολουθώντας το σχήμα αντίδρασης του μοντέλου του Πλεγματοκού Οριακού Κύκλου (LLC). Ως υπόστρωμα χρησιμοποιείται ένα δισδιάστατο τετραγωνικό πλέγμα μεγέθους $V = L \times L$ και κάθε σωματίδιο αλληλεπιδρά μόνο τοπικά με τους κοντινότερους γείτονές του, όπως φαίνεται στο Σχήμα 2.4. (Αργότερα στις ενότητες 3.3

και 3.4, θα επιτραπεί επιπλέον στοχαστική σύζευξη μεγάλης απόστασης με άλλα πιο μακρινά κελία του πλέγματος). Κάθε κελίο με συντεταγμένες (i, j) , μπορεί να περιέχει μόνο ένα σωματίδιο X ή Y ή να είναι άδειο (S).

Αρχικά τα τρία είδη είναι τυχαία κατανεμημένα στο πλέγμα με δοσμένες αρχικές συγκεντρώσεις. Κάθε στοιχειώδες βήμα ETS του αλγορίθμου KMC αποτελείται από έξι στάδια:

1. Ένα κελίο, (i, j) , επιλέγεται τυχαία πάνω στο πλέγμα.
2. Εάν το κελίο (i, j) περιλαμβάνει ένα σωματίδιο Y και ανάμεσα στους τέσσερις κοντινότερους γείτονες βρεθεί ένα σωματίδιο του τύπου S , τότε η κατάσταση του κελίου (i, j) μετατρέπεται από Y σε S με πιθανότητα p_3 . Αυτή είναι η πραγματοποίηση της αντίδρασης (2.1.γ).
3. Εάν ένα κελίο (i, j) περιλαμβάνει ένα σωματίδιο S και ανάμεσα στους κοντινότερους γείτονες βρεθεί ένα σωματίδιο τύπου X , τότε η κατάσταση του κελίου (i, j) αλλάζει από S σε X με πιθανότητα p_2 . Αυτή είναι η πραγματοποίηση της αντίδρασης (2.1.β).
4. Εάν το κελίο (i, j) περιέχει ένα σωματίδιο X , και στην άμεση γειτονία του (τέσσερις κοντινότεροι γείτονες) περιέχονται ένα σωματίδιο X και δύο σωματίδια Y , τότε το αρχικό σωματίδιο X καθώς και το γειτονικό σωματίδιο X μετατρέπονται ταυτόχρονα σε S και Y , με πιθανότητα p_1 . Αυτή είναι η πραγματοποίηση της αντίδρασης (2.1.α).
5. Εάν κανένα από τα παραπάνω τρία βήματα δε μπορεί να πραγματοποιηθεί, το πλέγμα διατηρείται αμετάβλητο.
6. Ένα βήμα ETS ολοκληρώνεται. Ο αλγόριθμος επανέρχεται στο στάδιο (1) για την εκκίνηση ενός καινούργιου βήματος ETS.

Όπως έχει προαναφερθεί, κάθε βήμα Monte Carlo Time Step (MCS) αποτελείται από L^2 στοιχειώδη βήματα ETS ($1 \text{ MCS} = L^2 \text{ ETS}$) ώστε σε κάθε MCS κάθε σωματίδιο έχει αντιδράσει κατά μέσο όρο μία φορά. Ο παραπάνω KMC αλγόριθμος είναι μία λίγο διαφοροποιημένη εκδοχή του αλγορίθμου που είχε προταθεί στην αναφορά [33], με σκοπό να παρέχει συνοχή μεταξύ των αντιδράσεων μικρής απόστασης που μελετώνται αρχικά στην [33] και στις αντιδράσεις μεγάλης απόστασης τις οποίες θα μελετήσουμε στη συνέχεια.

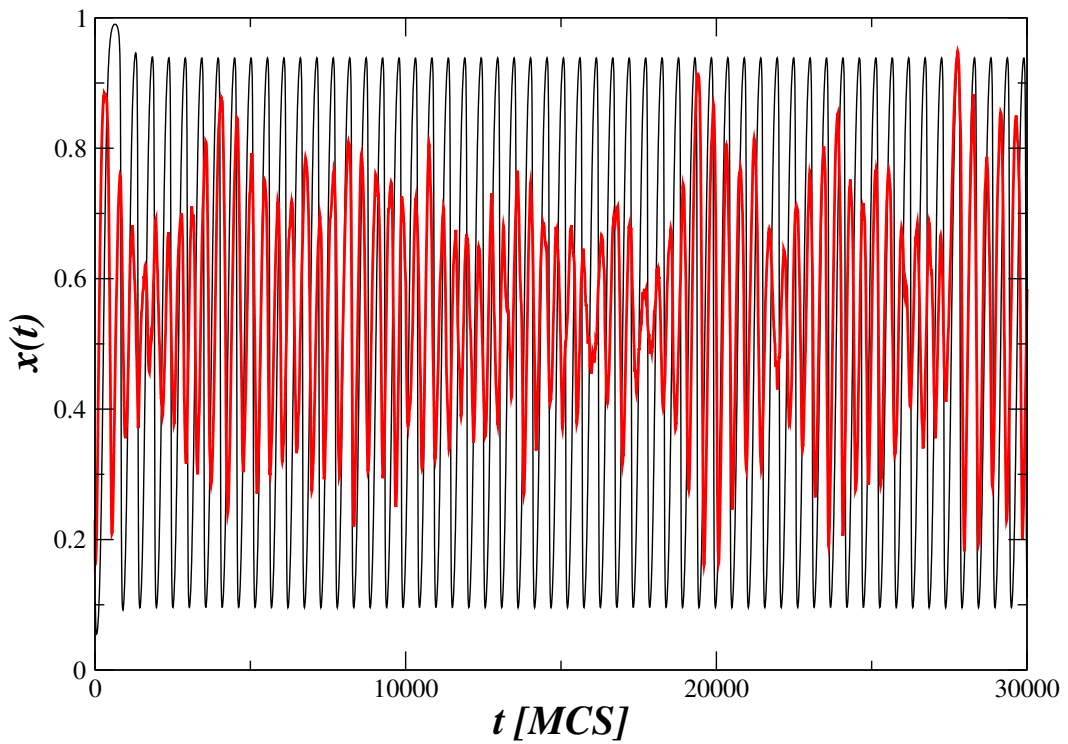


Σχήμα 2.4: Παράδειγμα τρόπου πραγματοποίησης των αντιδράσεων, σε τοπικό επίπεδο, στο πλέγμα. Αριστερά φαίνεται η αρχική κατάσταση κάποιων τυχαία επιλεγμένων σωματιδίων στο πλέγμα και αριστερά φαίνεται η τελική τους κατάσταση, αφού έχουν πραγματοποιηθεί οι αντίστοιχες αντιδράσεις.

Για τη μελέτη μας επιλέγουμε τις εξής τιμές των παραμέτρων: $p_1 = 0.9585$, $p_2 = 0.016$ και $p_3 = 0.026$. Οι τιμές αυτές αποτελούν καλή επιλογή γιατί βρίσκονται κεντρικά μέσα στην περιοχή που αντιστοιχεί στη διακλάδωση Hopf, στο διάγραμμα ευστάθειας, και έτσι παράγουν περιοδικές ταλαντώσεις με μεγάλο πλάτος [33]. Επιπλέον οι τιμές επιλέχθηκαν να είναι $p_i \leq 1$, έτσι ώστε να μπορούν άμεσα να ερμηνευθούν ως πιθανότητες αντίδρασης στο σχήμα KMC. Σε περιπτώσεις όπου ο ρυθμός κάθε αντίδρασης είναι μεγαλύτερος από τη μονάδα, οι ρυθμοί αυτοί μπορούν να μετατραπούν σε πιθανότητες με δύο τρόπους: α) είτε διαιρώντας κάθε έναν από αυτούς με το άθροισμα όλων των p_i (δηλαδή $p_i \rightarrow p_i / \sum p_j$, $i, j = 1, 2, 3$) ή β) διαιρώντας κάθε p_i με το μέγιστο αυτών των ρυθμών αντίδρασης, $p_{max} = \max(p_1, p_2, p_3)$ (δηλαδή $p_i \rightarrow p_i / p_{max}$, $i = 1, 2, 3$). Και στις δύο περιπτώσεις, αυτή η αλλαγή κλίμακας αντιστοιχεί σε αλλαγή κλίμακας του χρόνου [33]. Ας σημειωθεί ότι ο λόγος πίσω από τη μεγάλη διαφορά ανάμεσα στην τιμή της p_1 και των τιμών των p_2 και p_3 είναι η εξισορρόπηση της εξαιρετικά επιλεκτικής και μεγάλης μη γραμμικότητας της αντίδρασης (2.1.α).

Στο Σχήμα 2.5 βλέπουμε, συγκριτικά, τη χρονική εξέλιξη της συγκέντρωσης x στην περίπτωση του Μέσου Πεδίου και στην περίπτωση των KMC προσομοιώσεων. Παρατηρούμε αυτό που ήδη περιμένουμε. Στο Μέσο Πεδίο (μαύρη λεπτή γραμμή), μετά από μία περίοδο προσαρμογής, έχουμε ταλάντωση με σταθερό πλάτος, που αντιστοιχεί στον οριακό κύκλο. Το πλάτος αυτό εξαρτάται αποκλειστικά από τις τιμές των παραμέτρων p_1 , p_2 και p_3 . Αντίθετα στις προσομοιώσεις (κόκκινη παχιά γραμμή), λόγω των χωρικών περιορισμών του συστήματος και του στοχαστικού θορύβου, έχουμε ταλάντωση με αυξομειούμενο πλάτος (intermittent) [33, 34, 165]. Δηλαδή, ενώ η περίοδος (και η

συχνότητα) των ταλαντώσεων είναι πολύ κοντά μεταξύ τους, στην περίπτωση των προσομοιώσεων παρουσιάζουν ξαφνικές διαλειπτικές εκτινάξεις (intermittent), όσον αφορά το πλάτος τους. Στη βιβλιογραφία αυτού του είδους οι ανώμαλες/ακανόνιστες ταλαντώσεις αναφέρονται και ως διαλειπτικές, ενώ στην ακουστική είναι γνωστές ως διακροτήματα. Σημειώνουμε ότι στη συγκεκριμένη περίπτωση έχουμε εργαστεί σε σύστημα μεγέθους $L \times L = 2^7 \times 2^7$. Παρόμοια, ακολουθώντας τους ίδιους ποιοτικούς κανόνες, είναι και η δυναμική συμπεριφορά των άλλων δύο ειδών, Y , S .



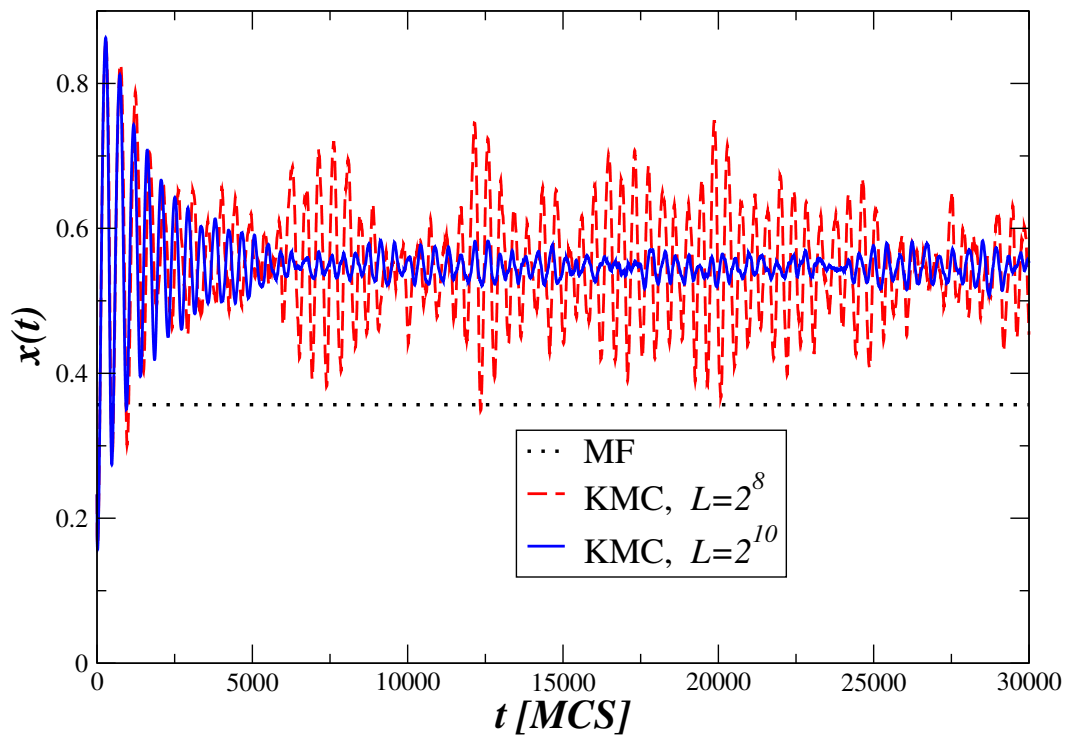
Σχήμα 2.5: Χρονική εξέλιξη της συγκέντρωσης x στο μοντέλο LLC για τιμές των παραμέτρων $p_1 = 0.9585$, $p_2 = 0.016$, $p_3 = 0.026$ και μέγεθος πλέγματος $L = 2^7$. Η συνεχής μαύρη γραμμή αναπαριστά την ολοκλήρωση στο Μέσο Πεδίο με καθαρά περιοδική ταλάντωση, ενώ η παχιά κόκκινη γραμμή αναπαριστά την προσομοίωση KMC με ακανόνιστη διαλειπτική ταλάντωση.

Έχοντας δει την επίπτωση της προσομοιωτικής μεθόδου και της εισαγωγής του πλέγματος, στη συγκέντρωση των ειδών στο πλέγμα, ας μελετήσουμε αν η επίδραση αυτή εντείνεται ή όχι αλλάζοντας το μέγεθος του πλέγματος.

Στο Σχήμα 2.6 αποδίδεται η μέση συγκέντρωση του είδους X σε όλο το πλέγμα, ως συνάρτηση του χρόνου, για δύο διαφορετικά πλεγματικά μεγέθη, $L = 2^8$ (κόκκινη διακεκομμένη γραμμή) και $L = 2^{10}$ (μπλε συνεχής γραμμή). Παρατηρούμε ότι καθώς

το μέγεθος του πλέγματος αυξάνεται, το πλάτος των ταλαντώσεων των συγκεντρώσεων μειώνεται.

Επίσης μπορούμε να διακρίνουμε ότι ενώ η τιμή της μεταβλητής x που αντιστοιχεί στη θέση του κέντρου του οριακού κύκλου, για τις συγκεκριμένες τιμές των παραμέτρων, είναι $x_c = 0.36$, η τιμή που δίνουν οι ταλαντώσεις είναι κάπως μεγαλύτερη. Στο Σχήμα 2.6 η θέση του κέντρου στο Μέσο Πεδίο αποδίδεται με τη μαύρη διακεκομμένη γραμμή (μαύρες τελείες).



Σχήμα 2.6: Χρονοσειρά της μέσης συγκέντρωσης του είδους X (δηλαδή της συγκεντρώσεως $x(t)$) για διαφορετικά πλεγματικά μεγέθη. Παρατηρούνται διαλειπτικές ταλαντώσεις. Οι τιμές των παραμέτρων είναι $p_1 = 0.9585$, $p_2 = 0.016$ και $p_3 = 0.026$. Η διακεκομμένη μαύρη γραμμή δηλώνει τη θέση της κατάστασης ισορροπίας στο Μέσο Πεδίο, σύμφωνα με την Εξ. 2.6.

Συγκεντρώνοντας τα βασικά συμπεράσματά μας [33] μπορούμε να πούμε πως ο περιορισμός της δυναμικής αντίδρασης πάνω σε ένα χωρικό υπόβαθρο (πλέγμα), τα φαινόμενα της χωρικής κατανομής των σωματιδίων και ο στοχαστικός θόρυβος εισάγουν τις εξής αλλαγές στη συμπεριφορά Μέσου Πεδίου: α) οι ταλαντώσεις χάνουν την κανονικότητά τους και γίνονται διαλειπτικές, β) το πλάτος των διαλειπτικών ταλαντώσεων μειώνεται καθώς το μέγεθος του συστήματος L αυξάνεται, και αυτό αποδίδεται στις στοχαστικές επιπτώσεις που τυχαioποιούν τις φάσεις των ταλαντωτών οριακού κύκλου

και γ) παρατηρείται μία μικρή μετατόπιση του κέντρου των KMC κύκλων σε σχέση με τη λύση Μέσου Πεδίου.

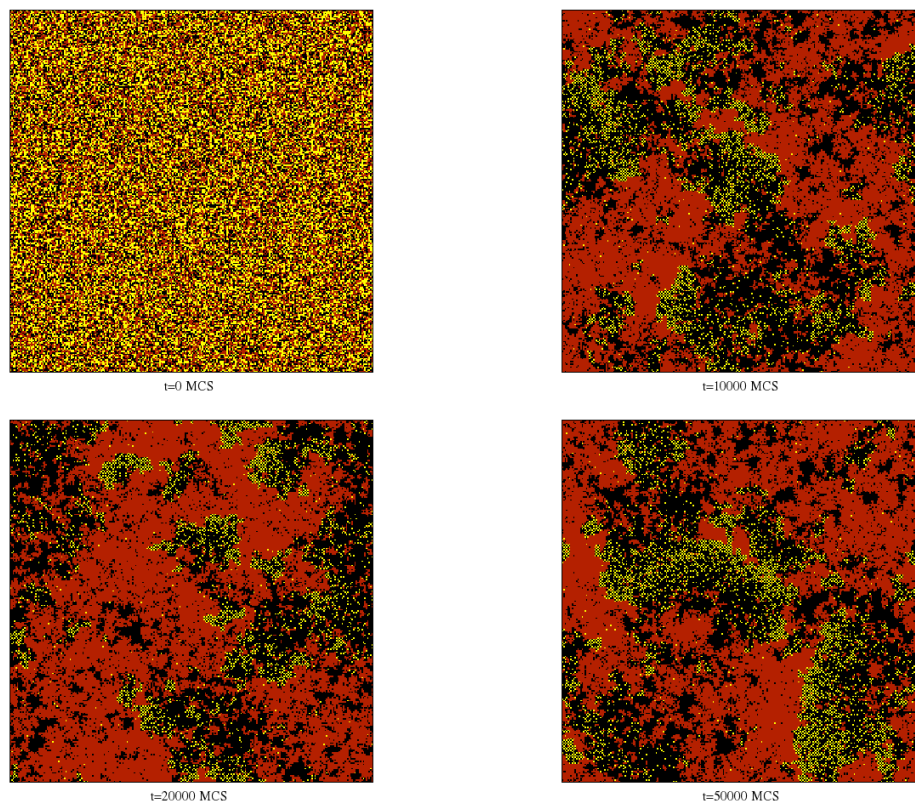
Το Σχήμα 2.7 δείχνει τυπικά παραδείγματα στιγμιοτύπων των προσομοιώσεων *KMC*, σε τέσσερις διαφορετικές χρονικές στιγμές. Αρχικά (όταν $T = 0MCS$) όλα τα σωματίδια είναι ισόποσα και ομοιόμορφα κατανεμημένα στο πλέγμα. Καθώς ο χρόνος περνάει, πραγματοποιούνται συσσωματώματα ανάμεσα σε ομόλογα σωματίδια, με τους κυνηγούς (κίτρινο χρώμα) να εμφανίζονται κατά κύριο λόγο στα σύνορα μεταξύ των κόκκινων κελίων (θηράματα) και των μαύρων κελίων (άδειοι χώροι). Αυτό συμβαίνει γιατί οι κυνηγοί καταναλώνουν τα θηράματα και αφήνουν τα αντίστοιχα κελία άδεια, μέσω της αντίδρασης 2.1.α. Επιπροσθέτως, τα θηράματα (κόκκινο χρώμα) αναπαράγονται, μέσω της αντίδρασης 2.1.β γεμίζοντας τα άδεια κελία (μαύρο χρώμα), ενώ οι κυνηγοί (κίτρινο χρώμα) πεθαίνουν μέσω της αντίδρασης 2.1.γ, αφήνοντας τα κελία τους άδεια (μαύρο χρώμα). Επομένως, αντιλαμβανόμαστε πως οι αντιδράσεις λαμβάνουν χώρα στις διεπαφές μεταξύ των συσσωματωμάτων, τα οποία μεγαλώνουν ή μικραίνουν επηρεάζοντας αντίστοιχα το μέγεθος των γειτονικών τους συσσωματωμάτων. Με τον τρόπο αυτό, τα διάφορα κελία αλλάζουν χρώμα διαδοχικά καθώς οι διεπαφές των συσσωματωμάτων "ταξιδεύουν" διασχίζοντας το πλέγμα.

2.5 Συμπεράσματα

Το μοντέλο *LLC* παρουσιάζει τέσσερα σημεία ισορροπίας, εκ των οποίων ιδιαίτερο ενδιαφέρον παρουσιάζει το τέταρτο, το οποίο δύναται, μετά από μία διακλάδωση Hopf, να οδηγήσει σε οριακό κύκλο.

Το μέγεθος του οριακού κύκλου επηρεάζεται από την παράμετρο διακλάδωσης του συστήματος. Με τον ίδιο τρόπο επηρεάζεται το πλάτος των συγκεντρώσεων των ειδών, οι οποίες ταλαντώνονται με την πάροδο του χρόνου.

Όταν προσομοιώνουμε το σύστημα με τη μέθοδο *KMC* τότε οι ταλαντώσεις των συγκεντρώσεων γίνονται διαλειπτικές. Επίσης το πλάτος των ταλαντώσεων αυτών μειώνεται καθώς αυξάνεται το μέγεθος του υποστρώματος (δηλαδή του τετραγωνικού πλέγματος) πάνω στο οποίο μελετάμε το μοντέλο. Επίσης το κέντρο του οριακού κύκλου μετατοπίζεται σε σχέση με τη θέση που δίνει το Μέσο Πεδίο. Οι μεταβολές αυτές οφείλονται στη στοχαστικότητα της μεθόδου προσομοίωσης καθώς και στη χρήση του υποστρώματος το οποίο επιβάλλει μία εξωτερική συνθήκη στη δυναμική του συστήματος.



Σχήμα 2.7: Αναπαραστατικά στιγμιότυπα της χρονικής μεταβολής των συγκεντρώσεων των ειδών στο σύστημα. Το κόκκινο χρώμα συμβολίζει το είδος X (θήραμα), το κίτρινο χρώμα συμβολίζει το είδος Y (κυνηγός), ενώ το μαύρο χρώμα συμβολίζει το πλασματικό είδος S . Οι χρόνοι σημειώνονται και στα διαγράμματα: α) $T = 0 \text{ MCS}$, β) $T = 10000 \text{ MCS}$, γ) $T = 20000 \text{ MCS}$ και δ) $T = 50000 \text{ MCS}$.

Τέλος, καθώς οι αλληλεπιδράσεις πραγματοποιούνται, τα τρία είδη δημιουργούν μεταβαλλόμενα συσσωματώματα πάνω στο πλέγμα.

Κεφάλαιο 3

Ενεργές Παράμετροι, Αντίδραση και Διάχυση Μεγάλης Απόστασης στο μοντέλο LLC

3.1 Δομή του Κεφαλαίου

Στο κεφάλαιο αυτό εισάγουμε μία ενεργό προσέγγιση Μέσου Πεδίου στην ανάλυση των προσομοιώσεων Kinetic Monte Carlo. Επίσης μελετάμε τη συμπεριφορά του συστήματος όταν επιτρέψουμε τη λειτουργία δύο μηχανισμών ανάμειξης του συστήματος, την Αντίδραση Μεγάλης Απόστασης και τη Διάχυση Μεγάλης Απόστασης.

3.2 Προσέγγιση Μέσου Πεδίου με τη χρήση Ενεργών Παραμέτρων

Όπως έχουμε ήδη δει οι στοχαστικές επιδράσεις και οι χωρικοί περιορισμοί διαφοροποιούν τη δυναμική αντίδρασης του συστήματος σε σχέση με τη συμπεριφορά του στο Μέσο Πεδίο. Εκτός από τη στοχαστικότητα που εισάγεται στο πλάτος των ταλαντώσεων συμβαίνει και κάτι άλλο, πολύ σημαντικό. Η θέση του κέντρου του οριακού κύκλου στο διάγραμμα φάσης μεταβάλλεται. Η θέση του κέντρου ορίζεται μόνο από τις παραμέτρους αντίδρασης p_1 , p_2 και p_3 . Επομένως είναι λογικό να αναζητήσουμε την

αιτία της αλλαγής στη θέση του κέντρου, σε πιθανή αλλαγή των τιμών αυτών των παραμέτρων κατά τη διάρκεια των προσομοιώσεων, εξαιτίας των χωρικών και στοχαστικών φαινομένων.

Για το σκοπό αυτό, υπολογίζουμε, εκ των υστέρων-a posteriori, τις "ενεργές" παραμέτρους αντίδρασης, οι οποίες ρεαλιστικά προκύπτουν κατά τη διάρκεια των προσομοιώσεων KMC. Σε πολλές περιπτώσεις, όταν ένα σωματίδιο επιλέγεται προς αντίδραση με ευνοϊκό ρυθμό, το εν δυνάμει γεγονός της συγκεκριμένης αντίδρασης μπορεί τελικά να μη συμβεί, εξαιτίας του ακατάλληλου περιβάλλοντος (εάν τα σωματίδια που αποτελούν τους κοντινότερους γείτονές του δεν είναι τα κατάλληλα) ή λόγω στοχαστικής επιλογής. Με τον τρόπο αυτό ο ρυθμός με τον οποίο γίνεται η κάθε αντίδραση μεταβάλλεται και έτσι καινούργιοι "ενεργοί" ρυθμοί κυβερνούν τη δυναμική του συστήματος. Αυτοί οι ρυθμοί υπολογίζονται a posteriori μέσα στον αλγόριθμο που δίνουμε στην ενότητα 2.4, όπως δείχνουμε παρακάτω.

Συγκεκριμένα, στη διάρκεια εφαρμογής του αλγορίθμου εισάγουμε τρεις μετρητές των συμβάντων των αντιδράσεων N_1 , N_2 και N_3 , οι οποίοι αυξάνουν κατά μία μονάδα όταν οι αντιδράσεις 2.1.α, 2.1.β και 2.1.γ λαμβάνουν χώρα αντίστοιχα. Οι "ενεργές" παράμετροι p'_i , $i = 1, 2, 3$, υπολογίζονται ως εξής [166]:

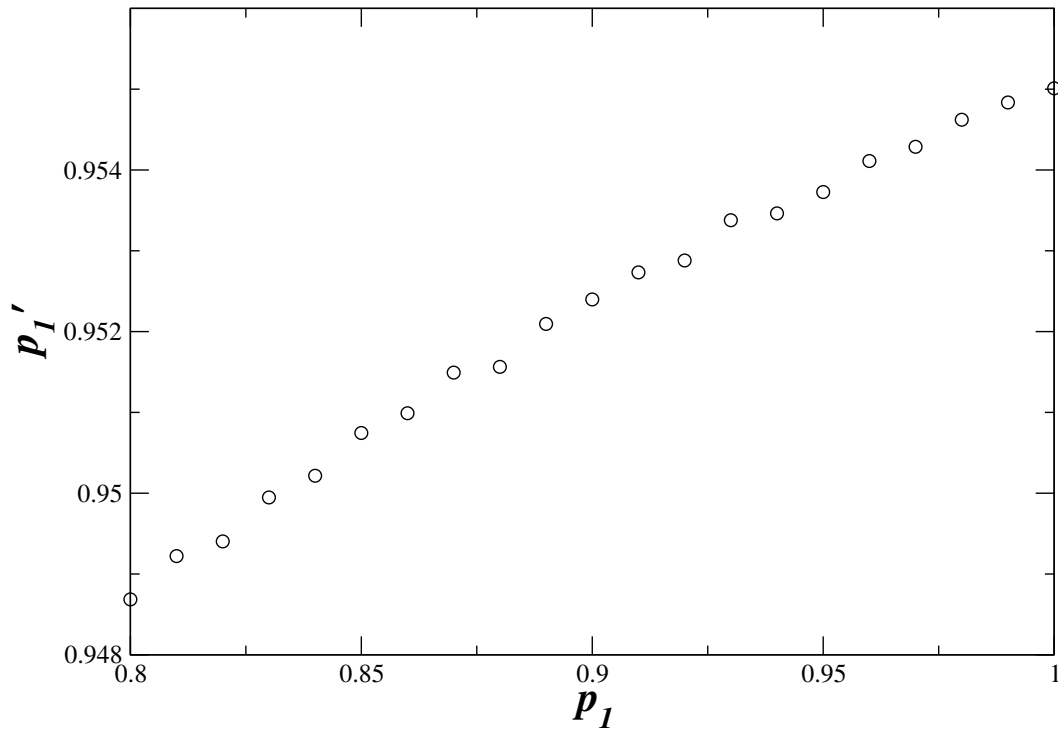
$$p'_1 = \frac{N_1}{\langle x \rangle^2 \langle y \rangle^2}, \quad (3.1.α)$$

$$p'_2 = \frac{N_2}{\langle x \rangle \langle s \rangle}, \quad (3.1.β)$$

$$p'_3 = \frac{N_3}{\langle s \rangle \langle y \rangle} \quad (3.1.γ)$$

Ως παράδειγμα, στο Σχήμα 3.1, η "ενεργός" τιμή p'_1 σχεδιάζεται για διάφορες τιμές της p_1 , όταν οι άλλες παράμετροι p_2 και p_3 διατηρούνται σταθερές. Από την εικόνα, φαίνεται καθαρά ότι καθώς αυξάνεται η πιθανότητα αντίδρασης p_1 , αυξάνεται ανάλογα και η "ενεργός" πιθανότητα αντίδρασης η οποία εξομαλύνει όλες τις τοπικές επιδράσεις.

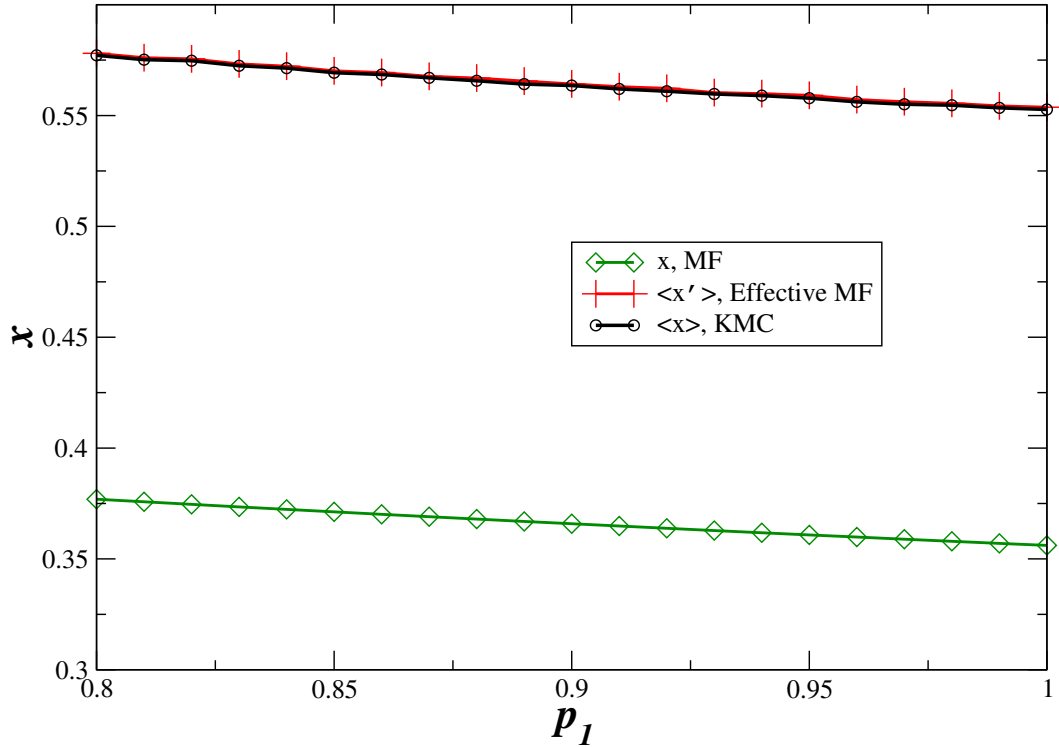
Χρησιμοποιώντας τις "ενεργές" παραμέτρους p'_i , οι "ενεργές" τιμές-συγκεντρώσεις της στάσιμης κατάστασης του Μέσου Πεδίου x' , y' και s' υπολογίζονται χρησιμοποιώντας την Εξ. 2.6, στην οποία οι κινητικές παράμετροι αντικαθίστονται με τις "ενεργές".



Σχήμα 3.1: Μέση "ενεργός" πιθανότητα αντίδρασης p'_1 ως συνάρτηση της επιβεβλημένης αρχικά πιθανότητας αντίδρασης p_1 . Οι τιμές των άλλων παραμέτρων είναι: $p_2 = 0.016$ και $p_3 = 0.026$ και το μέγεθος του συστήματος είναι $L = 2^9$. Ο μέσος όρος υπολογίζεται πάνω σε 10 προσομοιώσεις του συστήματος. Οι γραμμές σφάλματος στις τιμές p'_1 είναι της τάξης του 4×10^{-4} .

Τα αποτελέσματα σχεδιάζονται στο Σχήμα 3.2 για διάφορες τιμές της αρχικής παραμέτρου p_1 και κρατώντας τις άλλες δύο σταθερές ($p_2 = 0.016$ and $p_3 = 0.026$). Συγκεκριμένα, στο Σχήμα 3.2 οι τρεις καμπύλες αναπαριστούν α) τη μέση τιμή $\langle x \rangle$ όπως προκύπτει απ'ευθείας από τις προσομοιώσεις KMC και υπολογισμένη από δέκα δείγματα με διαφορετικές αρχικές τιμές και στοχαστικό θόρυβο (μαύρη γραμμή με κύκλους), β) την υπολογισμένη "ενεργό" μερική συγκέντρωση x' του σωματιδίου X , που αντιστοιχεί στο Μέσο Πεδίο, χρησιμοποιώντας τις "ενεργές" πιθανότητες p'_i στην εξίσωση Μέσου Πεδίου 2.6 (κόκκινη γραμμή με σταυρούς) και γ) την αρχική μερική συγκέντρωση x , που αντιστοιχεί στο Μέσο Πεδίο, χρησιμοποιώντας τις αρχικές πιθανότητες p_i στην εξίσωση Μέσου Πεδίου 2.6 (πράσινη γραμμή με διαμάντια). Το απλό Μέσο Πεδίο σίγουρα δίνει τιμές που απέχουν από τις μέσες μερικές πληθυσμιακές συγκεντρώσεις, ενώ το "ενεργό" Μέσο Πεδίο δίνει μία πολύ καλή προσέγγιση στα αποτελέσματα των KMC προσομοιώσεων. Τα παραπάνω αποτελέσματα καταδεικνύουν ότι όσον αφορά τις συγκεντρώσεις που αντιστοιχούν στις συντεταγμένες του κέντρου του Πλεγματικού

Οριακού Κύκλου (LLC), ο περιορισμός του συστήματος στο υπόστρωμα μαζί με τον στοχαστικό χαρακτήρα των αντιδράσεων, οδηγούν σε νέες "ενεργές" τιμές των παραμέτρων, ενώ συγχρόνως οι συντεταγμένες του Μέσου Πεδίου επιτυγχάνονται για αυτές τις διαφοροποιημένες τιμές των παραμέτρων.

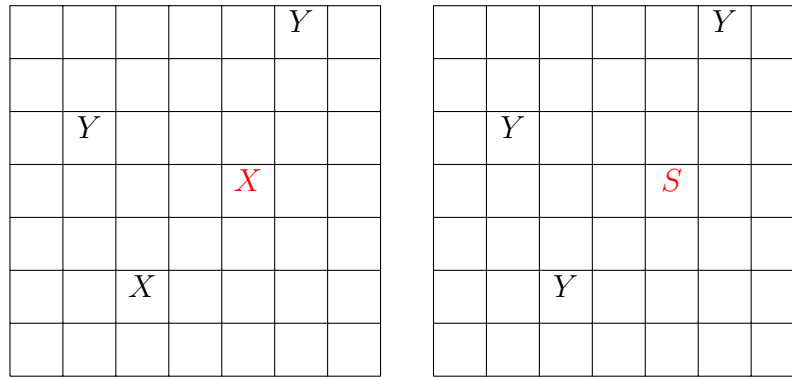


Σχήμα 3.2: Μέση "ενεργός" συγκέντρωση x'_1 (κόκκινη γραμμή με σταυρούς) και μέση KMC μερική συγκέντρωση $\langle x \rangle$ (μαύρη γραμμή με κύκλους) ως συνάρτηση της επιβεβλημένης σύζευξης αντίδρασης (reactive coupling) p_1 . Προς σύγκριση, σχεδιάζεται επίσης και η μερική συγκέντρωση Μέσου Πεδίου x (χρησιμοποιώντας τις αρχικές τιμές p_i). Οι τιμές των άλλων παραμέτρων είναι: $p_2 = 0.016$ και $p_3 = 0.026$ και το μέγεθος του συστήματος είναι: $L = 2^9$. Οι μέσες τιμές $\langle x \rangle$, $\langle x' \rangle$ έχουν υπολογιστεί πάνω σε δέκα προσομοιώσεις.

3.3 Αντίδραση Μεγάλης Απόστασης

Στην ενότητα αυτή θα επιτρέψουμε στα σωματίδια του πλέγματος να αλληλεπιδρούν σε μεγάλη ακτίνα. Θα εισάγουμε την έννοια της "αντίδρασης σε μεγάλη απόσταση". Το κάθε σωματίδιο X , Y ή S θα έχει τη δυνατότητα να αλληλεπιδρά με έναν από τους κανόνες του συστήματος (2.1.α, 2.1.β, 2.1.γ) με σωματίδια που ανήκουν στους

κοντινούς του γείτονες ή πάλι με τους ίδιους τρόπους με σωματίδια που βρίσκονται οπουδήποτε μέσα στο πλέγμα. Συγκεκριμένα η ακτίνα αλληλεπίδρασης μπορεί να ορισθεί ως παράμετρος του συστήματος έχοντας μέγιστη τιμή τη διάσταση του πλέγματος L . Στο Σχήμα 3.3 αποδίδουμε αυτόν τον μηχανισμό αλληλεπίδρασης. Υποθέτοντας ότι επιλέγεται τυχαία ένα σωματίδιο X (αριστερό σχήμα-αρχική κατάσταση), σκανάρεται το πλέγμα, επιλέγοντας τυχαία τρία επιπλέον σωματίδια σε οποιαδήποτε απόσταση. Εάν από τα τρία αυτά σωματίδια το ένα είναι X και τα άλλα δύο είναι Y τότε λαμβάνει χώρα η αντίδραση 2.1.α με πιθανότητα $p_{1,long}$ και το αποτέλεσμα φαίνεται στο δεξιό σχήμα (τελική κατάσταση). Το ένα εκ των αρχικών X έχει μετατραπεί σε Y και το άλλο σε S . Με τον ίδιο τρόπο πραγματοποιούνται και τα βήματα 2.1.β, 2.1.γ για αντιδράσεις μεγάλης απόστασης.



Σχήμα 3.3: Παράδειγμα τρόπου πραγματοποίησης των αντιδράσεων μεγάλης απόστασης στο πλέγμα. Συγκεκριμένα αναπαριστά πώς γίνεται η αντίδραση 2.1.α. Το πλέγμα κάθε στιγμή είναι γεμάτο με X , Y και S , αλλά εδώ επικεντρωνόμαστε στο τί συμβαίνει σε ένα τυχαίο σωματίδιο X . Στα αριστερά φαίνεται η αρχική κατάσταση και στα δεξιά η τελική κατάσταση.

Η αντίδραση μεγάλης απόστασης ή αλλιώς στοχαστική επανασύνδεση έχει εφαρμογές στην πραγματικότητα. Μία τέτοιου είδους διαδικασία έχει νόημα σε δίκτυα όπου διάφορα είδη αλληλεπιδρούν με μακρινούς τους γείτονες. Ως παράδειγμα μπορούμε να θεωρήσουμε τη δυναμική απόψεων (opinion dynamics), και συγκεκριμένα την κατάσταση στην οποία ανταλλαγή απόψεων επιτυγχάνεται μέσω του ίντερνετ ή του τηλεφωνικού δικτύου. Τα άτομα δε μεταβάλλουν τη θέση τους, όμως οι απόψεις υφίστανται μεταβολή καθώς μέσω της συζήτησης επέρχεται ανταλλαγή των απόψεων. Το κάθε άτομο είναι εκτεθειμένο τόσο σε αλληλεπιδράσεις με κοντινά του άτομα (σπίτι, δουλειά), οι οποίες συμβαίνουν με ρυθμούς p_i , όσο και σε αλληλεπιδράσεις με απομακρυσμένα, χωρικά, άτομα, οι οποίες πραγματοποιούνται με ρυθμούς $p_{i,long}$, που εν γένει είναι διαφορετικοί από τους p_i . Ο μηχανισμός της αντίδρασης σε μεγάλη απόσταση εισάγει στο σύστημα ανάμειξη και το ωθεί προς τη συμπεριφορά του Μέσου Πεδίου. Υπάρχει η

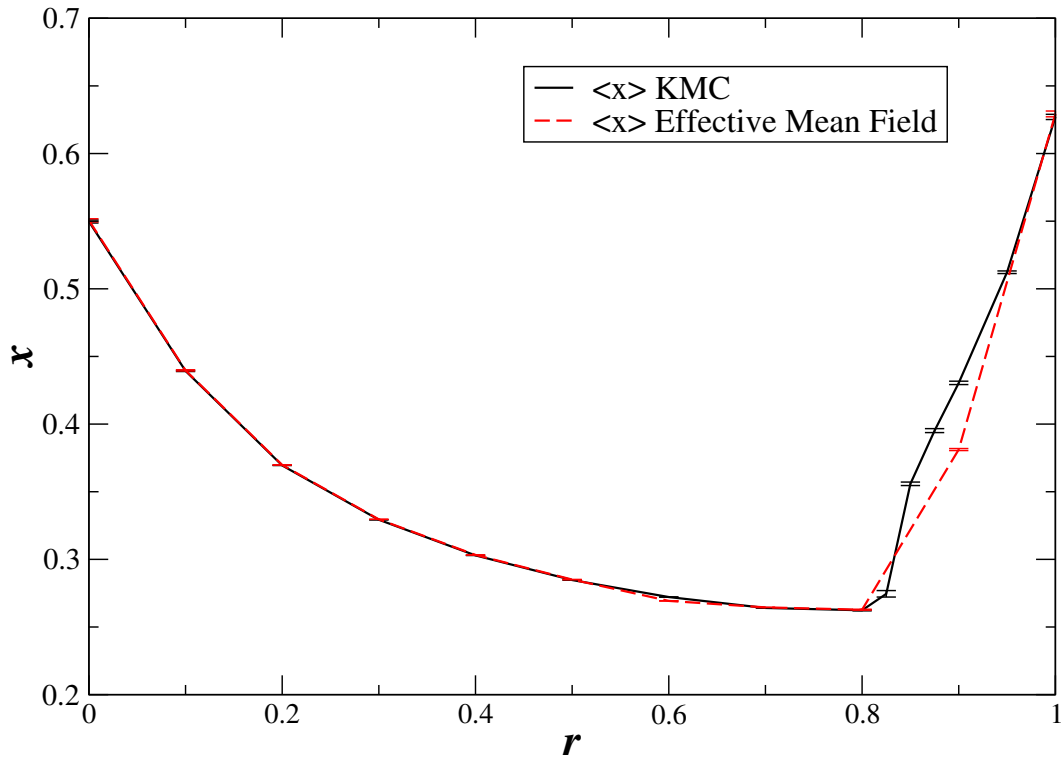
δυνατότητα να εισάγει κανείς χρονικές καθυστερήσεις στις αντιδράσεις σε μεγάλη απόσταση, όμως εδώ θεωρούμε ότι οι τοπικές αντιδράσεις και οι αντιδράσεις μεγάλης απόστασης συμβαίνουν παράλληλα.

Για να πραγματοποιήσουμε τη διαδικασία της αντίδρασης μεγάλης απόστασης ή αναδιασύνδεσης, εισάγεται ο ρυθμός αναδιασύνδεσης r ο οποίος συμβολίζει το σχετικό ρυθμό με τον οποίο λαμβάνουν χώρα οι αντιδράσεις σε μεγάλη απόσταση έναντι των αντιδράσεων που λαμβάνουν χώρα σε τοπική κλίμακα. Για τις τοπικές (μικρής απόστασης) αντιδράσεις οι ρυθμοί αντίδρασης συμβολίζονται με p_i , $i = 1, 2, 3$, όπως και προηγουμένως. Στην περίπτωση των αντιδράσεων μεγάλης απόστασης, οι ρυθμοί αντίδρασης συμβολίζονται με $p_{i,long}$, $i = 1, 2, 3$.

Έχοντας επιλέξει τις τιμές των r , p_i και $p_{i,long}$, $i = 1, 2, 3$, οι διαφοροποιήσεις στον αλγόριθμο KMC είναι πολύ απλές. Με πιθανότητα r ισχύει ο ίδιος αλγόριθμος, αλλά αυτή τη φορά οι γείτονες επιλέγονται τυχαία ανάμεσα σε όλα τα σωματίδια του συστήματος και οι αντιδράσεις συμβαίνουν με ρυθμό $p_{i,long}$. Με πιθανότητα $1 - r$ οι γείτονες επιλέγονται τοπικά και οι αντιδράσεις συμβαίνουν με ρυθμό p_i . Σε ένα βασικό βήμα χρόνου (ETS) θα πραγματοποιηθεί είτε μία τοπική αντίδραση είτε μία αντίδραση μεγάλης κλίμακας. Έτσι, ο λόγος του αριθμού των βημάτων ETS, στα οποία συμβαίνουν μόνο τοπικές αντιδράσεις, προς τον αριθμό των βημάτων ETS, στα οποία συμβαίνουν οι αντιδράσεις μεγάλης απόστασης, είναι $r/(1 - r)$.

Για να βρούμε πώς η διαδικασία αναδιασύνδεσης διαμορφώνει την τοπική διαδικασία αντίδρασης, χωρίς να εισάγουμε πολλές νέες μεταβλητές, διατηρούμε τους ίδιους ρυθμούς αντίδρασης. Ισχύει δηλαδή ότι $(p_1, p_2, p_3) = (p_{1,long}, p_{2,long}, p_{3,long}) = (0.95, 0.016, 0.026)$.

Έτσι παίζει ρόλο μόνο η μη τοπικότητα της αλληλεπίδρασης και όχι οι διαφορετικοί ρυθμοί αντίδρασης. Σε αυτήν την περίπτωση, ενώ οι τοπικές αντιδράσεις οδηγούν την ευσταθή κατάσταση μακριά από τη λύση του Μέσου Πεδίου, η μέθοδος επανασύνδεσης εισάγει μία μη τετριμμένη διασπορά στη μέση τιμή ως συνάρτηση του ρυθμού r . Στο Σχήμα 3.4 η μέση μερική συγκέντρωση x αρχικά μειώνεται καθώς ο ρυθμός της επανασύνδεσης αυξάνεται έως μία κρίσιμη τιμή $r_c \approx 0.8$. Μετά από αυτή την τιμή η μέση μερική συγκέντρωση x αυξάνεται απότομα. Η ερμηνεία είναι ότι για μικρές τιμές του ρυθμού επανασύνδεσης r , κυριαρχούν οι τοπικές αλληλεπιδράσεις, ενώ για μεγάλες τιμές του r επικρατούν οι αλληλεπιδράσεις μεγάλης κλίμακας. Η κρίσιμη τιμή του r , στην οποία πραγματοποιείται η μεταβολή αυτή και ξεκινά η επικράτηση των αλληλεπιδράσεων μεγάλης απόστασης, συμβολίζεται με r_c . Όμοια είναι και η συμπεριφορά των δύο άλλων μεταβλητών y και s .



Σχήμα 3.4: Μερική συγκέντρωση του X ως συνάρτηση του ρυθμού επανασύνδεσης r . Η μαύρη συνεχής γραμμή δείχνει τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων KMC, ενώ η κόκκινη διακεκομμένη γραμμή δείχνει την ενεργό συγκέντρωση του Μέσου Πεδίου x . Οι τιμές των παραμέτρων είναι: $(p_1, p_2, p_3) = (0.95, 0.016, 0.026)$ και το μέγεθος του συστήματος είναι $L = 2^9$. Οι μέσοι όροι υπολογίζονται από δέκα προσομοιώσεις, και τα σφάλματα φαίνονται επίσης στο σχήμα.

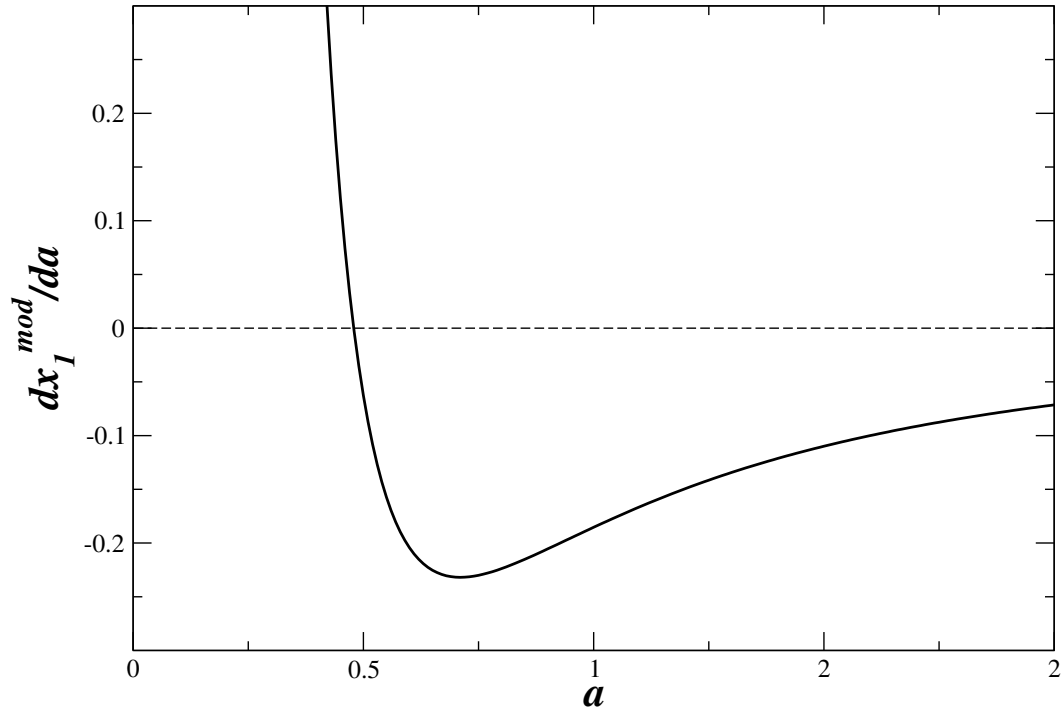
Στο ίδιο σχήμα, δίνεται και η μέση συγκέντρωση x , υπολογισμένη μέσω της Εξ. 2.6 χρησιμοποιώντας τις παραμέτρους $p_{i,eff}$. Με τη χρήση των "ενεργών" παραμέτρων, οι μέσες πληθυσμιακές συγκεντρώσεις προβλέπονται πολύ καλά από τις εξισώσεις του Μέσου Πεδίου. Το γεγονός αυτό δεν προκαλεί έκπληξη, γνωρίζοντας ήδη τα αποτελέσματα της προηγούμενης ενότητας, στην οποία η "ενεργός" θεωρία Μέσου Πεδίου προέβλεψε σωστά τις συγκεντρώσεις στην ευσταθή κατάσταση, στην περίπτωση των τοπικών αλληλεπιδράσεων. Στη συγκεκριμένη περίπτωση, η εισαγωγή της αναδιασύνδεσης μεγάλης κλίμακας στις KMC προσομοιώσεις οδηγεί το σύστημα προς το Μέσο Πεδίο και έτσι η "ενεργός" προσέγγιση Μέσου Πεδίου σε μεγάλη απόσταση, πλεονεκτεί στην περιγραφή του συστήματος σε σχέση με την προηγούμενη περίπτωση των τοπικών KMC αλληλεπιδράσεων.

Επιπρόσθετα, μπορούμε να προσδιορίσουμε το ελάχιστο της καμπύλης 3.4, εάν θεωρήσουμε ότι η συλλογική επίδραση, της στοχαστικότητας της KMC μεθόδου καθώς

και των αντιδράσεων μεγάλης απόστασης, αποτελεί έναν πολλαπλασιαστικό παράγοντα a , ο οποίος μεταβάλλει τους ρυθμούς p_1 , p_1 και p_3 να είναι αντίστοιχα $a^4 p_1$, $a^2 p_2$ και $a^2 p_3$, καθώς ο ρυθμός p_1 προσδιορίζει μία εξίσωση τέταρτου βαθμού, την 2.2.α, ενώ οι ρυθμοί p_2 και p_3 αντιστοιχούν σε εξισώσεις (δυναμικές) δευτέρου βαθμού, τις 2.2.β, 2.2.γ. Τότε η κρίσιμη τιμή a_c υπολογίζεται ως το ελάχιστο-ως προς a -της Εξ. 2.6. Συνεπώς υπολογίζουμε το ελάχιστο ως προς a της εξίσωσης

$$Q_4^{mod} = \left(\sqrt[3]{\frac{a^4 p_3^2}{a^6 p_1 p_2} [1 + K^{mod}]} + \sqrt[3]{\frac{a^4 p_3^2}{a^6 p_1 p_2} [1 - K^{mod}]}, \right. \\ \left. \sqrt[3]{\frac{a^4 p_2^2}{8a^6 p_1 p_3} [1 + K^{mod}]} + \sqrt[3]{\frac{a^4 p_2^2}{8a^6 p_1 p_3} [1 - K^{mod}]} \right), \quad (3.2)$$

όπου $K^{mod} = \sqrt{1 + (2p_3 + p_2)^3 / (27a^2 p_1 p_2 p_3)}$. Για τις παραμέτρους που χρησιμοποιούμε μέχρι στιγμής στην εργασία το ελάχιστο ως προς a της καμπύλης x^{mod} υπολογίζεται όταν μηδενίζεται η παράγωγος της συνιστώσας x^{mod} της Εξ. 3.2. Στο Σχήμα 3.5 δίνεται η παράγωγος της 3.2 ως προς a . Τέμνει τον άξονα $y = 0$ σε μία και μοναδική τιμή, την $a_c \sim 0.48$, η οποία αντιστοιχεί στο μοναδικό ελάχιστο $r_c = 0.8$ στο Σχήμα 3.4.



Σχήμα 3.5: Η παράγωγος dx^{mod}/da ως συνάρτηση του a .

3.4 Διάχυση Μεγάλης Απόστασης

Η στοχαστική, μεγάλης απόστασης κίνηση ή αλλιώς διάχυση μεγάλης απόστασης, μπορεί να παρατηρηθεί σε δίκτυα με κινούμενα είδη [32]. Αυτό το φαινόμενο είναι πολύ σημαντικό στην ετερογενή κατάλυση, στην επιδημιολογία, στην οικολογία [167, 168]. Παράδειγμα αποτελεί η μετανάστευση μεγάλης απόστασης στην οικολογία, ιδιαίτερα όσον αφορά τα πουλιά. Σε τέτοια συστήματα τα είδη μεταναστεύουν σε μεταβλητές αποστάσεις και στη συνέχεια αλληλεπιδρούν σε τοπικό επίπεδο όταν προσγειώνονται. Ένα άλλο σύστημα στο οποίο είναι δυνατόν να υπάρχει ο μηχανισμός διάχυσης μεγάλης απόστασης αλλά και ο μηχανισμός αντίδρασης μεγάλης απόστασης είναι αυτό της δυναμικής απόψεων (opinion dynamics). Τα άτομα μπορούν να αλληλεπιδρούν σε μεγάλη απόσταση (μέσω του τηλεφώνου ή του ίντερνετ) αλλά μπορούν και να μετατοπίζονται και να αλληλεπιδρούν τοπικά. Ένα άλλο τέτοιο σύστημα είναι το δίκτυο πωλήσεων, στο οποίο η πώληση μπορεί να γίνει είτε από το ίντερνετ (αντίδραση μεγάλης απόστασης) είτε μέσω των πωλητών (διάχυση-κίνηση μεγάλης απόστασης).

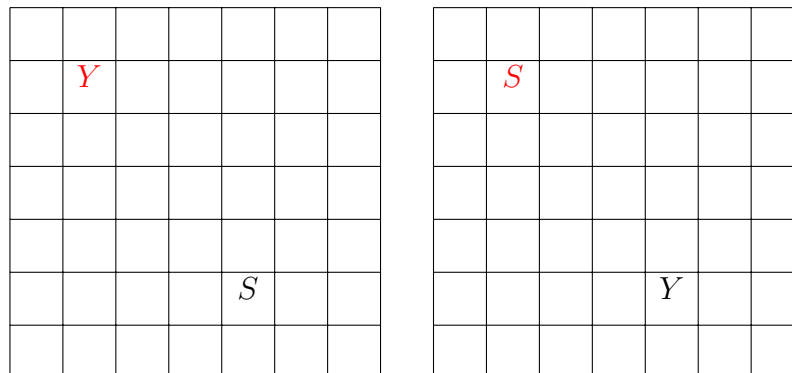
Όταν μιλάμε για διάχυση μίας ουσίας μέσα σε ένα σύστημα, συνήθως θεωρούμε τη συνεχή ροή αυτής της ουσίας στο χώρο. Αυτό το φαινόμενο εκφράζεται στα μαθηματικά με τη χρήση παραγώγων και συγκεκριμένα με το ανάδελτα της μεταβλητής που διαχέεται. Συγκεκριμένα, έστω ότι διαχέεται σε ένα σύστημα η μεταβλητή x . Τότε ο μαθηματικός όρος που εκφράζει τη διάχυση του x είναι $C_x \nabla^2 x$, όπου C_x είναι ο συντελεστής διάχυσης του x . Αντίστοιχα, αν διαχέεται η μεταβλητή y , ο μαθηματικός όρος που εκφράζει τη διάχυση του y είναι $C_y \nabla^2 y$, όπου C_y είναι ο συντελεστής διάχυσης για το y . Όταν αυτοί οι όροι που αντιστοιχούν στη διάχυση εισαχθούν σε μία εξίσωση που εκφράζει τη συμπεριφορά των x, y πριν ξεκινήσει η διάχυση, τότε η εξίσωση θα μεταβληθεί και προφανώς θα αλλάξει η δυναμική του συστήματος.

Στην περίπτωση του μοντέλου LLC, καθώς η διάχυση αποτελεί ένα μηχανισμό ανάμειξης του συστήματος, θα μπορούσε κανείς να θεωρήσει ότι οδηγεί το σύστημα προς την κατάσταση ισορροπίας του Μέσου Πεδίου. Αυτό το επιχείρημα θα μπορούσε να αληθεύει εάν δεν λαμβανόταν υπ'όψη η αλλαγή στη δυναμική, που οφείλεται στην εισαγωγή όρων διάχυσης ($C_x \nabla^2 x$ and $C_y \nabla^2 y$) στις εξισώσεις 2.5.α, 2.5.β για τα είδη, αντίστοιχα, όπου C_x, C_y θα ήταν οι συντελεστές διάχυσης για τα δύο είδη. Στην [32] αναδεικνύεται ότι η εισαγωγή του μηχανισμού διάχυσης σε συντηρητική δυναμική, τύπου κέντρου που προσομοιώνεται σε υποστρώματα μικρής διάστασης, οδηγεί σε καταναλωτικό καθεστώς, με χαρακτηριστικά στοχαστικού οριακού κύκλου. Αυτό το απρόσμενο αποτέλεσμα σημαίνει ότι δε μπορούμε απλώς να περιμένουμε ότι η συμπεριφορά

του μέσου πεδίου ανακτάται μέσω της διάχυσης.

Υπό αυτή την οπτική γωνία, έχουμε ως στόχο να συγκρίνουμε τον τρόπο με τον οποίο οι μηχανισμοί της αντίδρασης σε μεγάλη απόσταση και της διάχυσης σε μεγάλη απόσταση επηρεάζουν το αποτέλεσμα της δυναμικής. Και οι δύο μηχανισμοί προκαλούν μία ανάμειξη στο σύστημα και θα μπορούσε κανείς να υποθέσει ότι οδηγούν σε παρόμοια αποτελέσματα, ώστε το σύστημα να πλησιάζει στο Μέσο Πεδίο. Αυτή η υπόθεση δεν είναι αληθής. Όπως θα δείξουμε παρακάτω οι δύο διαδικασίες, σε συνδυασμό με την αντίδραση σε μικρή κλίμακα, δίνουν πολύ διαφορετική δυναμική στο σύστημα.

Για να είναι ακριβής η σύγκριση, θεωρούμε την περίπτωση τοπικών αντιδράσεων μαζί με το μηχανισμό της διάχυσης σε μεγάλη απόσταση. Η τοπική αντίδραση πραγματοποιείται σύμφωνα με τον αλγόριθμο KMC που έχει περιγραφεί νωρίτερα στην ενότητα 2.4, ενώ όλες οι παράμετροι για την περίπτωση αυτή της τοπικής αλληλεπίδρασης είναι ίδιες όπως στις προηγούμενες ενότητες 2.4 και 3.2. Οι τοπικές αντιδράσεις συμβαίνουν με ρυθμούς p_i , ενώ οι ρυθμοί της διάχυσης μεγάλης απόστασης συμβολίζονται με $p_{i,diff}$. Εν γένει οι ρυθμοί $p_{i,diff}$ μπορεί να είναι διαφορετικοί για τα διάφορα σωματίδια. Προκειμένου να μειώσουμε τον αριθμό των παραμέτρων θεωρούμε ότι όλα τα σωματίδια διαχέονται με τον ίδιο ρυθμό p_d . Στο Σχήμα 3.6 βλέπουμε πώς πραγματοποιείται η διάχυση στο πλέγμα. Δύο σωματίδια (έστω Y και S) επιλέγονται τυχαία (αριστερά) και ανταλλάσσουν τις θέσεις τους (δεξιά), δηλαδή διαχέονται σε μεγάλη απόσταση μέσα στο πλέγμα.

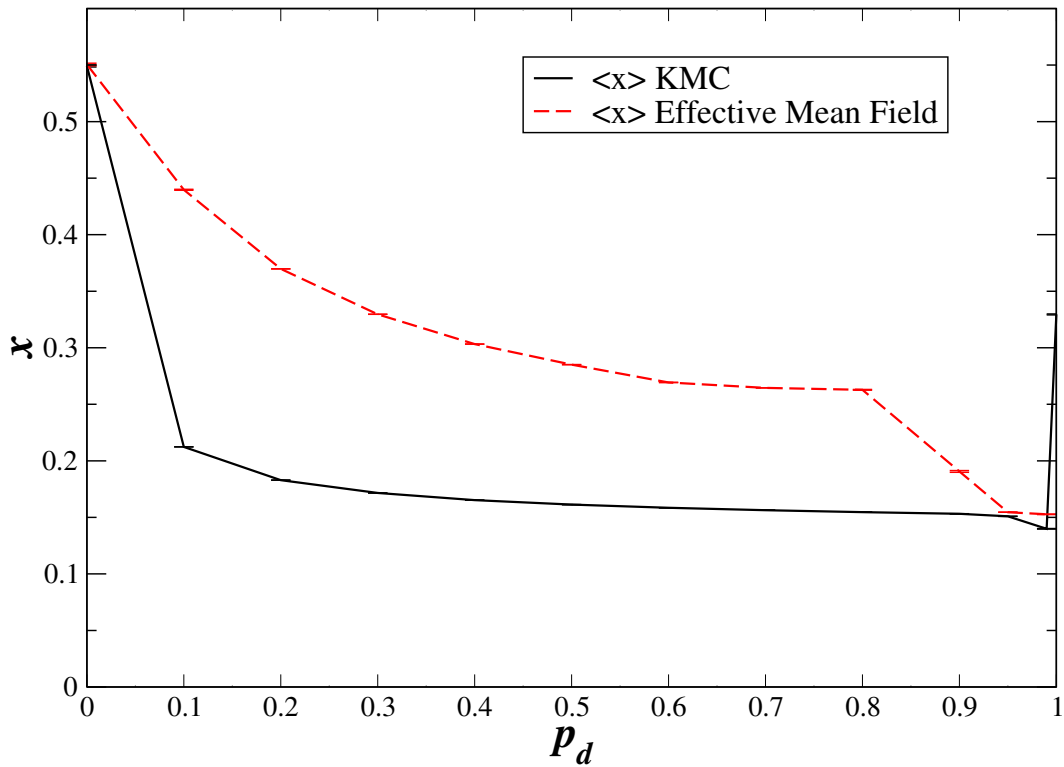


Σχήμα 3.6: Παράδειγμα τρόπου πραγματοποίησης της διάχυσης μεγάλης απόστασης στο πλέγμα σύμφωνα με τον αλγόριθμο KMC. Ολόκληρο το πλέγμα είναι γεμάτο από σωματίδια X , Y και S , αλλά εδώ επικεντρωνόμαστε σε δύο σωματίδια που έχουν επιλεγεί τυχαία. Η αρχική κατάσταση φαίνεται στα αριστερά και η τελική κατάσταση φαίνεται στα δεξιά. Τα δύο σωματίδια ανταλλάσσουν τις θέσεις τους σε μεγάλη απόσταση μέσα στο πλέγμα.

Έχοντας επιλέξει τις τιμές των p_d και p_i , $i = 1, 2, 3$ οι μεταβολές στον KMC αλγόριθμο της ενότητας 2.4 είναι και πάλι πολύ απλές. Μόλις ένα κελίο επιλεγεί, τότε με πιθανότητα $1 - p_d$ το σωματίδιο που υπάρχει εκεί αντιδρά σύμφωνα με τον κλασικό KMC αλγόριθμο όπως περιγράφεται στην ενότητα 2.4. Αλλιώς με πιθανότητα p_d το σωματίδιο ανταλλάσσει θέση με κάποιο άλλο, τυχαία επιλεγόμενο, σωματίδιο στο πλέγμα. Σε ένα βασικό βήμα ETS πραγματοποιείται είτε μία τοπική αντίδραση είτε μία διάχυση μεγάλης απόστασης. Έτσι ο λόγος του αριθμού των ETS στα οποία συμβαίνουν τοπικές αλληλεπιδράσεις, προς τον αριθμό των ETS στα οποία συμβαίνει διάχυση μεγάλης κλίμακας, είναι $p_d/(1 - p_d)$, παρόμοια με τον αντίστοιχο λόγο στην περίπτωση της αντίδρασης σε μεγάλη απόσταση, που αναλύθηκε στην προηγούμενη ενότητα 3.3. Περαιτέρω, για να είναι δυνατή η σύγκριση, διατηρούμε τους ίδιους ρυθμούς των τοπικών αντιδράσεων, δηλαδή $p_1 = 0.95$, $p_2 = 0.016$ και $p_3 = 0.026$. Ο ρυθμός p_d μεταβάλλεται. Το εύρος της διάχυσης l_d για τις προσομοιώσεις έχει επιλεγεί εδώ να είναι $l_d = L/2$, αλλά παρόμοια, ποιοτικά, αποτελέσματα υπολογίζονται για όλες τις τιμές του l_d που είναι μεγαλύτερες από το μέγεθος των τοπικών ταλαντωτών R [33], το οποίο για τις συγκεκριμένες τιμές των παραμέτρων είναι της τάξης του $R \sim 10$.

Όπως φαίνεται στο Σχήμα 3.7, τα αποτελέσματα των KMC προσομοιώσεων (μαύρη συνεχής γραμμή), δείχνουν ότι υπάρχει μία ελάττωση στο ρυθμό παραγωγής x σωματιδίων, η οποία συμβαίνει και για μικρές τιμές της πιθανότητας διάχυσης. Αντίθετα, στην περίπτωση της αντίδρασης μεγάλης απόστασης, η ελάττωση είναι πιο σταδιακή (βλ. Σχήμα 3.4). Όταν $p_d = 1$ τότε η μόνη αλληλεπίδραση που συμβαίνει στο σύστημα είναι η διάχυση. Οι "ενεργοί" ρυθμοί αντίδρασης είναι $p_{i,eff} = 0$ και οι μερικές συγκεντρώσεις παραμένουν αμετάβλητες. Αυτό σημαίνει ότι για $p_d = 1$ ισχύει $x = x(t = 0)$, $y = y(t = 0)$, $s = s(t = 0)$. Επίσης για $p_d = 1$ και για ισοπίθανες αρχικές συνθήκες, που συχνά χρησιμοποιούνται στις προσομοιώσεις KMC, η τελική κατάσταση είναι $x = y = s = 1/3$. Μπορούμε επίσης να σημειώσουμε ότι για $p_d = 1$, αφού $p_{i,eff} = 0$, οι τιμές των "ενεργών" μερικών συγκεντρώσεων δε γίνεται να ορισθούν, αφού τότε δεν πραγματοποιείται στο πλέγμα καμία αντίδραση, ούτε τοπικά ούτε σε μεγάλη απόσταση, και τα σωματίδια μπορούν μόνο να διαχέονται μέσα στο πλέγμα.

Στο ίδιο σχήμα 3.7, η κόκκινη διακεκομμένη γραμμή αναπαριστά την πρόβλεψη της "ενεργού" προσέγγισης Μέσου Πεδίου. Στην περίπτωση αυτή η "ενεργός" θεωρία Μέσου Πεδίου αποτυγχάνει να προβλέψει τους τελικούς ρυθμούς. Αυτό συμβαίνει σε αντίθεση με την περίπτωση της αντίδρασης σε μεγάλη απόσταση. Ο λόγος είναι ότι η εισαχθείσα διάχυση είμαι μία καινούργια διαδικασία, η οποία δε λαμβάνεται υπ'όψη ούτε από το κλασικό μοντέλο Μέσου Πεδίου ούτε από το "ενεργό" μοντέλο Μέσου Πεδίου.



Σχήμα 3.7: Μέση μερική συγκέντρωση x ως συνάρτηση της σύζευξης διάχυσης μεγάλης απόστασης (diffusive coupling) p_d . Η μαύρη συνεχής γραμμή παριστάνει τα αποτελέσματα των KMC προσομοιώσεων και η κόκκινη διακεκομμένη γραμμή παριστάνει την "ενεργό" τιμή Μέσου Πεδίου της x . Οι τιμές των παραμέτρων είναι $(p_1, p_2, p_3) = (0.95, 0.016, 0.026)$ και το μέγεθος του συστήματος είναι $L = 2^9$. Οι μέσοι όροι υπολογίζονται από 10 τρεξίματα. Είναι εμφανή και τα αντίστοιχα σφάλματα.

Οι εξισώσεις του Μέσου Πεδίου δεν περιέχουν κάποιον όρο ο οποίος να αντιστοιχεί στη διάχυση ούτε με τη μορφή της συνεχούς διάχυσης (για παράδειγμα $C\nabla^2 x$) ούτε με τη μορφή της διάχυσης σε μεγάλες αποστάσεις, όπως μελετάται εδώ. Παρά το γεγονός ότι και η αντίδραση μεγάλης απόστασης και η διάχυση μεγάλης απόστασης εισάγουν στο σύστημα μηχανισμούς ανάμειξης, οι λεπτομέρειες κάθε διαδικασίας οδηγούν σε διαφορετικές συγκεντρώσεις στην κατάσταση ισορροπίας του συστήματος.

3.5 Συμπεράσματα

Η "ενεργός" προσέγγιση του Μέσου Πεδίου είναι μία μέθοδος με την οποία επιχειρούμε να προσεγγίσουμε την πρόβλεψη της τιμής των συγκεντρώσεων μέσω των τύπων

του Μέσου Πεδίου, χρησιμοποιώντας "ενεργούς" ρυθμούς των αντιδράσεων, όπως αυτοί μεταβάλλονται κατά τη διάρκεια της KMC προσομοίωσης.

Στην περίπτωση που επιτρέπουμε στα σωματίδια να αλληλεπιδρούν μόνο τοπικά ενώ τα αποτελέσματα της απλής KMC προσομοίωσης δε συμφωνούν καθόλου με την πρόβλεψη του Μέσου Πεδίου, όταν εφαρμόζουμε την "ενεργό" προσέγγιση, τότε επιτυγχάνουμε απόλυτη συμφωνία με τις τιμές που δίνουν οι εξισώσεις του Μέσου Πεδίου.

Στην περίπτωση που επιτρέπουμε στα σωματίδια να αλληλεπιδρούν σε μεγάλες αποστάσεις μέσα στο πλέγμα οδηγούμε το σύστημα να συμπεριφερθεί όπως ορίζει το Μέσο Πεδίο. Εφαρμόζοντας την "ενεργό" προσέγγιση, επιτυγχάνουμε και πάλι πολύ καλή συμφωνία μεταξύ των αποτελεσμάτων των προσομοιώσεων και της πρόβλεψης του Μέσου Πεδίου.

Αντίθετα, στην περίπτωση που επιτρέπουμε στα σωματίδια είτε να αλληλεπιδρούν τοπικά είτε να διαχέονται σε μεγάλες αποστάσεις στο πλέγμα, τότε δεν υπάρχει συμφωνία μεταξύ των αποτελεσμάτων των απλών KMC προσομοιώσεων και των αποτελεσμάτων της "ενεργού" μεθόδου. Αυτό δικαιολογείται γιατί στις εξισώσεις του Μέσου Πεδίου δεν υπάρχει τύπος που να εκφράζει τον τύπο της διάχυσης μεγάλης απόστασης που πραγματευόμαστε εδώ.

Κεφάλαιο 4

Το LLC ως Αφηρημένο Δίκτυο Κόμβων

4.1 Δομή του Κεφαλαίου

Στο κεφάλαιο αυτό μελετάμε το μοντέλο Πλεγματικού Οριακού Κύκλου (LLC) ως ένα αφηρημένο δίκτυο κόμβων, το οποίο κατασκευάζουμε ξεκινώντας από τον χώρο φάσεων του LLC. Στη συνέχεια με τη βοήθεια του πίνακα μεταβάσεων του αφηρημένου δικτύου, υπολογίζουμε τα εξής βασικά χαρακτηριστικά του δικτύου: α) την κατανομή του μεγέθους των στοιχείων του πίνακα μεταβάσεων, β) την κατανομή του βαθμού του δικτύου και γ) τον ολικό συντελεστή συσσώματωσης του δικτύου. Με βάση τα αποτελέσματα αυτά βλέπουμε ότι το αφηρημένο δίκτυο κόμβων κατατάσσεται στην κατηγορία των δικτύων ελεύθερης κλίμακας και συζητάμε την κατάταξη αυτή σε σχέση με τα μορφολογικά χαρακτηριστικά του συστήματος.

4.2 Εισαγωγικά Στοιχεία

Στην περίπτωση που μελετάμε εδώ ο χώρος των καταστάσεων (χώρος φάσεων) είναι συνεχής. Στη δυναμική αντιδράσεων όπου εμπλέκεται ένας αριθμός n ειδών, με συγκεντρώσεις των ειδών x_i , $i = 1, \dots, n$, ο χώρος φάσεων είναι n διαστάσεων. Μερικές φορές όταν υπάρχουν εξωτερικές συνθήκες, ο χώρος των φάσεων μπορεί να μειωθεί,

όπως στην περίπτωση του LLC (Εξ. 2.2 και 2.5). Κανονικά, οι μεταβλητές συγκεντρώσεως κανονικοποιούνται (μερικές συγκεντρώσεις), και έτσι οι x_i είναι συνεχείς μεταβλητές οι οποίες μπορούν να πάρουν τιμές στο εύρος $0 \leq x_i \leq 1$. Αφού η θεωρία δικτύων στηρίζεται σε πεπερασμένο αριθμό κόμβων, ο n -διαστάσεων χώρος φάσεων πρέπει να διαμεριστεί κατάλληλα, όπως θα συζητηθεί παρακάτω.

Ο χώρος φάσεων του μοντέλου LLC, που αναλύουμε εδώ, είναι αρχικά τριών διαστάσεων, αλλά μειώνεται σε δύο διαστάσεων εξαιτίας της συνθήκης συμβατότητας με το πλέγμα, όπως έχουμε δει και σε προηγούμενα κεφάλαια. Ο διδιάστατος λοιπόν αυτός φασικός χώρος (x, y) θα διακριτοποιηθεί εδώ για να δημιουργηθούν οι κόμβοι του αφηρημένου δικτύου.

Όπως έχει ήδη επισημανθεί στο δεύτερο κεφάλαιο, η χρήση της KMC μεθόδου για την προσομοίωση του μοντέλου οδηγεί στην ανάπτυξη χωρικών σχηματισμών οι οποίοι σχηματίζονται αυθόρμητα εξαιτίας του συνδυασμού της μη γραμμικότητας των αλληλεπιδράσεων με τους χωρικούς περιορισμούς. Ο λόγος που το LLC χρησιμοποιείται ως παράδειγμα για την κατασκευή του αφηρημένου δικτύου του χώρου φάσεων είναι οι πολύπλοκοι μορφοκλασματικοί σχηματισμοί που δημιουργούνται στη διάρκεια της εξέλιξης του συστήματος και οι οποίοι θα μπορούσαν να οδηγήσουν σε μη τετριμμένους ρυθμούς μετάβασης μεταξύ των κόμβων του αντίστοιχου αφηρημένου δικτύου. Όπως θα γίνει φανερό στη συνέχεια, τα στοιχεία του πίνακα μετάβασης παρουσιάζουν μία κατανομή μεγάλου εύρους και το αφηρημένο δίκτυο ανήκει στην τάξη των δικτύων ελεύθερης κλίμακας (scale free networks) [105, 110, 169].

4.3 Αναπαράσταση των διαδικασιών αντίδρασης από ένα αφηρημένο δίκτυο

Θεωρούμε, λοιπόν, ένα αφηρημένο δίκτυο κόμβων, όπου κάθε κόμβος είναι ένα κατάλληλα επιλεγμένο τμήμα του χώρου φάσεων του συστήματος LLC. Οπότε η δυναμική του συστήματος καθρεφτίζεται στις μεταβάσεις του δικτύου από ένα μέρος του χώρου φάσεων σε άλλο. Η διαδικασία αυτή ισχύει και για οποιοδήποτε σύστημα αντίδρασης-διάχυσης. Για μεγαλύτερη ακρίβεια, μπορεί κανείς να θεωρήσει έναν αριθμό n αντιδρώντων X_i , $i = 1, \dots, n$, που συμμετέχουν σε έναν αριθμό αντιδράσεων. Το σχήμα των αντιδράσεων μπορεί να περιλαμβάνει οποιοδήποτε αριθμό βημάτων. Ακόμα και μία αντίδραση είναι αρκετή για τον ορισμό του αφηρημένου δικτύου. Κατά τη διάρκεια της

διαδικασίας αντίδρασης, τα διάφορα είδη X_i απεικονίζονται από τις αντίστοιχες μερικές συγκεντρώσεις. Αυτές οι μερικές συγκεντρώσεις, όπως έχουμε ήδη δει στα προηγούμενα κεφάλαια, μεταβάλλονται με τον χρόνο και συμβολίζονται με μικρά γράμματα ως $x_i(t)$, $i = 1, \dots, n$. Τότε ο χώρος φάσεων του συστήματος γίνεται ένας διανυσματικός χώρος n διαστάσεων, ο οποίος ορίζεται ως εξής:

$$\vec{X}(t) = (x_1(t), x_2(t), \dots, x_n(t)),$$

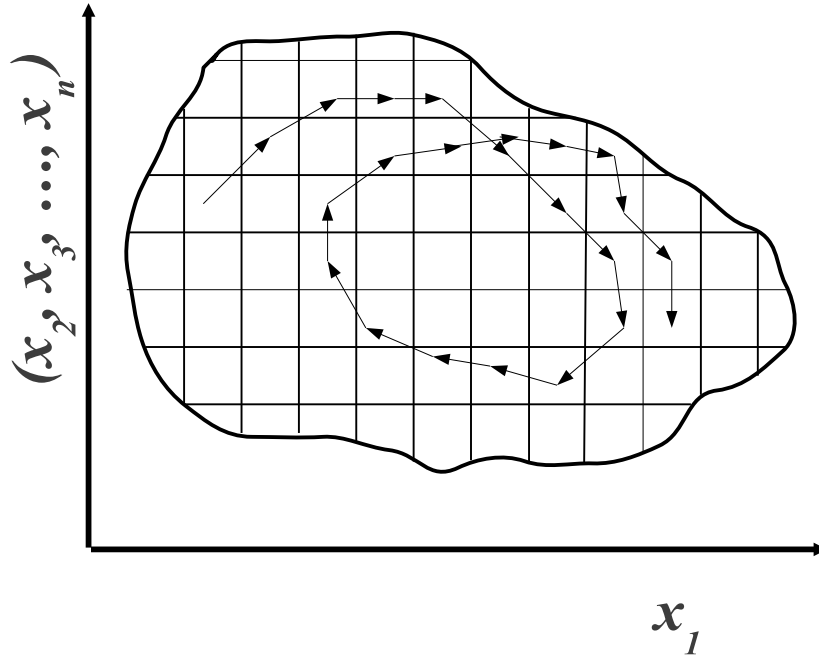
$$\mu\epsilon \quad 0 \leq x_i \leq 1 \quad (4.1)$$

Το διάνυσμα $\vec{X}(t)$ εξαρτάται από τον χρόνο t και το σύστημα κινείται από ένα σημείο του χώρου φάσεων σε άλλο. Αυτή η κίνηση του συστήματος μέσα στον χώρο φάσεων μπορεί να χρησιμοποιηθεί για τη δημιουργία του αφηρημένου δικτύου, σε αντιστοιχία με τη δυναμική του συστήματος. Συγκεκριμένα, ο χώρος φάσεων διαμερίζεται σε N τμήματα S_j , $j = 1, \dots, N$. Αυτά τα τμήματα είναι κελία στον n -διάστατο χώρο όπως απεικονίζεται στο Σχ. 4.1. Για απεικονιστικούς λόγους η διάσταση που αντιστοιχεί στη συγκέντρωση x_1 παρουσιάζεται στον άξονα x , ενώ όλες οι άλλες διαστάσεις του χώρου φάσεων ($d = 2, \dots, n$) αναπαρίστανται συσσωρευμένες στον άξονα y .

Στην παρακάτω ενότητα εφαρμόζουμε την ιδέα του αφηρημένου δικτύου στην περίπτωση της δυναμικής του Πλεγματικού Οριακού Κύκλου (ΠΟΚ) και υπολογίζουμε τα χαρακτηριστικά αυτού του δικτύου μέσω προσομοιώσεων KMC λαμβάνοντας υπόψη τους χωρικούς περιορισμούς και τις στοχαστικές επιδράσεις. Για την πραγματοποίηση του δικτύου είναι δυνατόν να χρησιμοποιήσουμε μία μονοδιάστατη ($n = 1$) αναπαράσταση του φασικού χώρου, στην οποία λαμβάνεται υπ'όψη μόνο το ένα είδος X (ή μόνο το Y) ή μία διδιάστατη ($n = 2$) αναπαράσταση, στην οποία και τα δύο είδη X και Y καταγράφονται ταυτόχρονα.

4.4 Υπολογισμός των Χαρακτηριστικών του Αφηρημένου Δικτύου

Στην ενότητα αυτή θα περιοριστούμε στην περίπτωση της αντίδρασης σε μικρή απόσταση. Το σύστημα ακολουθεί το σχήμα αντίδρασης 2.1. Οι κινητικές εξισώσεις είναι αυτές του μειωμένου συστήματος 2.5. Δηλαδή τα είδη με τα οποία θα ασχοληθούμε είναι τα X , Y .



Σχήμα 4.1: Εικονική αναπαράσταση του χώρου φάσεων διαμερισμένου σε κελία n διαστάσεων. Υπό την επίδραση της δυναμικής του συστήματος, η τροχιά του κινείται από ένα κελίο σε άλλο.

Θεωρούμε αρχικά τη μονοδιάστατη αναπαράσταση. Μελετάμε τη συμπεριφορά του είδους X . Ο χώρος φάσεων διακριτοποιείται σε N_1 τμήματα $S_i, i = 1, \dots, N_1$ μεγέθους ϵ_1 , όπου το κελίο S_i ορίζεται ως:

$$S_i = [x^{\min} + i\epsilon_1, x^{\min} + (i + 1)\epsilon_1]. \quad (4.2)$$

Αυτά τα τμήματα S_i , όπου $i = 1, 2, \dots, N_1$ αποτελούν τις N_1 διακριτές καταστάσεις του φασικού χώρου. Στην Εξ. 4.2 $x^{\min}$ είναι η ελάχιστη τιμή της μεταβλητής x , ενώ $x^{\min} + N_1\epsilon_1 = x^{\max}$ είναι η μέγιστη τιμή της. Οι ρυθμοί μετάβασης από το τμήμα (κατάσταση) S_i στο τμήμα (κατάσταση) $S_j, S_i \rightarrow S_j$, καταγράφονται στη διάρκεια των KMC προσομοιώσεων σε κάθε βήμα Monte Carlo. Με βάση αυτούς τους ρυθμούς μετάβασης δημιουργείται ο πίνακας μεταβάσεων M , μεγέθους $N_1 \times N_1$ για τη μεταβλητή x . Αυτός ο πίνακας χαρακτηρίζει το αφηρημένο δίκτυο και είναι ο πίνακας συνδεσιμότητας. Το πεδίο των τιμών του x είναι ισότιμα χωρισμένο και οι τιμές των στοιχείων του πίνακα συνδεσιμότητας είναι απόρροια της δυναμικής του συστήματος η οποία επιβάλλει

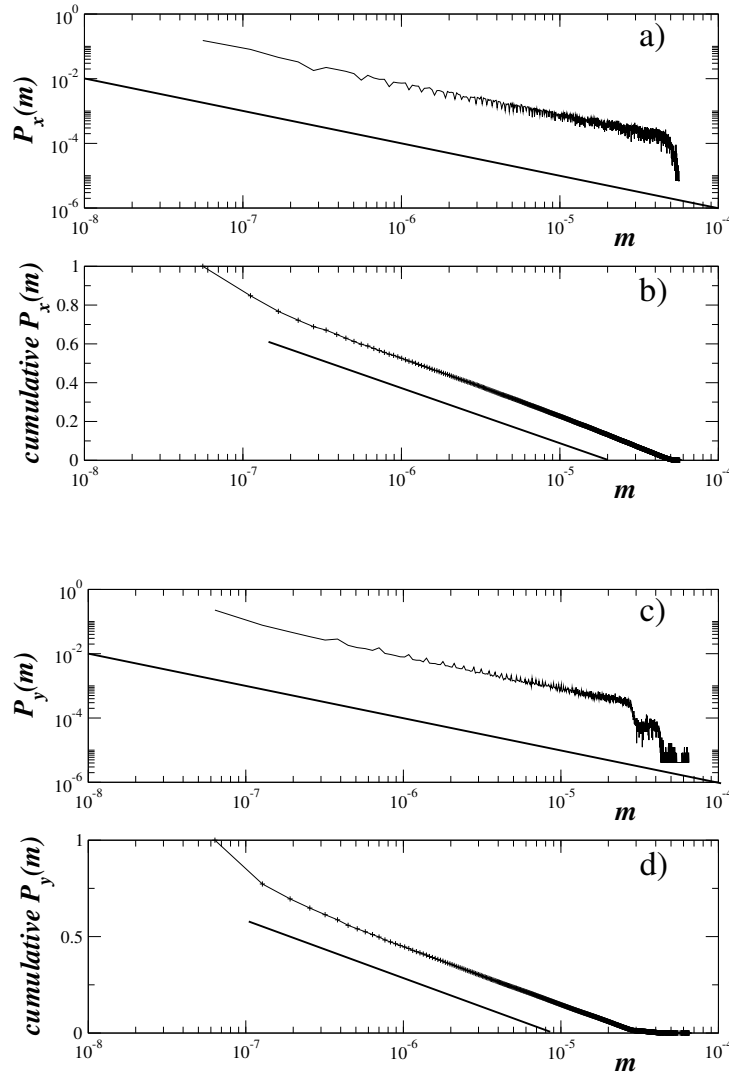
μερικά κελία του αφηρημένου δικτύου να εμφανίζουν μεγαλύτερη συχνότητα "επισκεψιμότητας" από κάποια άλλα ή ακόμα ότι κάποια κελία δε θα είναι ενεργά. Συγχρόνως κάποιοι σύνδεσμοι στο δίκτυο αποκτούν μεγαλύτερη βαρύτητα από κάποιους άλλους. Αυτό σημαίνει ότι αντίστοιχα μεταβάλλονται οι τιμές του πίνακα συνδεσιμότητας, ενώ μπορεί κάποιες από αυτές να είναι μηδενικές.

Εδώ πρέπει να τονισθεί ότι η μορφή του πίνακα συνδεσιμότητας καθορίζεται τόσο από το δυναμικό σύστημα, όσο και από την πραγματοποίηση της συνδεσιμότητας μέσω της KMC μεθόδου στο δι-διάστατο υπόβαθρο. Συγκεκριμένα, μέσω της KMC ορίζεται και ο χρόνος ολοκλήρωσης του συστήματος του οποίου η μονάδα είναι το 1 Monte Carlo step (MCS) όπως προαναφέρθηκε στην ενότητα 2.4. Στον χρόνο αυτό (1MCS) στο σύστημα μεγέθους $L \times L$, έχουν πραγματοποιηθεί L^2 προσπάθειες αντίδρασης, δηλαδή κάθε σωματίδιο έχει τη δυνατότητα να αντιδράσει μία φορά κατά μέσον όρο. Έτσι η μέση τιμή της μεταβλητής x (ή y) μπορεί να αλλάζει σε μικρό ή μεγάλο βαθμό επιτρέποντας στο σύστημα να μεταβεί και σε "κοντινούς" ή και "μακρινούς" κόμβους σε κάθε ένα MCS. Με τον όρο "κοντινούς κόμβους" αναφερόμαστε σε γειτονικά κελία, δηλαδή από $S_i \rightarrow S_{i\pm 1}$, ενώ με τον όρο "μακρινούς κόμβους" αναφερόμαστε σε μεταβάσεις από $S_i \rightarrow S_j$, με $j \neq i \pm 1$. Έτσι, στη γενική περίπτωση ο πίνακας συνδεσιμότητας ij , ο οποίος μετράει τις μεταβάσεις από τον κόμβο S_i στον κόμβο S_j σε ένα MCS, δεν περιλαμβάνει μόνο στοιχεία γύρω και πάνω στη διαγώνιο, αλλά τα περισσότερα στοιχεία του είναι μη μηδενικά για μεγάλες τιμές του χρόνου ολοκλήρωσης.

Παράλληλα η ίδια κατασκευή μπορεί να σχεδιαστεί και για τη μεταβλητή y , της οποίας ο φασικός χώρος θα χωρισθεί σε N_2 τμήματα-κόμβους, ενώ ο αντίστοιχος πίνακας συνδεσιμότητας θα έχει μέγεθος $N_2 \times N_2$. Ανάλογα με το συγκεκριμένο πρόβλημα, το N_1 μπορεί να είναι διαφορετικό από ή ίσο με το N_2 .

Η κατανομή μεγέθους των στοιχείων M_{ij} δηλαδή των πιθανοτήτων μετάβασης, αποτελεί μία πολύ σημαντική στατιστική ιδιότητα του δικτύου, χαρακτηριστική του είδους του. Στο Σχ. 4.2α σχεδιάζουμε την κατανομή μεγέθους $P_X(m)$ η οποία αντιστοιχεί στην πιθανότητα το στοιχείο M_{ij} του πίνακα να βρίσκεται στο διαστήμα $[m, m + dm]$ στη μονοδιάστατη περίπτωση. Οι τιμές των παραμέτρων έχουν επιλεγεί όπως και προηγουμένως, να είναι $p_1 = 0.9585$, $p_2 = 0.016$, $p_3 = 0.026$ και ανήκουν στην περιοχή των διαλειπτικών ταλαντώσεων στις προσομοιώσεις KMC, όπως έχουμε δει.

Σε διπλή λογαριθμική κλίμακα, η κατανομή του μεγέθους ακολουθεί μία πτώση τύπου νόμου δύναμης $P_X(m) \sim m^{-\gamma_1}$ με εκθέτη $\gamma_1 = 1$.



Σχήμα 4.2: Η κατανομή μεγέθους των στοιχείων του πίνακα μετάβασης M_{ij} στις μονοδιάστατες αναπαραστάσεις του φασικού χώρου: α) Κατανομή μεγέθους των στοιχείων του πίνακα μετάβασης ως προς τη μεταβλητή x . Η συνεχής ευθεία γραμμή παριστά ακριβή νόμο δύναμης με εκθέτη -1 . β) Αθροιστική κατανομή μεγέθους των στοιχείων του πίνακα μετάβασης για τη μεταβλητή x . Η συνεχής γραμμή επαληθεύει τη λογαριθμική εξάρτηση. γ) Κατανομή μεγέθους των στοιχείων του πίνακα μετάβασης ως προς τη μεταβλητή y . Η συνεχής ευθεία γραμμή παριστά ακριβή νόμο δύναμης με εκθέτη -1 . δ) Αθροιστική κατανομή μεγέθους των στοιχείων του πίνακα μετάβασης για τη μεταβλητή y . Η συνεχής γραμμή επαληθεύει τη λογαριθμική εξάρτηση. Οι τιμές των παραμέτρων είναι και πάλι $p_1 = 0.9585, p_2 = 0.016, p_3 = 0.026$. Το μέγεθος του πλέγματος είναι $L \times L = 2^8 \times 2^8$. Ο χρόνος προσομοίωσης είναι $T = 5 \cdot 10^7$ MCS.

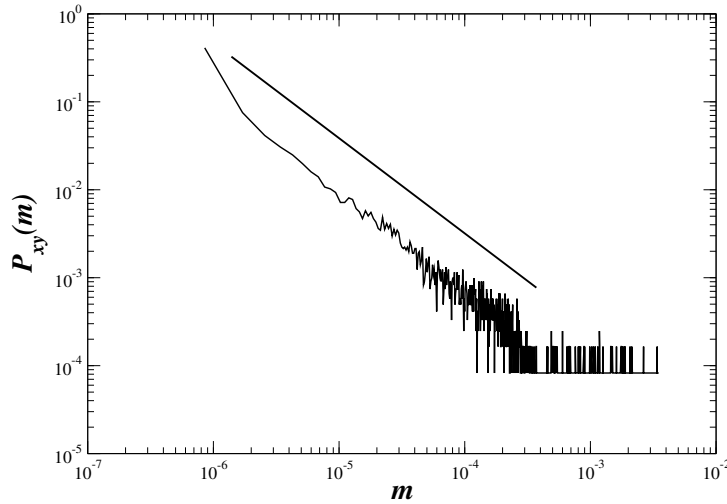
Η τιμή του εκθέτη γ_1 επαληθεύεται επίσης και από την αθροιστική κατανομή, $\tilde{P}_X(m)$, που αποδίδεται στο Σχ. 4.2β. Σε απλή λογαριθμική κλίμακα (x —άξονας), η αθροιστική κατανομή παρουσιάζει μία γραμμική μορφή, η οποία φανερώνει μία λογαριθμική εξάρτηση, η οποία, με τη σειρά της, επαληθεύει την ύπαρξη εκθέτη νόμου

δύναμης της τάξης του $\gamma_1 = 1$ στην αρχική κατανομή $P_X(m)$.

Παρόμοια συμπεριφορά καταγράφεται για τον πίνακα γειτνίασης που αντιστοιχεί στη μεταβλητή y . Στο Σχ. 4.2γ η κατανομή $P_Y(m)$ σχεδιάζεται σε διπλή λογαριθμική κλίμακα. Όπως και στην περίπτωση της $P_X(m)$ που είδαμε στο Σχ. 4.2α, μία κλιμάκωση $\sim m^{-1}$ ακολουθείται, ενώ στο Σχ. 4.2δ η αθροιστική κατανομή $\tilde{P}_Y(m)$ παρουσιάζει λογαριθμική εξάρτηση. Η ομοιότητα αυτή στην κλιμάκωση της κατανομής για τις δύο μεταβλητές είναι δικαιολογημένη αφού οι δύο μεταβλητές αλληλεπιδρούν και τροφοδοτεί η μία την άλλη περιγράφοντας με αυτόν τον τρόπο την κοινή δυναμική του συστήματος.

Η σύνθετη, διδιάστατη ($n = 2$) αναπαράσταση του δικτύου απαιτεί μακρύτερους πίνακες μεταβάσεων, αφού ο φασικός χώρος περιέχει $N_1 \times N_2$ κόμβους. Συγκεκριμένα ο πίνακας μεταβάσεων θα έχει διαστάσεις $N_1 N_2 \times N_1 N_2$. Στο Σχ. 4.3 παρουσιάζεται η κατανομή μεγέθους P_{xy} του πίνακα μεταβάσεων για την περίπτωση $n = 2$ για τις KMC προσομοιώσεις χρησιμοποιώντας πάντα τις ίδιες παραμέτρους $p_1 = 0.9585$, $p_2 = 0.016$, $p_3 = 0.026$. Ο φασικός χώρος έχει χωρισθεί σε $64^2 \times 64^2$ τμήματα, όπου $N_1 = N_2 = 64$. Για να λόγους σύγκρισης η συμπαγής ευθεία γραμμή στη διπλή λογαριθμική κλίμακα αντιπροσωπεύει έναν εκθέτη νόμου δύναμης $\gamma_1 = 1.08$, που είναι σε συμφωνία με τον εκθέτη που υπολογίστηκε στην αναπαράσταση για $n = 1$. Αυτή η μη τετριμμένη μη εκθετική μείωση στην κατανομή του μεγέθους των στοιχείων του πίνακα μεταβάσεων καταδεικνύει ότι το αφηρημένο δίκτυο που έχει κατασκευαστεί είναι δίκτυο ελεύθερης κλίμακας (scale free network).

Η κατανομή του βαθμού των κόμβων του δικτύου παρουσιάζει επίσης χαρακτηριστικά νόμου δύναμης. Για τον υπολογισμό της κατανομής του βαθμού, επιλέγεται η διδιάστατη ($n = 2$) αναπαράσταση, η οποία δίνει περισσότερες λεπτομέρειες για το φασικό χώρο. Σύμφωνα με την Εξ. 1.12 ο βαθμός d_j ενός κόμβου j υπολογίζεται ως άθροισμα πάνω στα στοιχεία M_{ij} του πίνακα μεταβάσεων. Η κατανομή του μεγέθους των στοιχείων του πίνακα μεταβάσεων ακολουθεί νόμο δύναμης, όπως μόλις δείξαμε. Καθώς ο αριθμός των κόμβων, κυρίως στην περίπτωση $n = 2$, είναι αρκετά μεγάλος η κατανομή του βαθμού των κόμβων αναμένεται να ακολουθεί τον ίδιο νόμο δύναμης. Αυτή η πρόταση αποτελεί μία άμεση συνέπεια του Γενικευμένου Κεντρικού Οριακού Θεωρήματος (Generalized Central Limit Theorem-GCLT) [78] το οποίο αφορά κατανομές με ουρές τύπου νόμου δύναμης. Οι προσομοιώσεις επιβεβαιώνουν τις συνέπειες του GCLT.

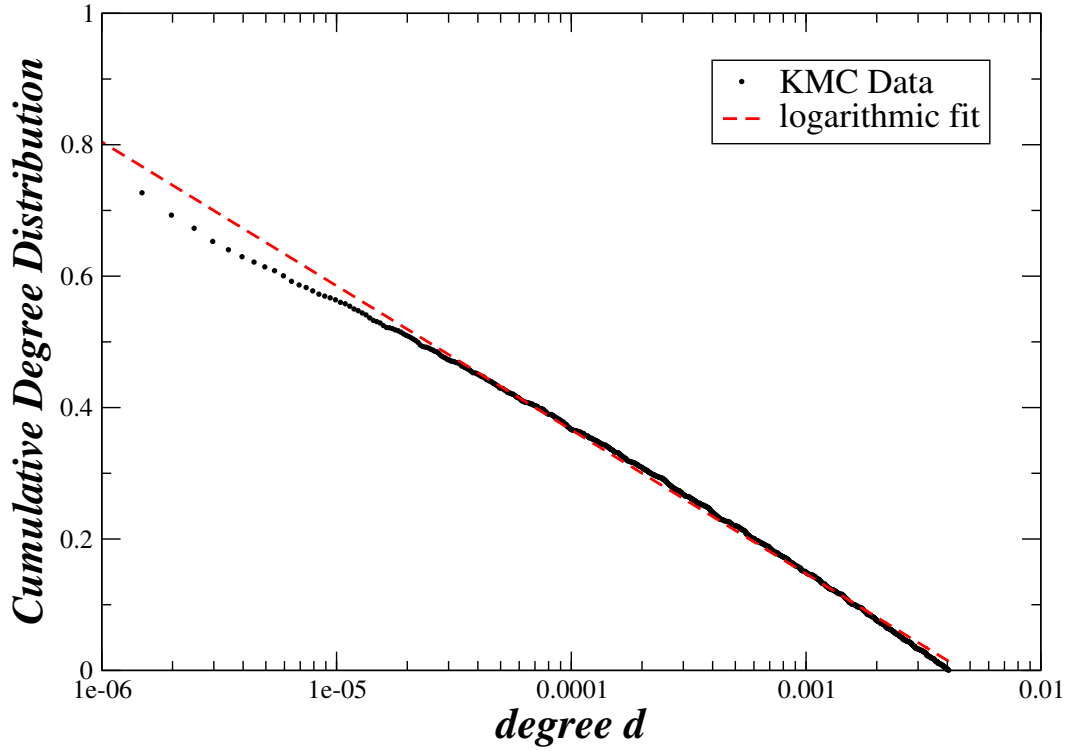


Σχήμα 4.3: Η κατανομή μεγέθους των στοιχείων του σύνθετου πίνακα μετάβασης M_{ij} στη διδιάστατη αναπαράσταση του φασικού χώρου. Η συνεχής ευθεία γραμμή επαληθεύει νόμο δύναμης με εκθέτη -1.08 . Οι τιμές των παραμέτρων είναι ξανά $p_1 = 0.9585, p_2 = 0.016, p_3 = 0.026$ και το μέγεθος του συστήματος $L \times L = 2^8 \times 2^8$. Ο χρόνος προσομοίωσης είναι της τάξης των $5 \cdot 10^7$ MCS.

Στο Σχ. 4.4 αποδίδεται η αθροιστική κατανομή του βαθμού των κόμβων του δικτύου, η οποία παρουσιάζει καθαρή γραμμική συμπεριφορά σε ημιλογαριθμική κλίμακα, δηλαδή έχει λογαριθμική εξάρτηση, όπως επιβεβαιώνει και η διακεκομμένη γραμμή. Αυτό έρχεται σε συμφωνία με την κατανομή βαθμού νόμου δύναμης με εκθέτη $\gamma = 1$, όπως άλλωστε είδαμε και για την κατανομή του μεγέθους των στοιχείων του πίνακα μεταβάσεων. Ας σημειώσουμε, στο σημείο αυτό, ότι αν τα στοιχεία M_{ij} του πίνακα μεταβάσεων είναι τυχαία και ομοιόμορφα κατανεμημένα, τότε η κατανομή του βαθμού παίρνει τη μορφή μιας Γκαουσιανής κατανομής (Gaussian distribution) με θόρυβο, για πεπερασμένο μέγεθος του πίνακα μεταβάσεων.

Μικροί εκθέτες κατανομής του βαθμού, δηλαδή $\gamma < 2$, δεν είναι ασυνήθιστοι σε φαινόμενα του πραγματικού κόσμου. Έχουν παρατηρηθεί, όμως, και μελετηθεί σε κοινωνικά δίκτυα (δίκτυα ηλεκτρονικών μηνυμάτων, δίκτυα ανταλλαγής πακέτων, κλπ). Τέτοιοι εκθέτες εκφράζουν την ιδιότητα κάποιων δικτύων στα οποία ο συνολικός αριθμός των συνδέσεων ή το συνολικό βάρος που μεταφέρεται από τους συνδέσμους, αυξάνεται γρηγορότερα από τον αριθμό των κόμβων [170].

Η κατανομή του συντελεστή συσσώματωσης P_{cc} επίσης παρουσιάζει πτώση νόμου δύναμης στην περίπτωση που μελετάμε. Να σημειωθεί ότι στην περίπτωση τυχαίων και ομοιόμορφα κατανεμημένων στοιχείων του πίνακα μεταβάσεων, η P_{cc} ακολουθεί και αυτή Γκαουσιανή κατανομή διαταραγμένη με θόρυβο.

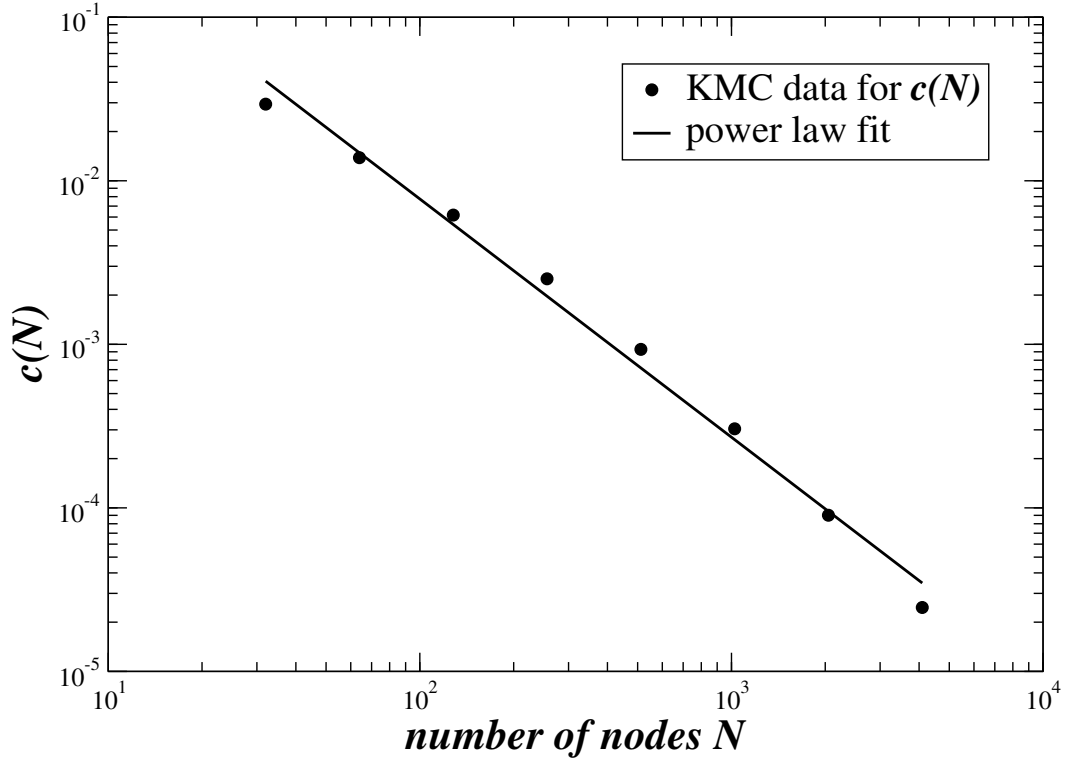


Σχήμα 4.4: Η αθροιστική κατανομή του βαθμού των κόμβων του δικτύου στη διδιάστατη αναπαράσταση του φασικού χώρου. Οι τιμές των παραμέτρων είναι ξανά $p_1 = 0.9585$, $p_2 = 0.016$, $p_3 = 0.026$ και το μέγεθος του συστήματος $L \times L = 2^8 \times 2^8$. Ο χρόνος προσομοίωσης είναι της τάξης των $5 \cdot 10^7$ MCS.

Στη συνέχεια, προκειμένου να ανιχνεύσουμε περαιτέρω τις ιδιότητες ελεύθερης κλίμακας του αφηρημένου δικτύου, υπολογίζουμε τον ολικό μέσο συντελεστή συσσωμάτωσης ως συνάρτηση του μεγέθους του δικτύου που αντιπροσωπεύεται από τον αριθμό N των κόμβων του δικτύου. Για λόγους απλότητας και υπολογιστικής ευκολίας μελετούμε ξεχωριστά το φασικό χώρο των δύο μεταβλητών X και Y , ώστε να διατηρήσουμε το μέγεθος του πίνακα μεταβάσεων στην τάξη του $N_{1(2)} \times N_{1(2)}$. Ο φασικός χώρος της κάθε μεταβλητής X, Y χωρίζεται σε $N_{1(2)} = 32, \dots, 4096$ τμήματα-κόμβους και υπολογίζονται οι αντίστοιχοι μέσοι συντελεστές συσσωμάτωσης ($c_1(N), c_2(N)$).

Το Σχ. 4.5 παρουσιάζει τον ολικό συντελεστή συσσωμάτωσης $c(N) = \frac{c_1(N) + c_2(N)}{2}$. Σε διπλή λογαριθμική κλίμακα ο $c(N)$ φαίνεται να ακολουθεί μία ελάττωση νόμου δύναμης με εκθέτη $\nu \sim 1.46$. Παρόμοιες τιμές του εκθέτη υπολογίζονται για τους ατομικούς συντελεστές συσσωμάτωσης $C_1(N), C_2(N)$, με βάση τις συγκεντρώσεις x, y . Από τη βιβλιογραφία ξέρουμε ότι ο εκθέτης $\nu = 1$ χαρακτηρίζει τα τυχαία και ασυσχέτιστα

δίκτυα [129]. Στην περίπτωση μας η τιμή που έχει προκύψει $\nu = 1.46$ επαληθεύει ότι το σύστημα ανήκει στην κατηγορία των δικτύων ελεύθερης κλίμακας.



Σχήμα 4.5: Ο μέσος συντελεστής συσσωμάτωσης ως συνάρτηση του μεγέθους του δικτύου. Οι τιμές των παραμέτρων είναι ξανά $p_1 = 0.9585$, $p_2 = 0.016$, $p_3 = 0.026$ και το μέγεθος του συστήματος $L \times L = 2^8 \times 2^8$. Ο χρόνος προσομοίωσης είναι της τάξης των $5 \cdot 10^7$ MCS.

Η παρουσία εκθέτη νόμου δύναμης στην αναπαράσταση του αφηρημένου δικτύου ενός συστήματος αντίδρασης προσομοιωμένου με τη μέθοδο KMC πάνω σε υπόστρωμα χαμηλής διάστασης (2-D) επιβεβαιώνει προηγούμενες έρευνες που δείχνουν το σχηματισμό μορφοκλασματικών δομών στη χωρική διάταξη των αντιδρώντων και προϊόντων ως αποτέλεσμα τόσο της συσσωμάτωσης ομόλογων σωματιδίων όσο και του ανταγωνισμού μεταξύ των συσσωματωμάτων [165, 167]. Καθώς πραγματοποιούνται στοχαστικές αλληλεπιδράσεις στα όρια μεταξύ των συσσωματωμάτων, όπως έχουμε πει στην ενότητα 2.4 αυτά τα όρια δημιουργούν πολύπλοκους μορφοκλασματικούς σχηματισμούς. Αυτή η χωρική πολυπλοκότητα σε συνδυασμό με τη δυναμική πολυπλοκότητα, διαμορφώνει τον πίνακα μεταβάσεων. Έτσι οι εκθέτες νόμου δύναμης του αφηρημένου δικτύου οφείλουν την ύπαρξή τους στους μορφοκλασματικούς σχηματισμούς οι οποίοι αναπτύσσονται ως συνέπεια των περιορισμών της δομής πάνω στη δυναμική της αντίδρασης.

Ο μηχανισμός διάχυσης, ο οποίος μελετήθηκε στο δεύτερο κεφάλαιο, εισάγει σημαντική ανάμειξη στο σύστημα. Στο σημείο εκείνο είδαμε ότι αν και κανείς θα περίμενε να οδηγηθεί το σύστημα προς τη λύση του Μέσου Πεδίου, πρέπει να είμαστε πολύ προσεκτικοί πριν διατυπώσουμε κάποιο συμπέρασμα, αφού τελικά στις εξισώσεις Μέσου Πεδίου δε συμπεριλαμβάνονται όροι που να αντιστοιχούν στη διάχυση των ειδών. Ένα αντίστοιχο φαινόμενο αναφέρεται και στην περίπτωση της [32], όπου είδαμε πως η εισαγωγή διάχυσης σε ένα σύστημα με κέντρο μεταβάλλει τη συντηρητικότητα του συστήματος και δημιουργεί δυναμική οριακού κύκλου. Έτσι δε μπορούμε να πούμε ότι η διάχυση, επηρεάζει το σύστημα οδηγώντας το προς την κατάσταση ισορροπίας του. Ομοίως, στην περίπτωση που ένα σύστημα αντίδρασης-διάχυσης αντιμετωπίζεται ως αφηρημένο δίκτυο, όπως συμβαίνει σε αυτό το κεφάλαιο. Το δίκτυο αυτό αναμένεται να αντανakλά την τάση της γενικής ροής (μετάβασης) πληροφορίας (πυκνότητας) από τη μία κατάσταση στην άλλη, όταν το σύστημα έχει αποκτήσει την κατάσταση ισορροπίας του. Χρειάζεται, όμως, περαιτέρω μελέτη όταν διεργασίες όπως διάχυση ή αντιδράσεις μεγάλης απόστασης επιβληθούν στη δυναμική.

4.5 Συμπεράσματα

Στην παρούσα ενότητα από το χώρο φάσεων του συστήματος LLC κατασκευάζουμε το αφηρημένο δίκτυο για τις μεταβλητές x, y . Οι διαμερίσεις του χώρου των φάσεων αποτελούν τους κόμβους του δικτύου ενώ η δυναμική του συστήματος αντιστοιχεί στους συνδέσμους ανάμεσα στους κόμβους. Στη συνέχεια κατασκευάζουμε τον πίνακα συνδεσιμότητας του αφηρημένου δικτύου και υπολογίζουμε κάποια χαρακτηριστικά μεγέθη, τις κατανομές των οποίων αποδίδουμε γραφικά. Τα μεγέθη αυτά είναι το α) μέγεθος των στοιχείων του πίνακα συνδεσιμότητας, β) ο βαθμός των κόμβων του δικτύου και γ) ο συντελεστής συσσώματωσης.

Δείχνουμε ότι οι κατανομές του μεγέθους των στοιχείων του πίνακα συνδεσιμότητας και του βαθμού των κόμβων του δικτύου, αλλά και ο μέσος συντελεστής συσσώματωσης του δικτύου ακολουθούν νόμο δύναμης. Τα αποτελέσματα αυτά μας οδηγούν στο συμπέρασμα ότι το αφηρημένο δίκτυο του φασικού χώρου του LLC είναι δίκτυο ελεύθερης κλίμακας.

Κεφάλαιο 5

Χιμαιρικές Καταστάσεις στο μοντέλο Πλεγματικού Οριακού Κύκλου

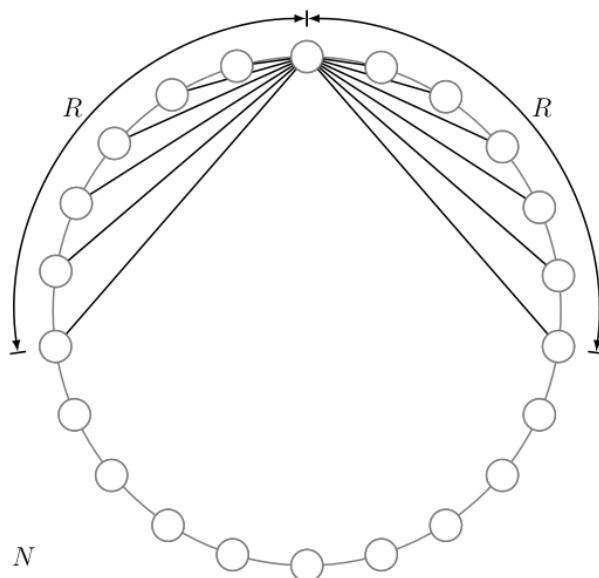
5.1 Δομή του Κεφαλαίου

Στο κεφάλαιο αυτό εξερευνούμε το σύστημα LLC ως προς την ύπαρξη χιμαιρικών καταστάσεων. Αφού αναλύσουμε τη δομή της διάταξης και τη μέθοδο ολοκλήρωσης του συστήματος, επαληθεύουμε την ύπαρξη χιμαιρικών καταστάσεων μέσω της μέσης φασικής ταχύτητας των ταλαντώσεων. Στη συνέχεια μεταβάλλουμε τις παραμέτρους ελέγχου του συστήματος, δηλαδή την παράμετρο διακλάδωσης p_1 και το εύρος σύζευξης R και παρατηρούμε τη μεταβολή της πολλαπλότητας των συγχρονισμένων και ασυγχρόνιστων περιοχών του συστήματος.

5.2 Το LLC ως πρότυπο για τη μελέτη των χιμαιρικών καταστάσεων

Όπως είπαμε στο κεφάλαιο αυτό επιχειρούμε μία διαφορετική προσέγγιση. Συνεχίζουμε τη μελέτη του μοντέλου Πλεγματικού Οριακού Κύκλου (LLC), αλλά αυτή τη φορά εργαζόμαστε υπό άλλη οπτική γωνία. Θεωρούμε ταλαντωτές LLC στην προσέγγιση Μέσου Πεδίου, οργανωμένους σε ένα δίκτυο μίας διάστασης (δακτύλιος), οι οποίοι αλληλεπιδρούν γραμμικά μεταξύ τους (Σχήμα 5.1). Η χρήση της δυναμικής Μέσου Πεδίου σε κάθε κόμβο του δικτύου, μιμείται τις αλληλεπιδράσεις μεταξύ ομάδων

πληθυσμών, όταν κάθε ομάδα καταλαμβάνει έναν κόμβο. Σε κάθε κόμβο οι υπάρχοντες πληθυσμοί υπακούουν τις εξισώσεις Μέσου Πεδίου που έχουμε ήδη μελετήσει, ενώ οι διάφοροι κόμβοι αλληλεπιδρούν μεταξύ τους μέσω μιας γραμμικής και μη τοπικής σύζευξης, όπως θα δούμε αναλυτικά λίγο παρακάτω.



Σχήμα 5.1: Η διάταξη των ταλαντωτών του συστήματος. Οι N ταλαντωτές βρίσκονται σε δομή δακτυλίου. Κάθε ταλαντωτής εσωτερικά αποτελεί ένα σύστημα ΠΟΚ (LLC) όπως το έχουμε μελετήσει στο πρώτο κεφάλαιο. Επίσης κάθε ταλαντωτής είναι συζευγμένος, με γραμμική σύζευξη, με R γείτονες από τα δεξιά και R γείτονες από τα αριστερά του.

Το μοντέλο του Πλεγματοκού Οριακού Κύκλου (LLC) που αναλύουμε στην παρούσα εργασία είναι ένα μοντέλο που μπορεί να βρει εφαρμογές σε διάφορες επιστημονικές περιοχές, όπως έχουμε ήδη αναφέρει. Θεωρώντας το, λοιπόν, ένα οικολογικό μοντέλο, θελήσαμε να διερευνήσουμε, σε αυτό, την ύπαρξη χιμαιρικών καταστάσεων. Τηρουμένων των αναλογιών, τα συμπεράσματά μας θα είναι παρόμοια αν χρησιμοποιήσουμε το LLC για να περιγράψουμε κάποιο επιδημιολογικό ή χημικό σύστημα.

Στο σημείο αυτό πρέπει να σημειωθεί ότι το μοντέλο του Πλεγματοκού Οριακού Κύκλου (LLC) είναι ιδανικό για τη μελέτη της δημιουργίας χιμαιρικών καταστάσεων για τρεις λόγους: α) Περιγράφει συνήθεις οικολογικές-κοινωνικές-χημικές διεργασίες μέσω διαφορικών εξισώσεων τύπου θηρευτή-θηράματος, β) Παρουσιάζει δυναμική Οριακού Κύκλου που, με κατάλληλη σύζευξη, οδηγεί συχνά στη δημιουργία χιμαιρικών καταστάσεων και γ) Επιτρέπει τη σύγκριση του μοντέλου με ρεαλιστικές προσομοιώσεις του σε πλέγμα, όπου κάθε κελίο καταλαμβάνεται από ένα σωματίδιο.

Ας τονισθεί εδώ ότι οι μελέτες χιμαιρικών καταστάσεων που αναφέρθηκαν στην Εισαγωγή μπορούν να χωρισθούν σε δύο ομάδες. Η μία ομάδα απαρτίζεται από τα περισσότερα εκ των πειραμάτων ([148, 149, 150] και από τη μελέτη για τα κοινωνικά συστήματα ([146])). Η άλλη ομάδα περιλαμβάνει θεωρητικές μελέτες ([134, 140, 145])). Η διαφορά μεταξύ των δύο ομάδων είναι ότι στην πρώτη ομάδα οι πληθυσμοί είναι εξαρχής στημένοι ως βάση για τη δημιουργία χιμαιρικών καταστάσεων. Δηλαδή υπάρχουν αρχικά διαχωρισμένοι υποπληθυσμοί ταλαντωτών και στο σύστημα υπάρχει και μη τοπική ή ολική (global) σύζευξη ανάμεσα στους ταλαντωτές κάθε υποπληθυσμού. Επιπλέον, επιβάλλεται και σύζευξη ολική (global) μεταξύ των δύο υποπληθυσμών. Τελικά οι χιμαιρικές καταστάσεις που επιτυγχάνονται ρυθμίζονται από τη δομή του συστήματος. Δηλαδή οι ταλαντωτές στον έναν υποπληθυσμό είναι μεταξύ τους συγχρονισμένοι, ενώ οι ταλαντωτές στον δεύτερο υποπληθυσμό είναι μεταξύ τους ασυγχρόνιστοι. Στη δεύτερη ομάδα, δεν υπάρχει κάποιος αρχικός σχηματισμός που να οδηγεί το σύστημα σε χιμαιρική κατάσταση. Οι χιμαιρικές καταστάσεις προκύπτουν αυθόρμητα κάτω από ορισμένες συνθήκες, δηλαδή για συγκεκριμένες τιμές των παραμέτρων, ειδική δυναμική, ειδικούς τύπους σύζευξης και αρχικών συνθηκών. Η ανάλυση του μοντέλου Πλεγματοκού Οριακού Κύκλου που πραγματοποιούμε εμείς ακολουθεί την τακτική της δεύτερης ομάδας.

5.3 Δομή της διάταξης προς ανάλυση

Μέχρι τώρα, στις KMC προσομοιώσεις είχαμε τον περιορισμό ότι σε κάθε κελίο S_i του υπό μελέτη πλέγματος υπήρχε αναγκαστικά μονή κατάληψη από κάποιο σωματίδιο. Τώρα κάθε αντίστοιχος κόμβος k του υπό μελέτη δικτύου περιλαμβάνει πολλά σωματίδια, ένα ολόκληρο υποσύστημα αποτελούμενο και από τα τρία είδη X , Y και S , τα οποία αλληλεπιδρούν μέσα σε κάθε κόμβο μέσω των εξισώσεων του Μέσου Πεδίου.

Θεωρούμε λοιπόν μη τοπικά συζευγμένους ταλαντωτές σύμφωνα με τις εξισώσεις:

$$\frac{dx_k}{dt} = -2p_1x_k^2y_k^2 + p_2x_k(1 - x_k - y_k) + \frac{\sigma}{2R} \sum_{j=k-R}^{k+R} (x_j - x_k) \quad (5.1.\alpha)$$

$$\frac{dy_k}{dt} = p_1x_k^2y_k^2 - p_3y_k(1 - x_k - y_k) + \frac{\sigma}{2R} \sum_{j=k-R}^{k+R} (y_j - y_k), \quad (5.1.\beta)$$

όπου ο δείκτης k αναφέρεται στο δείκτη του εκάστοτε κόμβου-ταλαντωτή. Κάθε ταλαντωτής είναι συζευγμένος με τους $R > 0$ κοντινότερους γείτονές του, με σταθερά σύζευξης σ . Έτσι εισάγεται στο σύστημα μη τοπικότητα υπό τη μορφή μίας τοπολογίας δακτυλίου, όπως προτείνεται στην [135]. Εκεί ως πίνακας σύζευξης θεωρήθηκε ένας πίνακας τύπου στροφής, με σκοπό την επίτευξη τόσο άμεσης (direct) όσο και έμμεσης (cross) σύζευξης μεταξύ των μεταβλητών του συστήματος. Το σύστημα που μελετούμε εμείς είναι πιο απλό γιατί παρουσιάζει μόνο άμεση σύζευξη μεταξύ των συγκεντρώσεων των ειδών.

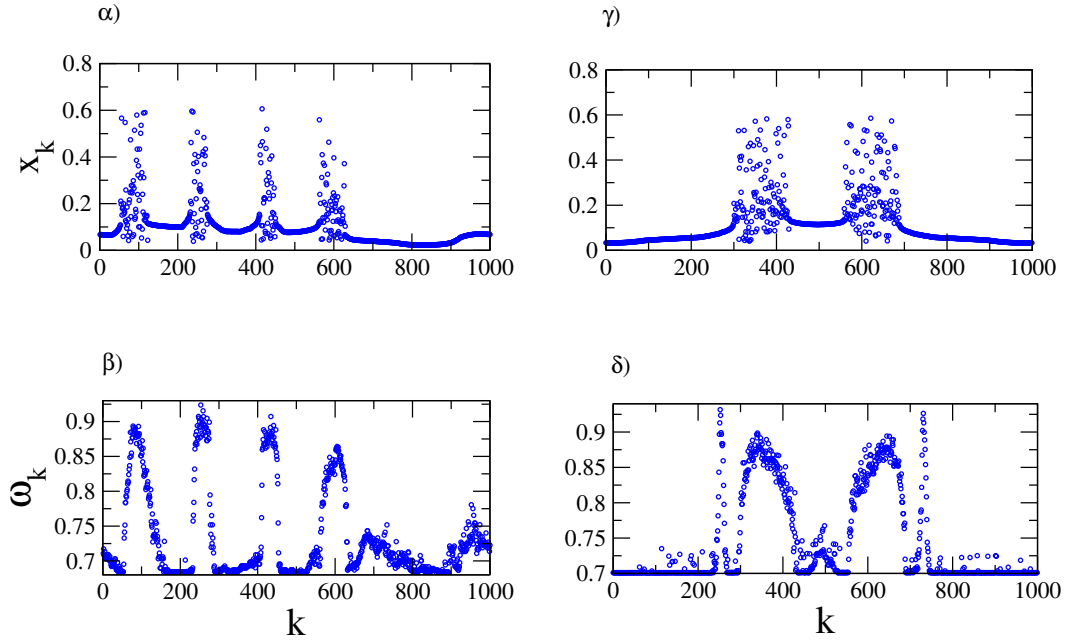
Όπως έχουμε αναφέρει και στα προηγούμενα κεφάλαια, η παράμετρος p_1 δημιουργεί μία διαφορά στην κλίμακα χρόνου, αφού η κύρια αντίδραση του μοντέλου 2.1.α είναι αργή διαδικασία σε σχέση με τις άλλες δύο αντιδράσεις, 2.1.β 2.1.γ. Έτσι, κι εδώ, οι παράμετροι p_2 και p_3 θα κρατηθούν σε σταθερές τιμές και συγκεκριμένα στις $p_2 = 0.5$, $p_3 = 0.8$, ενώ θα μεταβάλλεται η παράμετρος p_1 ως μέτρο απόστασης του συστήματος από το σημείο διακλάδωσης p_{1c} .

5.4 Μέθοδος Ολοκλήρωσης

Η μέθοδος που ακολουθείται για την αριθμητική ολοκλήρωση του συστήματος είναι η μέθοδος του Euler. Το βήμα ολοκλήρωσης είναι $h = 0.01$. Ο αριθμός των βημάτων ολοκλήρωσης συμβολίζεται με n . Ο χρόνος ολοκλήρωσης $t = n \cdot h$ κυμαίνεται από 30 βήματα ολοκλήρωσης μέχρι και 400 βήματα ολοκλήρωσης, δηλαδή $3000 < t < 40000$. Η περίοδος του συστήματος είναι της τάξης του $T = 18$. Οι αρχικές συνθήκες επιλέγονται κατάλληλα, αρχικά ώστε να μην ξεφεύγει η τροχιά του συστήματος προς τα ασταθή σημεία ισορροπίας, και κυρίως ώστε να είναι δυνατή η εμφάνιση των χιμαιρικών καταστάσεων στο σύστημά μας. Έχουμε διαπιστώσει ότι μία καλή επιλογή είναι η τυχαία κατανομή πάνω σε ένα ελλειψοειδές περιβεβλημένο από το τρίγωνο με κορυφές τα σταθερά σημεία του LLC μοντέλου Q_1 , Q_2 και Q_3 . Επίσης σε κάθε περίπτωση ως συγκεντρώσεις οι x και y πρέπει να είναι θετικές. Συγχρόνως πρέπει να ικανοποιούν τη συνθήκη διατήρησης του LLC, $x + y < 1$.

Δοκιμάζοντας διάφορες τιμές της σταθεράς σύζευξης σ καταλείξαμε σε ένα εύρος τιμών που επιτρέπει τη δημιουργία χιμαιρικών καταστάσεων. Μία κλασσική χιμαιρική κατάσταση με δύο συγχρονισμένες (και δύο μη συγχρονισμένες) περιοχές, δίνεται στο Σχήμα 5.2γ, όπου η συγκέντρωση x σχεδιάζεται ως προς το δείκτη k σε συγκεκριμένο

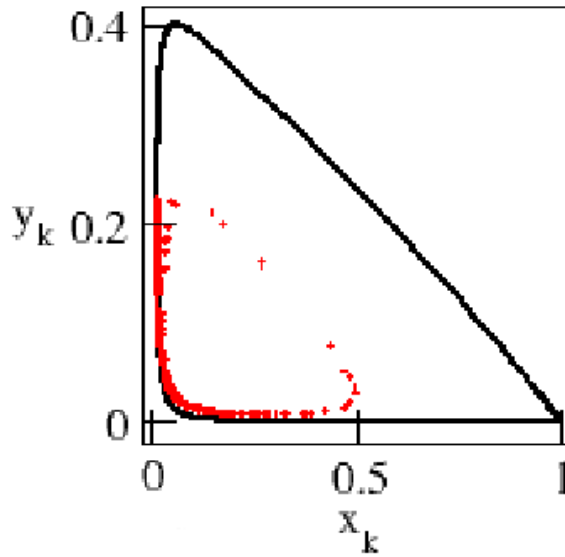
στιγμιότυπο. Ο αριθμός των LLC ταλαντωτών είναι $N = 1000$ και ο αριθμός των γειτόνων είναι $R = 340$ στη συγκεκριμένη περίπτωση. Η σταθερά σύζευξης είναι $\sigma = 0.015$.



Σχήμα 5.2: Χιμαιρικές καταστάσεις στο Μοντέλο LLC. Προφίλ των συγκεντρώσεων x σε όλους τους ταλαντωτές: α) για $R = 100$, γ) για $R = 340$. Αντίστοιχα προφίλ της μέσης φασικής ταχύτητας: β) για $R = 100$, δ) για $R = 340$. Χρόνος ολοκλήρωσης $t = 5000$ ($n = 50$). $N = 1000$, $\sigma = 0.015$, $p_1 = 300$, $p_2 = 0.5$ και $p_3 = 0.8$.

Στο Σχήμα 5.3 φαίνεται ένα στιγμιότυπο (κόκκινοι σταυροί) των εξισώσεων 5.1 στο (x, y) επίπεδο, μαζί με τον οριακό κύκλο του μη συζευγμένου συστήματος (Εξ. 2.5, μαύρη συνεχής γραμμή), για τις ίδιες τιμές των παραμέτρων. Παρατηρούμε ότι η σύζευξη οδηγεί σε μία "βυθισμένη" τροχιά, όπου, για τη συγκεκριμένη χρονική στιγμή, λόγω της σύζευξης υπάρχει μετατόπιση του σημείου ισορροπίας Q_4 πριν την αρχή των αξόνων. Οι περισσότεροι ταλαντωτές κινούνται στις πολλαπλότητες (manifolds) του σημείου-σάγματος Q_1 .

Σημαντικό ρόλο στη διαμόρφωση των τροχιών παίζουν τόσο η παράμετρος p_1 , η οποία εκφράζει την απόσταση από τη διακλάδωση *Hopf*, όσο και το εύρος σύζευξης R . Οι παράμετροι αυτές επηρεάζουν τη μορφή και την πολλαπλότητα των χιμαιρικών καταστάσεων. Στις επόμενες ενότητες θα εξετασθεί η συνεισφορά τους στη δημιουργία χιμαιρικών καταστάσεων.



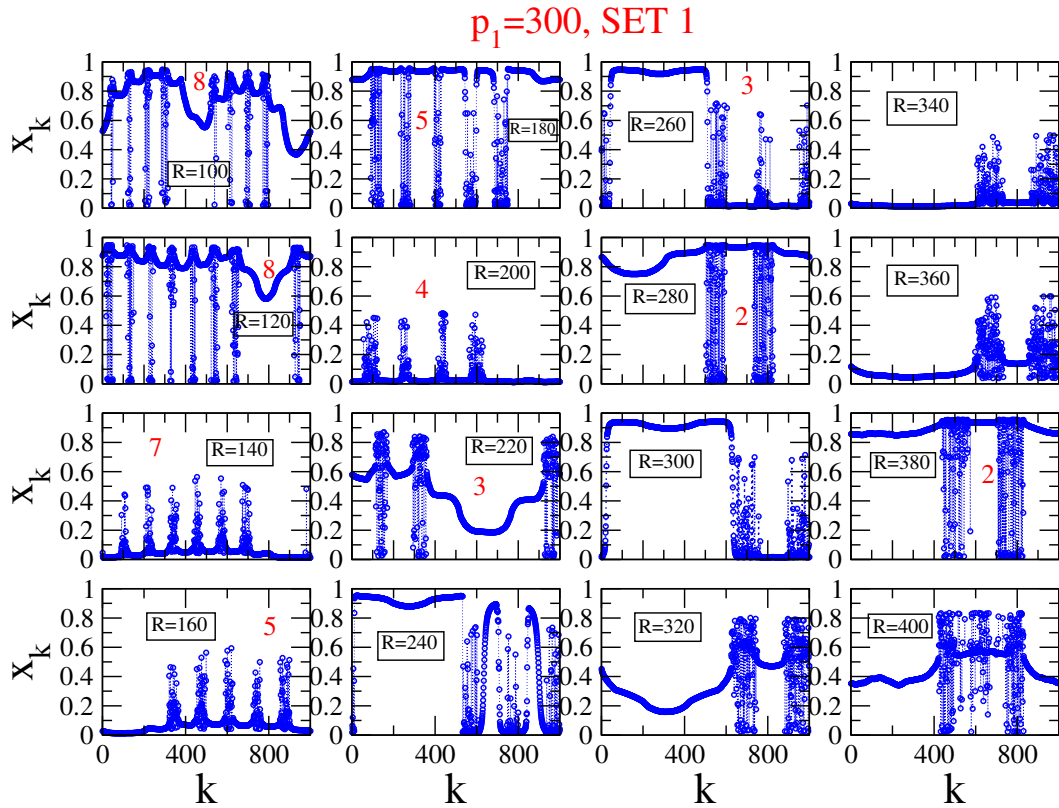
Σχήμα 5.3: Ένα στιγμιότυπο (x, y) στο συζευγμένο σύστημα (κόκκινοι σταυροί) και ο οριακός κύκλος στο αρχικό, μη συζευγμένο σύστημα (μαύρη συνεχής γραμμή). Χρόνος ολοκλήρωσης $t = 3000$ ($n = 30$), $N = 1000$, $R = 350$, $\sigma = 0.015$, $p_1 = 300$, $p_2 = 0.5$ και $p_3 = 0.8$.

Χιμαιρικές καταστάσεις με πολλαπλές περιοχές συγχρονισμού και μη συγχρονισμού αναφέρονται στη βιβλιογραφία ως συσσωρευμένες χιμαιρικές καταστάσεις (clustered chimeras) ή καταστάσεις πολλαπλών χιμαιρών (multi-chimera states). Είναι γνωστό ότι τέτοιες καταστάσεις μπορούν να εμφανισθούν όταν εισαχθεί χρονοκαθυστέρηση στη σύζευξη [171] ή όταν μεταβάλλεται το εύρος σύζευξης R μεταξύ των ταλαντωτών [135, 145, 147, 172]. Με βάση αυτά τα στοιχεία θέλουμε να ερευνήσουμε την ύπαρξη τέτοιων καταστάσεων πολλαπλών χιμαιρών στο σύστημά μας. Επιζητούμε να αναλύσουμε τη συμπεριφορά του συστήματός μας όταν μεταβάλλουμε τις παραμέτρους p_1 και R . Από εδώ και πέρα θα διατηρήσουμε σταθερές τις τιμές των παραμέτρων $p_2 = 0.5$, $p_3 = 0.8$ και $\sigma = 0.015$ και θα επικεντρώσουμε την προσοχή μας στη μεταβολή της p_1 και του R .

5.5 Μεταβάλλοντας το εύρος σύζευξης R

Αρχικά διατηρούμε σταθερή και την παράμετρο διακλάδωσης p_1 και μεταβάλλουμε το εύρος σύζευξης R .

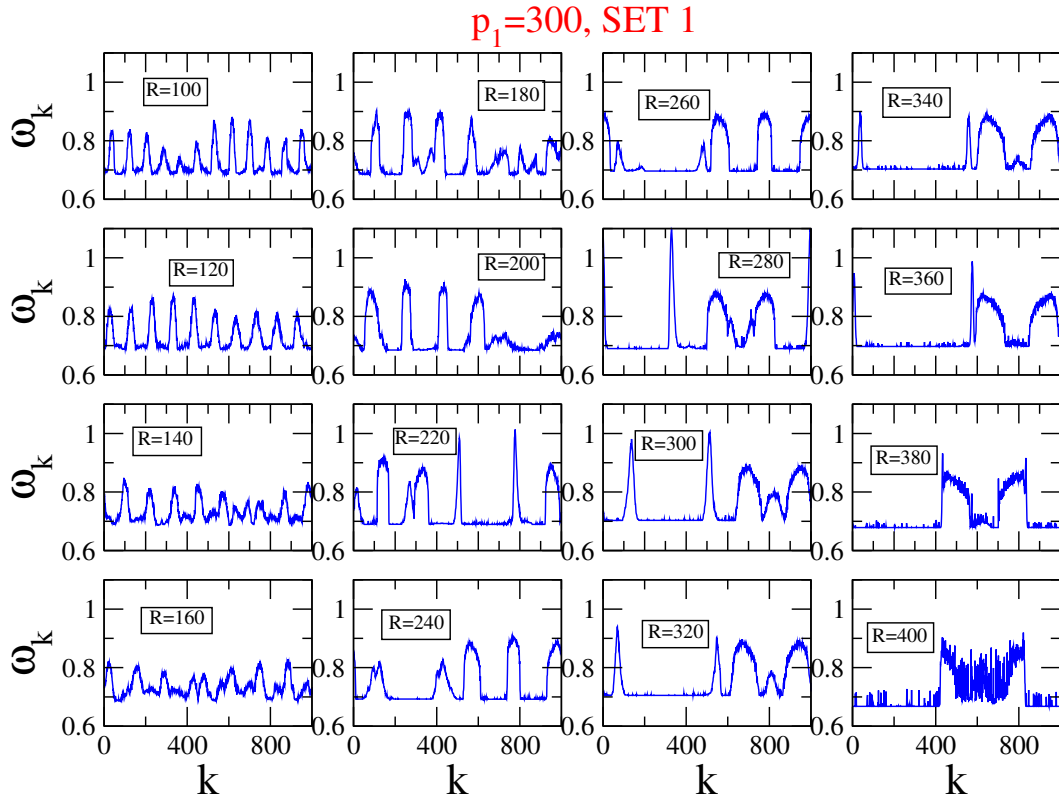
Το Σχήμα 5.4 δείχνει χιμαιρικές καταστάσεις της μεταβλητής x καθώς η παράμετρος R του συστήματος αυξάνεται. Ας θυμηθούμε ότι η παράμετρος R εκφράζει τον



Σχήμα 5.4: Στιγμιότυπα της τιμής x για διάφορες τιμές του εύρους σύζευξης R . Η τιμή του R αυξάνεται κατά 20 κάθε φορά. Οι υπόλοιπες παράμετροι του συστήματος είναι $N = 1000$, $\sigma = 0.015$, $p_1 = 300$, $p_2 = 0.5$, $p_3 = 0.8$, χρόνος ολοκλήρωσης $t = 10000$ ($n = 100$).

αριθμό των γειτόνων από κάθε μεριά του k ταλαντωτή. Για μικρές τιμές του εύρους σύζευξης μπορούμε να βρούμε μέχρι και οκτώ συγχρονισμένες (και ασυγχρόνιστες) περιοχές. Καθώς το R αυξάνεται, η πολλαπλότητα των χιμαιρικών καταστάσεων ελαττώνεται και καθώς το R πλησιάζει την τιμή 280 παρατηρούμε μία χιμαιρική κατάσταση με μόνο δύο συγχρονισμένες (και δύο ασυγχρόνιστες) περιοχές. Αυτή η "διπλή" κατάσταση χίμαιρας εμφανίζεται να είναι πολύ σταθερή, αφού διατηρείται μέχρι την τιμή $R = 400$, όπου ξεκινάει να αλλοιώνεται. Παρόμοια αποτελέσματα παρατηρούμε και στο Σχήμα 5.6 για μία διαφορετική επιλογή αρχικών συνθηκών του συστήματος. Στα σχήματα 5.5, 5.7 παρουσιάζονται τα προφίλ της μέσης φασικής ταχύτητας, αντιστοίχως για τα σχήματα 5.4, 5.6. Βλέπουμε ότι η φασική ταχύτητα είναι μεγαλύτερη στις ασυγχρόνιστες περιοχές ενώ παίρνει μέγιστη τιμή στο κέντρο κάθε συγχρόνιστης περιοχής. Αυτό έχει παρατηρηθεί και σε άλλα μοντέλα που υποστηρίζουν χιμαιρικές καταστάσεις [134, 135]. Διαπιστώνουμε επίσης ότι υπάρχει συμφωνία μεταξύ των στιγμιότυπων της

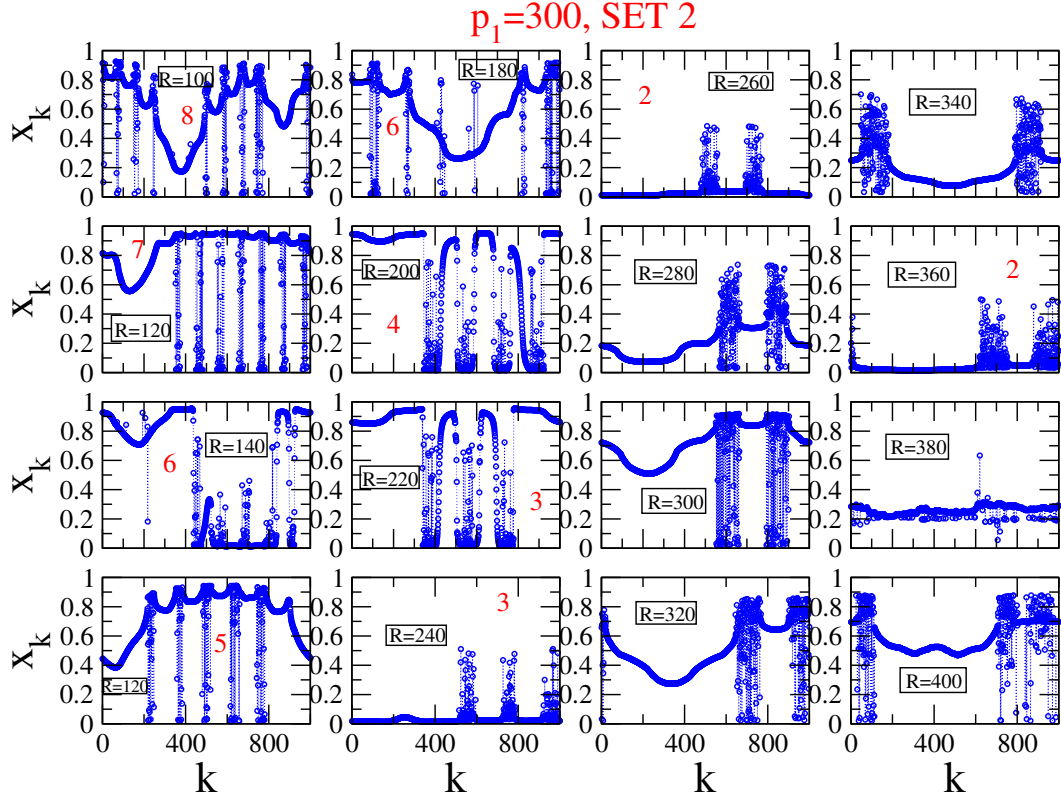
συγκέντρωσης x και του αντίστοιχου προφίλ της μέσης φασικής ταχύτητας ω_k , με την έννοια πως όταν παρατηρούμε χιμαιρική κατάσταση, το αντίστοιχο προφίλ της μέσης φασικής ταχύτητας παρουσιάζει την αναμενόμενη καμπυλωτή μορφή που αναφέραμε.



Σχήμα 5.5: Μέση φασική ταχύτητα ω_k για διάφορες τιμές του εύρους σύζευξης R . Η τιμή του R αυξάνεται κατά 20 κάθε φορά. Οι υπόλοιπες παράμετροι του συστήματος είναι $N = 1000$, $\sigma = 0.015$, $p_1 = 300$, $p_2 = 0.5$, $p_3 = 0.8$, χρόνος ολοκλήρωσης $t = 10000$ ($n = 100$).

Στο Σχήμα 5.8 βλέπουμε πώς μεταβάλλεται ο αριθμός των συγχρονισμένων (και ασυγχρονιστών) περιοχών της μεταβλητής x , για αυξανόμενο εύρος σύζευξης R και δεδομένη τιμή της παραμέτρου διακλάδωσης p_1 , για δύο διαφορετικές επιλογές αρχικών συνθηκών του συστήματος. Καθώς το R αυξάνεται, ο αριθμός των συγχρονισμένων (και ασυγχρονιστών) περιοχών τείνει να μειώνεται.

Η τάση αυτή φαίνεται να είναι ο γενικός κανόνας και παρατηρείται στο μοντέλο Fitzhugh-Nagumo [135], στο μοντέλο Hindmarsh-Rose [145] αλλά και σε μοντέλα διεγερσιμότητας τύπου I, όπως το μοντέλο Sniper [147]. Σε όλα αυτά τα μοντέλα ο αριθμός των συγχρονισμένων και των ασυγχρονιστών περιοχών μειώνεται καθώς το εύρος σύζευξης του συστήματος αυξάνεται.



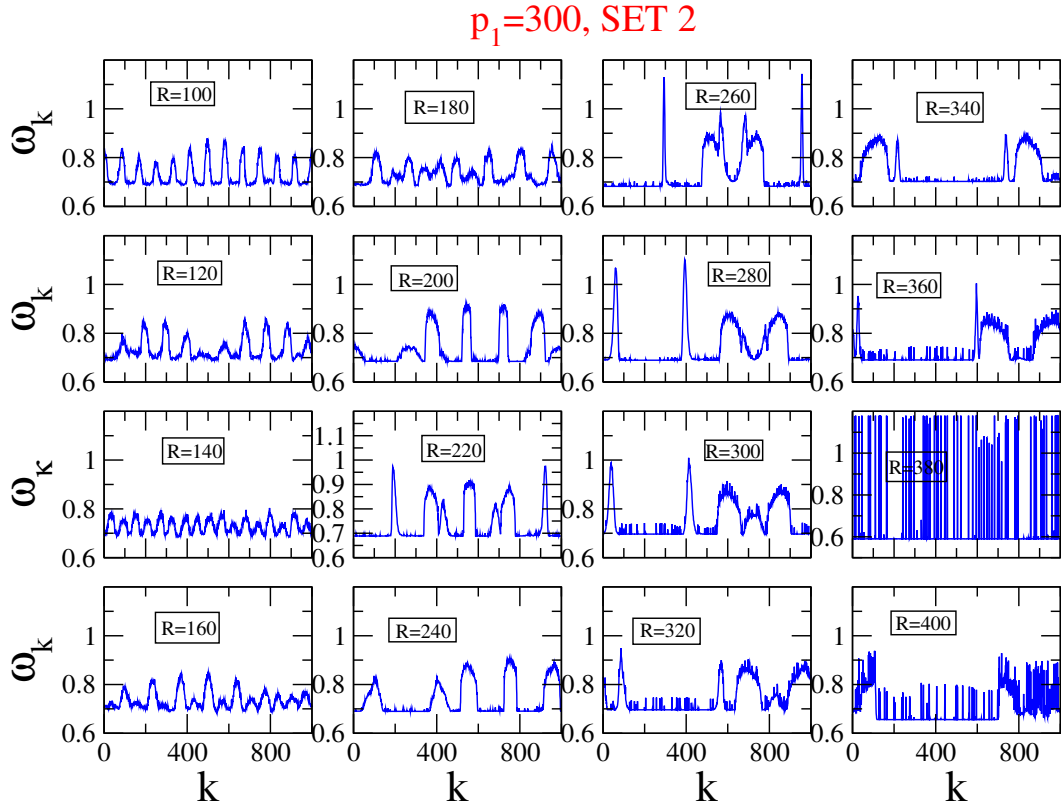
Σχήμα 5.6: Στιγμιότυπα της τιμής x για διάφορες τιμές του εύρους σύζευξης R . Η τιμή του R αυξάνεται κατά 20 κάθε φορά. Οι υπόλοιπες παράμετροι του συστήματος είναι $N = 1000$, $\sigma = 0.015$, $p_1 = 300$, $p_2 = 0.5$, $p_3 = 0.8$, χρόνος ολοκλήρωσης $t = 10000$ ($n = 100$).

5.6 Μεταβάλλοντας την παράμετρο διακλάδωσης p_1

Στη συνέχεια, διατηρούμε σταθερό το εύρος σύζευξης R ενώ μεταβάλλουμε την παράμετρο διακλάδωσης p_1 .

Όπως έχουμε δει νωρίτερα, για το ασύζευκτο σύστημα, διατηρώντας τους ρυθμούς p_2 και p_3 σταθερούς, και μεταβάλλοντας τον ρυθμό p_1 , μία διακλάδωση Hopf παρουσιάζεται κοντά στην τιμή $p_{1c} = 9.8228$ και ένας οριακός κύκλος πολύ μικρού πλάτους και δεδομένης περιόδου δημιουργείται (Σχήμα 2.2). Καθώς ο ρυθμός p_1 αυξάνεται, ο οριακός κύκλος ξεκινά να πέφτει πάνω στις ετεροκλινείς αμετάβλητες πολλαπλότητες (manifolds) (από το Q_2 στο Q_1 και από το Q_1 στο Q_3), οι οποίες καθορίζουν την κοίτη έλξης του οριακού κύκλου.

Η περίοδος των πολλαπλοτήτων είναι άπειρη. Έτσι όταν ο οριακός κύκλος τις πλησιάζει, η περίοδος του αυξάνεται πάρα πολύ. Επομένως ο ρυθμός p_1 αποτελεί μία

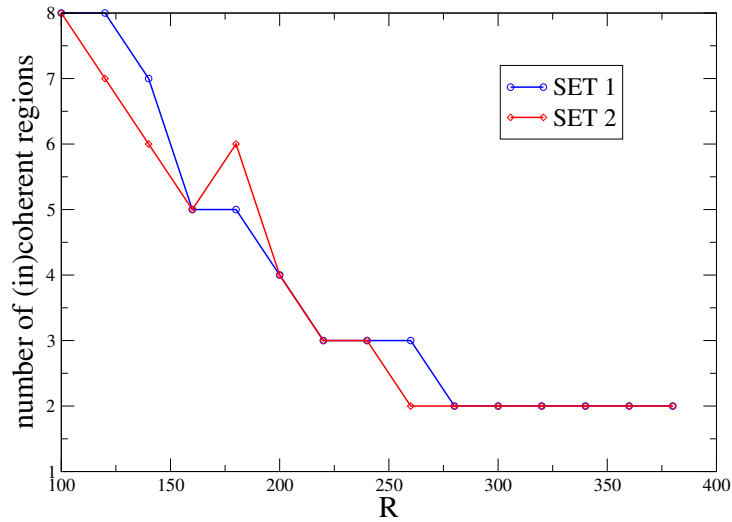


Σχήμα 5.7: Μέση φασική ταχύτητα ω_k για διάφορες τιμές του εύρους σύζευξης R . Η τιμή του R αυξάνεται κατά 20 κάθε φορά. Οι υπόλοιπες παράμετροι του συστήματος είναι $N = 1000$, $\sigma = 0.015$, $p_1 = 300$, $p_2 = 0.5$, $p_3 = 0.8$, χρόνος ολοκλήρωσης $t = 10000$ ($n = 100$).

κρίσιμη παράμετρο, η οποία εισάγει δύο κλίμακες χρόνου στη δυναμική του συστήματος και καθορίζει την περίοδο των ατομικών ταλαντώσεων.

Στην παρούσα ενότητα επιχειρούμε την ανάλυση των καταστάσεων χίμαιρας σε συνάρτηση με την απόσταση από το κρίσιμο σημείο Hopf.

Το Σχήμα 5.9 δείχνει χίμαιρικές καταστάσεις της μεταβλητής x καθώς η παράμετρος διακλάδωσης p_1 μειώνεται, για δεδομένο, σταθερό εύρος σύζευξης $R = 220$. Παρατηρούμε ότι ο αριθμός των συγχρονισμένων (και ασυγχρόνιστων) περιοχών αυξάνεται καθώς το p_1 πλησιάζει προς την τιμή διακλάδωσης, μέχρι το σημείο $R = 150$ όπου η εικόνα πλέον δεν είναι καθαρή. Αντίστοιχα στο Σχήμα 5.11 βλέπουμε στιγμιότυπα για μειούμενο p_1 και για $R = 160$, ενώ στο Σχήμα 5.13 βλέπουμε στιγμιότυπα για μειούμενο p_1 και $R = 100$. Και πάλι παρατηρούμε ότι καθώς το p_1 μειώνεται, κινούμενο προς το σημείο διακλάδωσης, ο αριθμός των συγχρονισμένων (και ασυγχρόνιστων) περιοχών αυξάνεται μέχρι που στο $p_1 \approx 100$ ή $p_1 \approx 150$, αναλόγως με την περίπτωση,



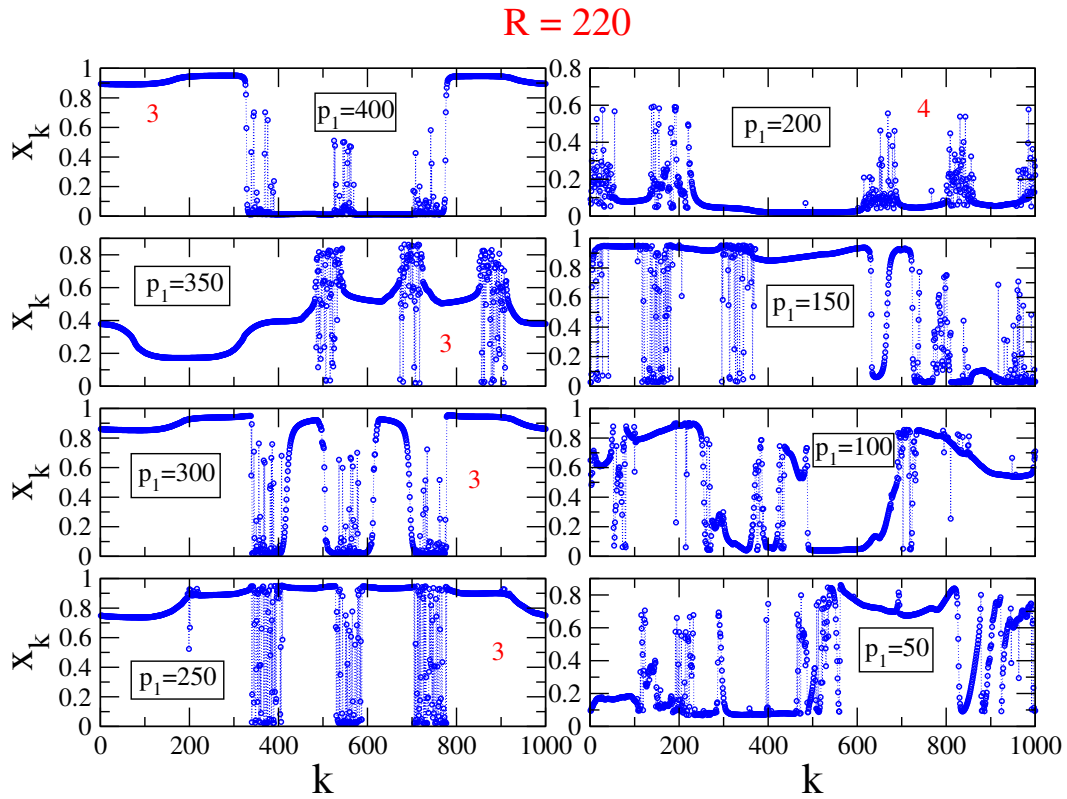
Σχήμα 5.8: Εξάρτηση του αριθμού των συγχρονισμένων (και ασυγχρόνιστων) περιοχών της μεταβλητής x από το εύρος σύζευξης R , για δύο διαφορετικές αρχικές συνθήκες του συστήματος. Οι υπόλοιπες παράμετροι του συστήματος είναι $N = 1000$, $\sigma = 0.015$, $p_1 = 300$, $p_2 = 0.5$, $p_3 = 0.8$, χρόνος ολοκλήρωσης $t = 10000$ ($n = 100$).

δεν έχουμε ξεκάθαρη εικόνα για τη χωρική δομή των ταλαντωτών.

Παρατηρούμε, δηλαδή ότι, καθώς πλησιάζουμε στο κρίσιμο σημείο Hopf και ο αριθμός των ασυγχρόνιστων περιοχών μεγαλώνει, οι ασυγχρόνιστες περιοχές επικαλύπτονται, δημιουργώντας ουσιαστικά μία συνεχή ασυγχρόνιστη περιοχή. Παράλληλα, το πλάτος των συγχρονισμένων και ασυγχρόνιστων ταλαντώσεων μειώνεται καθώς πλησιάζουμε το κρίσιμο σημείο.

Στα σχήματα 5.10, 5.12, 5.14 αποδίδουμε τις εικόνες της μέσης φασικής ταχύτητας που αντιστοιχούν με σειρά στα σχήματα 5.9, 5.11, 5.13. Βλέπουμε ότι όταν τα προφίλ της μέσης φασικής ταχύτητας εμφανίζουν κανονική μορφή, τότε και τα στιγμιότυπα της κίνησης των ταλαντωτών παρουσιάζουν τα τυπικά χαρακτηριστικά των χιμαιρικών καταστάσεων, ενώ όταν τα προφίλ της μέσης φασικής ταχύτητας δεν εμφανίζουν κανονική, τυπική μορφή, δε μπορούμε να διακρίνουμε τον σχηματισμό χιμαιρικών καταστάσεων.

Στο Σχήμα 5.15 βλέπουμε πώς μεταβάλλεται ο αριθμός των συγχρονισμένων (και ασυγχρόνιστων) περιοχών της μεταβλητής x , με την αύξηση της παραμέτρου διακλάδωσης p_1 για διάφορες δεδομένες τιμές του εύρους σύζευξης R . Παρατηρούμε ότι όσο το p_1 απομακρύνεται από την τιμή διακλάδωσης, ο αριθμός των συγχρονισμένων (και ασυγχρόνιστων) περιοχών εμφανίζει τάση μείωσης.



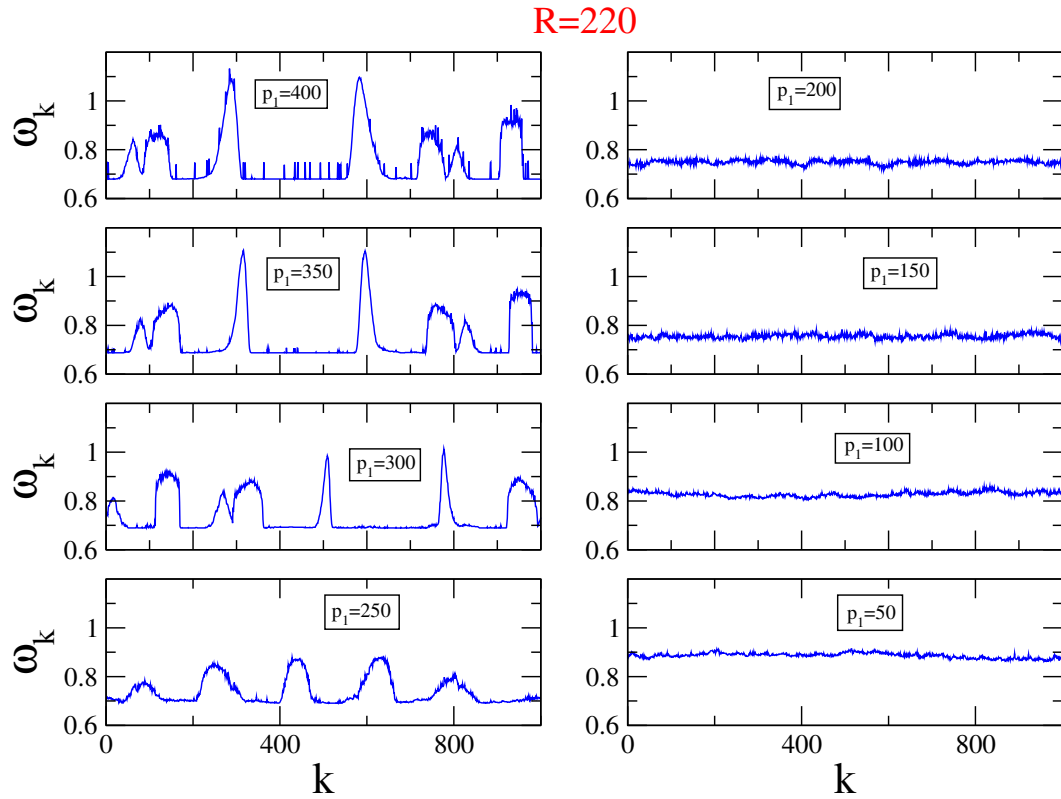
Σχήμα 5.9: Στιγμιότυπα των συγκεντρώσεων x_k των ταλαντωτών για διάφορες τιμές της παραμέτρου διακλάδωσης p_1 . Η τιμή του p_1 μειώνεται κατά 50 κάθε φορά. Οι υπόλοιπες παράμετροι του συστήματος είναι $R = 220$, $N = 1000$, $\sigma = 0.015$, $p_2 = 0.5$, $p_3 = 0.8$, χρόνος ολοκλήρωσης $t = 10000$ ($n = 100$).

5.7 Συμπεράσματα

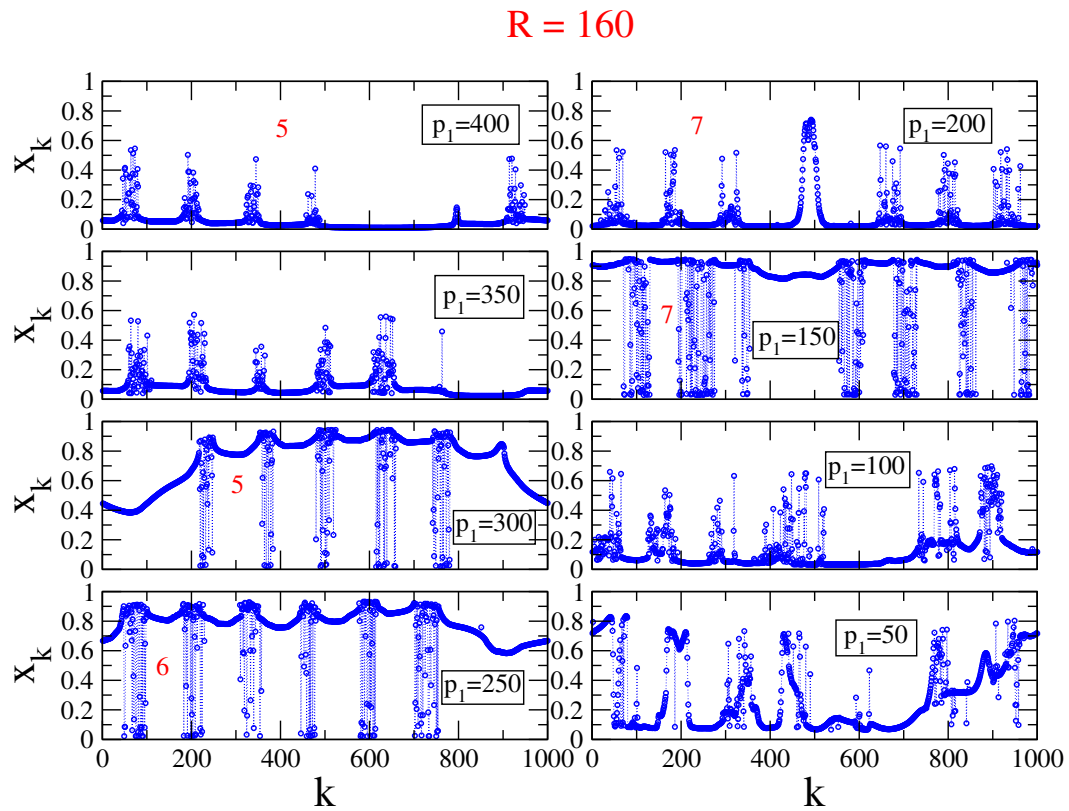
Το σημαντικό πόρισμα αυτού του κεφαλαίου είναι ότι όχι μόνο είναι εφικτή η εύρεση καταστάσεων χίμαιρας στο μοντέλο LLC, αλλά η πολλαπλότητα των συγχρονισμένων και ασυγχρόνιστων περιοχών μεταβάλλεται και εξαρτάται τόσο από το εύρος σύζευξης των ταλαντωτών όσο και από την παράμετρο διακλάδωσης του LLC.

Με σταθερές τις υπόλοιπες παραμέτρους του συστήματος και σταθερή την παράμετρο διακλάδωσης, αυξανόμενου του εύρους της σύζευξης, μειώνεται ο αριθμός των συγχρονισμένων (και ασυγχρόνιστων) περιοχών της χίμαιρικής κατάστασης, όπως έχει παρατηρηθεί και σε άλλα συστήματα συζευγμένων ταλαντωτών.

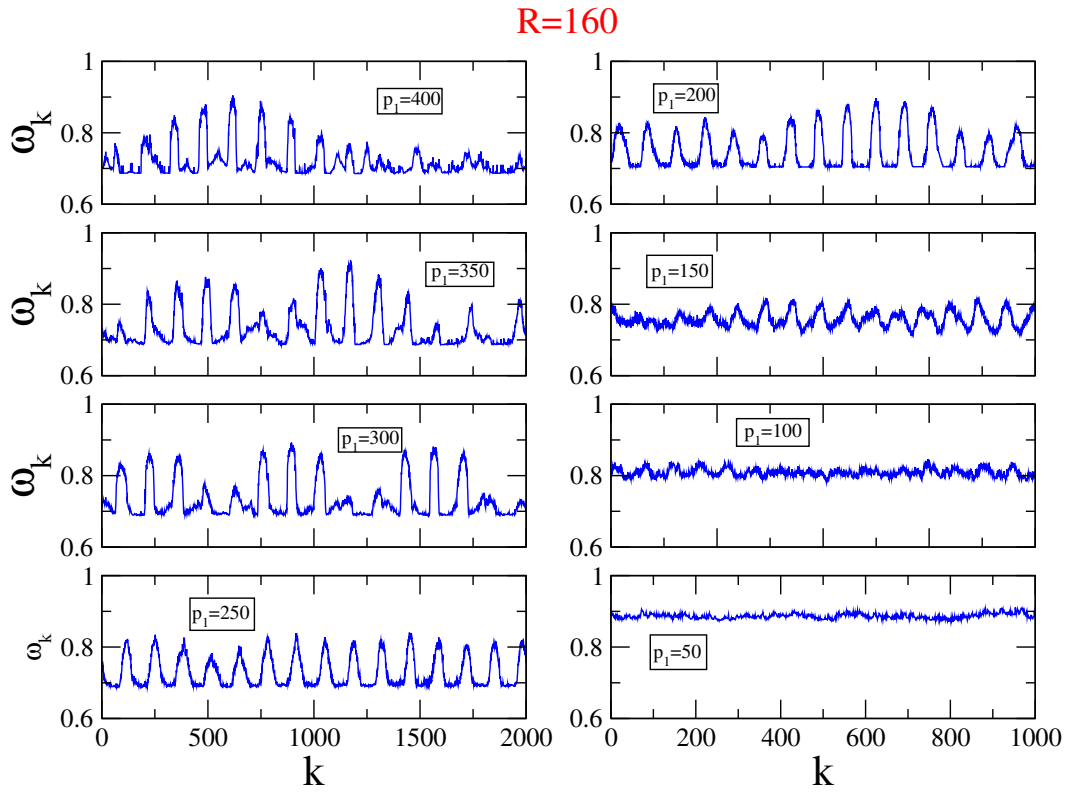
Αντίστοιχα, με σταθερές τις υπόλοιπες παραμέτρους του συστήματος και σταθερό το εύρος σύζευξης των ταλαντωτών, αυξάνεται ο αριθμός των ασυγχρόνιστων (και συγχρονισμένων) περιοχών της χίμαιρικής κατάστασης, καθώς η παράμετρος διακλάδωσης πλησιάζει προς το κρίσιμο σημείο.



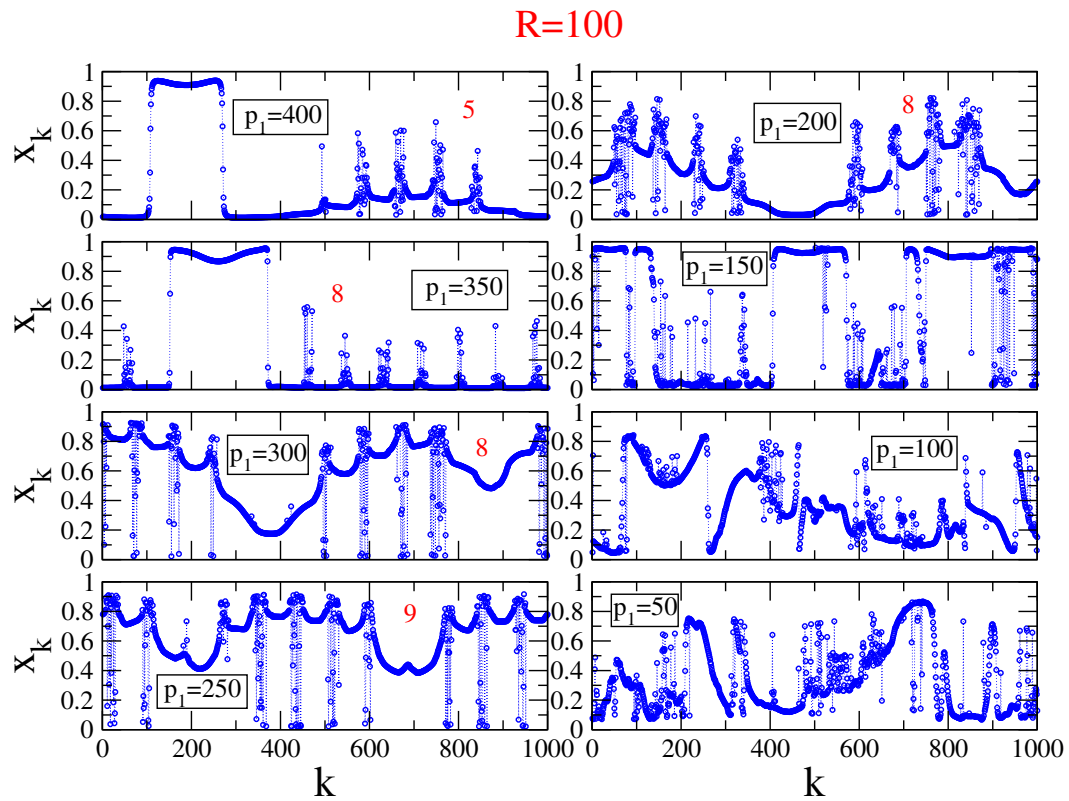
Σχήμα 5.10: Μέση φασική ταχύτητα ω_k των ταλαντωτών για διάφορες τιμές της παραμέτρου διακλάδωσης p_1 . Η τιμή του p_1 μειώνεται κατά 50 κάθε φορά. Οι υπόλοιπες παράμετροι του συστήματος είναι $R = 220$, $N = 1000$, $\sigma = 0.015$, $p_2 = 0.5$, $p_3 = 0.8$, χρόνος ολοκλήρωσης $t = 10000$ ($n = 100$).



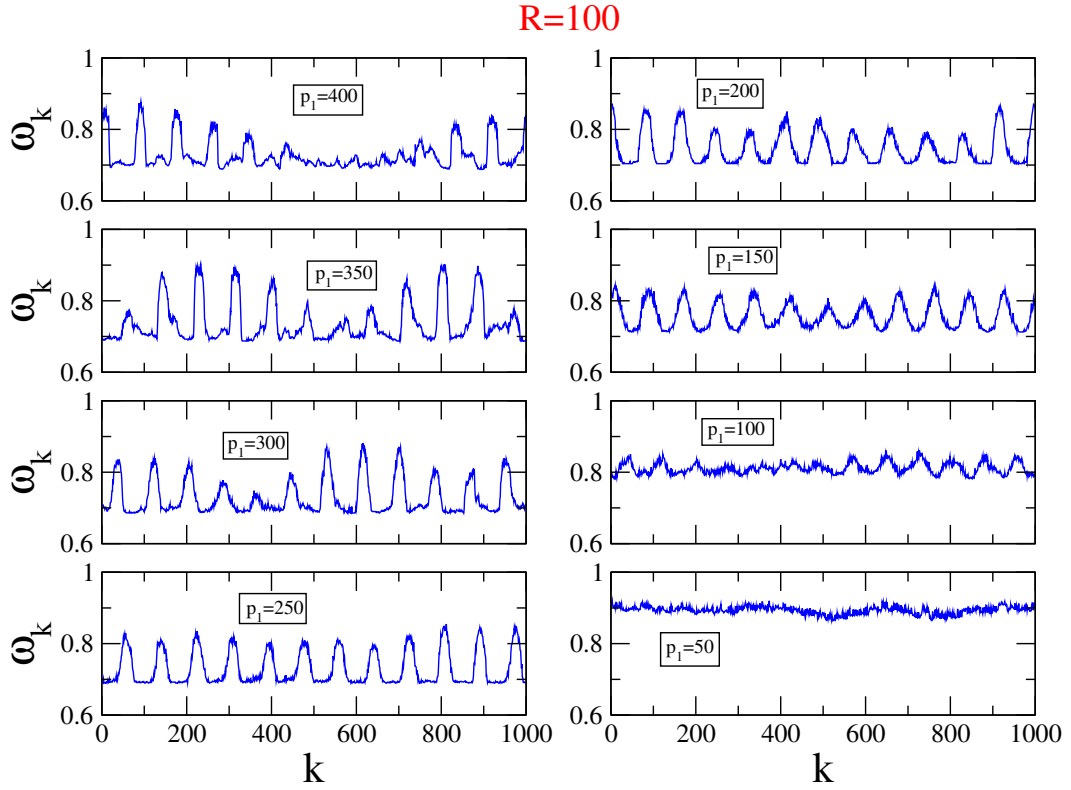
Σχήμα 5.11: Στιγμιότυπα των συγκεντρώσεων x_k των ταλαντωτών για διάφορες τιμές της παραμέτρου διακλάδωσης p_1 . Η τιμή του p_1 μειώνεται κατά 50 κάθε φορά. Οι υπόλοιπες παράμετροι του συστήματος είναι $R = 160$, $N = 1000$, $\sigma = 0.015$, $p_2 = 0.5$, $p_3 = 0.8$, χρόνος ολοκλήρωσης $t = 10000$ ($n = 100$).



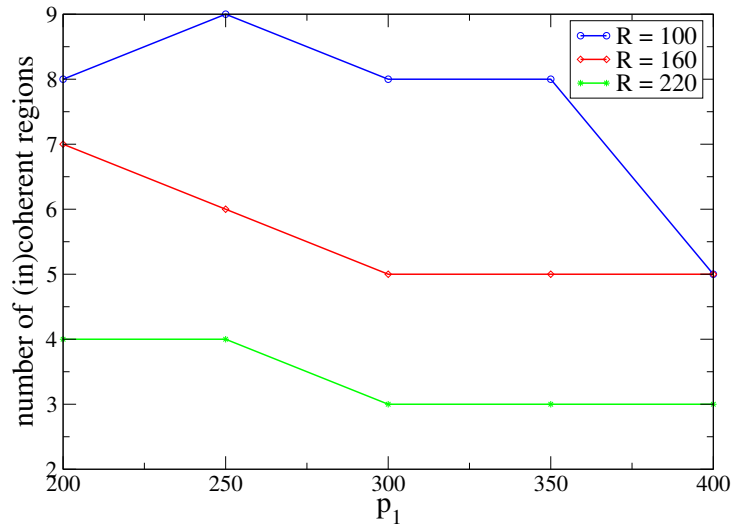
Σχήμα 5.12: Μέση φασική ταχύτητα ω_k των ταλαντωτών για διάφορες τιμές της παραμέτρου διακλάδωσης p_1 . Η τιμή του p_1 μειώνεται κατά 50 κάθε φορά. Οι υπόλοιπες παράμετροι του συστήματος είναι $R = 160$, $N = 1000$, $\sigma = 0.015$, $p_2 = 0.5$, $p_3 = 0.8$, χρόνος ολοκλήρωσης $t = 10000$ ($n = 100$).



Σχήμα 5.13: Στιγμιότυπα των συγκεντρώσεων x_k των ταλαντωτών για διάφορες τιμές της παραμέτρου διακλάδωσης p_1 . Η τιμή του p_1 μειώνεται κατά 50 κάθε φορά. Οι υπόλοιπες παράμετροι του συστήματος είναι $R = 100$, $N = 1000$, $\sigma = 0.015$, $p_2 = 0.5$, $p_3 = 0.8$, χρόνος ολοκλήρωσης $t = 10000$ ($n = 100$).



Σχήμα 5.14: Μέση φασική ταχύτητα ω_k των ταλαντωτών για διάφορες τιμές της παραμέτρου διακλάδωσης p_1 . Η τιμή του p_1 μειώνεται κατά 50 κάθε φορά. Οι υπόλοιπες παράμετροι του συστήματος είναι $R = 100$, $N = 1000$, $\sigma = 0.015$, $p_2 = 0.5$, $p_3 = 0.8$, χρόνος ολοκλήρωσης $t = 10000$ ($n = 100$).



Σχήμα 5.15: Εξάρτηση του αριθμού των συγχρονισμένων (και ασυγχρονιστων) περιοχών της μεταβλητής x από την παράμετρο διακλάδωσης p_1 , για τρεις διαφορετικές τιμές του εύρους σύζευξης $R = 100$ (μπλε γραμμή), $R = 160$ (κόκκινη γραμμή) και $R = 220$ (πράσινη γραμμή). Οι υπόλοιπες παράμετροι του συστήματος είναι $N = 1000$, $\sigma = 0.015$, $p_2 = 0.5$, $p_3 = 0.8$, χρόνος ολοκλήρωσης $t = 10000$ ($n = 100$).

Κεφάλαιο 6

Συμπεράσματα-Ιδέες για Μελλοντική Μελέτη

6.1 Συμπεράσματα

Το μοντέλο του Πλεγματοειδούς Οριακού Κύκλου (ΠΟΚ) ή αλλιώς Lattice Limit Cycle (LLC) αποτελεί ένα τυπικό μοντέλο αλληλεπίδρασης ειδών με εφαρμογές στη Χημεία, την Επιδημιολογία, την Οικολογία, ακόμα και σε κοινωνικά συστήματα. Είναι ένα μοντέλο τέταρτης τάξης μη γραμμικότητας που επιτρέπει την προσομοίωσή του σε πλέγμα με κελία μονής κατάληψης. Στο Μέσο Πεδίο μετά από μία διακλάδωση Hopf εμφανίζεται οριακός κύκλος, που αντιστοιχεί σε ταλαντώσεις σταθερού πλάτους των συγκεντρώσεων των διάφορων ειδών και σε συγχρονισμό της συμπεριφοράς των συγκεντρώσεων αυτών. Όταν προσομοιώνουμε το σύστημα LLC πάνω στο πλέγμα, χρησιμοποιώντας τη μέθοδο Kinetic Monte Carlo οι ταλαντώσεις παύουν να έχουν σταθερό πλάτος και μετατρέπονται σε διαλειπτικές (με πλάτος εξαρτώμενο από το μέγεθος του συστήματος), ενώ το κέντρο του οριακού κύκλου μετατοπίζεται. Η αιτία αλλαγής της δυναμικής συμπεριφοράς είναι η χαμηλή διάσταση του πλέγματος ως χωρικού υποβάθρου, το οποίο εισάγει επιπλέον συνθήκες στη δυναμική, και η στοχαστικότητα της προσομοιωτικής μεθόδου.

Στην παρούσα διατριβή έχουμε τρεις στόχους. Αρχικός μας στόχος είναι να επιτύχουμε μία καλή προσέγγιση της συμπεριφοράς των συγκεντρώσεων στο πλεγματοειδές μοντέλο LLC χρησιμοποιώντας μία τροποποιημένη μορφή των εξισώσεων του Μέσου Πεδίου. Συγκεκριμένα, η μέθοδος που προτείνουμε είναι η χρήση στις εξισώσεις

του Μέσου Πεδίου, "ενεργών" ρυθμών αντίδρασης, υπολογισμένων κατά τη διάρκεια της προσομοίωσης. Στις περιπτώσεις που θεωρούμε α) πραγματοποιούνται αντιδράσεις μόνο ανάμεσα στους πλησιέστερους γείτονες (τοπικές αλληλεπιδράσεις), β) πραγματοποιούνται αντιδράσεις τόσο ανάμεσα στους πλησιέστερους γείτονες όσο και ανάμεσα σε μακρινούς γείτονες (αντίδραση μεγάλης απόστασης), γ) πραγματοποιούνται αντιδράσεις ανάμεσα στους πλησιέστερους γείτονες και διάχυση των αντιδρώντων σε μακρινά σημεία (διάχυση μεγάλης απόστασης).

Στην περίπτωση που επιτρέπουμε στο σύστημα να πραγματοποιεί μόνο τοπικές αλληλεπιδράσεις, αποδεικνύεται πως ο υπολογισμός *a posteriori* "ενεργών" ρυθμών αντίδρασης και η εισαγωγή τους στις εξισώσεις του Μέσου Πεδίου οδηγεί σε καλή προσέγγιση των μέσων ιδιοτήτων της κατάστασης ισορροπίας του συστήματος. Επιπρόσθετα, στην περίπτωση που επιτρέπουμε στο σύστημα να αλληλεπιδρά όχι μόνο τοπικά αλλά και σε μεγαλύτερες κλίμακες μήκους, μέσω του μηχανισμού αντίδρασης μεγάλης απόστασης, η "ενεργός" προσέγγιση του Μέσου Πεδίου συνεχίζει να περιγράφει καλά τις μέσες ιδιότητες της κατάστασης ισορροπίας του συστήματος. Διαφορετικό είναι το αποτέλεσμα όταν σε συνδυασμό με τις τοπικές αλληλεπιδράσεις, επιτρέπουμε στο σύστημα και τη διάχυση μεγάλης απόστασης. Τότε η "ενεργός" προσέγγιση του Μέσου Πεδίου δεν ισχύει. Η διάχυση είναι μία καινούργια και διαφορετική διαδικασία, η οποία δε λαμβάνεται υπ'όψη στις κλασσικές εξισώσεις του Μέσου Πεδίου, που περιέχουν μόνο όρους αντίδρασης. Έτσι η μέθοδος των "ενεργών" ρυθμών αντίδρασης αποτυγχάνει να περιγράψει το σύνθετο σύστημα. Για την επίτευξη του στόχου αυτού χρειάζεται να κατασκευαστεί ένα άλλο, επεκταμένο-διευρημένο μοντέλο Μέσου Πεδίου που να περιέχει και όρους διάχυσης μεγάλης απόστασης.

Δεύτερος στόχος μας είναι η μελέτη του Πλεγματικού Οριακού Κύκλου με τη χρήση των δικτύων. Για να απλοποιήσουμε τη διαδικασία και να αποφύγουμε την εισαγωγή μεγάλου αριθμού παραμέτρων θεωρήσαμε το κλασσικό μοντέλο LLC, χωρίς τις επιπρόσθετες διαδικασίες αντίδρασης και διάχυσης μεγάλης απόστασης. Ο χώρος φάσεων του συστήματος αντίδρασης, ο οποίος αποτελείται από τις μερικές συγκεντρώσεις των ειδών στο πλέγμα, χωρίστηκε σε έναν αριθμό τμημάτων τα οποία λειτουργούν ως κόμβοι του αφηρημένου δικτύου. Όπως περιγράφεται στις ενότητες 1.7.3, 1.7.4 και 4.3, οι τροχιές οι οποίες αντιπροσωπεύουν τη χρονική εξέλιξη των μερικών συγκεντρώσεων, οδηγούν το σύστημα από τον ένα κόμβο στον άλλο, καθορίζοντας έτσι τη συχνότητα μετάβασης ανάμεσα στους κόμβους και δημιουργώντας τον πίνακα μεταβάσεων. Χρησιμοποιώντας τον πίνακα αυτόν, υπολογίζουμε όλες τις ιδιότητες του δικτύου, όπως

είναι η κατανομή του βαθμού του δικτύου, ο συντελεστής συσσώματωσης και οι κρίσιμοι εκθέτες, και στη συνέχεια κατηγοριοποιούμε το δίκτυο ανάλογα με τις τιμές των ιδιοτήτων του.

Υπολογίζοντας τα χαρακτηριστικά του δικτύου που έχουμε κατασκευάσει, δείχνουμε υπολογιστικά ότι το αφηρημένο αυτό δίκτυο κόμβων είναι ελεύθερης κλίμακας και χαρακτηρίζεται από κατανομές νόμου δύναμης. Συγκεκριμένα η κατανομή του βαθμού του δικτύου είναι $P(d) \sim d^{-\gamma}$, όπου $\gamma \simeq 1$, και ο μέσος συντελεστής συσσώματωσης μεταβάλλεται με το μέγεθος του δικτύου ως $c(N) \sim N^{-\nu}$, $\nu \simeq 1.46$. Η αιτία πίσω από αυτή τη συμπεροφορά βρίσκεται στην φύση των αντιδράσεων που αποτελούν το LLC, οι οποίες σχηματίζουν μορφοκλασματικές χωροχρονικές δομές στο πλέγμα. Καθώς οι αντιδράσεις πραγματοποιούνται μεταξύ κοντινών γειτόνων, δημιουργούνται μορφοκλασματικές δομές αυθόρμητα και αυτό αντανakλάται στο χαρακτήρα ελεύθερης κλίμακας του αντίστοιχου αφηρημένου δικτύου.

Ως τρίτο στόχο της μελέτης μας θέσαμε τη μελέτη του φαινομένου των χιμαιρικών καταστάσεων στο σύστημα LLC. Προς αυτή την κατεύθυνση, θεωρήσαμε έναν άλλο τρόπο σύζευξης, σε μορφή δικτύου. Τοποθετήσαμε πολλούς LLC ταλαντωτές σε τοπολογία δακτυλίου και εφαρμόσαμε μη τοπική σύζευξη μεταξύ τους. Ο κάθε ταλαντωτής λειτουργεί σύμφωνα με την προσέγγιση Μέσου Πεδίου, ενώ επικοινωνεί με R ταλαντωτές από τα δεξιά και R ταλαντωτές από τα αριστερά του. Θελήσαμε λοιπόν να μελετήσουμε τον συγχρονισμό μεταξύ των ταλαντωτών και συγκεκριμένα τη διερεύνηση ύπαρξης χιμαιρικών καταστάσεων, μίας ιδιότυπης μορφής συγχρονισμού, στην οποία συνυπάρχουν ταυτόχρονα συγχρονισμένες και ασυγχρόνιστες μεταξύ τους ομάδες ταλαντωτών.

Επαληθεύσαμε ότι στο μοντέλο Πλεγματικού Οριακού Κύκλου, υπάρχουν χιμαιρικές καταστάσεις, για συγκεκριμένο είδος αρχικών συνθηκών και τιμών των παραμέτρων. Ως μέτρο επαλήθευσης της ύπαρξης χιμαιρικών καταστάσεων υπολογίσαμε τη μέση φασική ταχύτητα και σχεδιάσαμε τη μορφή της, λαμβάνοντας τυπικά παραδείγματα στιγμιότυπων αυτού του μεγέθους. Στη συνέχεια μελετήσαμε την εξάρτηση των χιμαιρικών καταστάσεων και της πολλαπλότητας των συγχρονισμένων και ασυγχρόνιστων περιοχών αυτών, από τις δύο βασικές παραμέτρους του συστήματος, την παράμετρο διακλάδωσης p_1 και το εύρος σύζευξης των ταλαντωτών R .

Δείξαμε ότι καθώς η παράμετρος διακλάδωσης πλησιάζει στο σημείο διακλάδωσης, ο αριθμός των συγχρονισμένων (και ασυγχρόνιστων) περιοχών αυξάνεται. Αντίστοιχα, όταν αυξάνουμε το εύρος σύζευξης R , τότε ο αριθμός συγχρονισμένων (και

ασυγχρόνιστων) περιοχών μειώνεται. Η συμπεριφορά αυτή είναι ένα κλασσικό φαινόμενο που παρατηρείται σε όλα τα συστήματα που εμφανίζουν χμιαϊκές καταστάσεις. Η αύξηση του αριθμού των συγχρονισμένων και ασυγχρόνιστων περιοχών καθώς η παράμετρος p_1 πλησιάζει προς το σημείο διακλάδωσης συμβαίνει διότι καθώς η παράμετρος p_1 οδεύει προς τη διακλάδωση, το πλάτος των ταλαντώσεων μειώνεται για όλους τους ταλαντωτές. Στο κρίσιμο σημείο θα πρέπει όλοι οι ταλαντωτές να ισορροπήσουν στο ίδιο σημείο. Το σενάριο μετάβασης σε αυτό το κρίσιμο σημείο είναι να "σπάσουν" περαιτέρω οι ασυγχρόνιστες περιοχές δημιουργώντας συγχρονισμένους θύλακες ανάμεσά τους ώστε όταν $p_1 \rightarrow p_{1c}$ όλος ο δαχτύλιος να πάρει την τιμή ισορροπίας.

6.2 Ανοιχτά Προβλήματα

Στο δεύτερο κεφάλαιο της διατριβής αυτής εξετάσαμε τις μέσες ιδιότητες της κατάστασης ισορροπίας και όχι τη δυναμική γύρω από αυτήν. Στο μέλλον σχεδιάζεται η μελέτη της επιρροής των μηχανισμών αντίδρασης και διάχυσης μεγάλης απόστασης στη δυναμική του οριακού κύκλου, στη θέση του σημείου διακλάδωσης, καθώς και στον συγχρονισμό ανάμεσα στις συγκεντρώσεις των ειδών στις διάφορες υποπεριοχές του πλέγματος.

Η τακτική που εφαρμόσαμε στο τέταρτο κεφάλαιο για την κατασκευή του αφηρημένου δικτύου από τον φασικό χώρο του συστήματος του LLC, μπορεί να εφαρμοσθεί γενικά σε συστήματα αντίδρασης ή σε συστήματα αντίδρασης-διάχυσης. Οι ιδιότητες του αντίστοιχου δικτύου θα αντικατοπτρίζουν τη χωρική κατανομή των αντιδρώντων και θα καθορίζουν, σε συνδυασμό με τη δυναμική του μοντέλου, τις ποσοτικές και ποιοτικές ιδιότητες του δικτύου. Το αφηρημένο αυτό δίκτυο κόμβων, έχει κατασκευαστεί διαμερίζοντας κατάλληλα σε τμήματα τον χώρο φάσεων του συστήματος και καταμετρώντας τον αριθμό των μεταβάσεων από μία κατάσταση-κόμβο του δικτύου-σε άλλη. Δηλαδή, το δίκτυο αποτυπώνει τη δυναμική του μοντέλου και όχι τις χωρικές αποστάσεις των διαδρομών. Για το λόγο αυτό θα ήταν ενδιαφέρον να δοκιμάσουμε την εφαρμογή αυτής της διαδικασίας και σε άλλα συστήματα, όπως στις εργασίες [114, 115, 116] στις οποίες μελετάται η ανάλυση δικτύων προς ανάλυση διαδικασιών όπως η κλασματική κίνηση Brown, με διαφορετική δυναμική και να συγκρίνουμε τότε τα προκύπτοντα δίκτυα και τις ιδιότητές τους.

Είναι ενδιαφέρον ότι η κατασκευή του αφηρημένου δικτύου βασίστηκε σε μία διακριτή χρονοσειρά (την οποία κατασκευάσαμε εμείς από το χώρο φάσεων) και η οποία

αποδίδει τη δυναμική του συστήματος, θεωρήθηκε δηλαδή ως η τροχιά του συστήματος. Αυτό μας επιτρέπει να σκεφτούμε ότι αν μας δοθεί μία χρονοσειρά f_i , $i = 1, \dots, T$, τότε η f μπορεί να θεωρηθεί ως η τροχιά ενός άγνωστου δυναμικού συστήματος. Εμείς κατασκευάσαμε το σταθμισμένο δίκτυο με βάση τις μεταβάσεις μεταξύ των κελίων, δηλαδή ο πίνακας μεταβάσεων στηρίζεται στις διαδρομές της τροχιάς του συστήματος. Έτσι, κάθε χρονοσειρά που έχει επιτύχει στασιμότητα, μπορεί να περιγραφεί από ένα αφηρημένο δίκτυο του φασικού χώρου και τότε οι χαρακτηριστικοί εκθέτες του δικτύου θα αντικατοπτρίζουν τις συσχετίσεις της χρονοσειράς. Με αυτόν τον τρόπο θα ήταν ενδιαφέρον να μελετηθούν τα χαρακτηριστικά δικτύου για χρονοσειρές που πηγάζουν από δυναμικά συστήματα όπως είναι οι χαοτικές ροές και οι διακριτές απεικονίσεις, καθώς και σε χρονοσειρές που προκύπτουν από μετρήσεις φυσικών μεγεθών.

Είναι επίσης δυνατόν να ακολουθηθεί η ίδια διαδικασία της κατασκευής του αφηρημένου δικτύου για αντιδράσεις σε διαφορετικές διατάξεις υποβάθρου, σε πλέγματα με διαφορετικό αριθμό γειτόνων, όπως είναι τα εξαγωνικά ή τριγωνικά πλέγματα, ή ακόμα για αντιδράσεις που περιλαμβάνουν ανακατασκευή επιφανειών (surface restructuring) και μεταπτώσεις-μεταβάσεις μεταξύ διαφορετικών πλεγματοτικών σχηματισμών (configurations) [173, 174, 175]. Θα μπορούσε κανείς να χρησιμοποιήσει και διατάξεις υποβάθρου μεγαλύτερης διάστασης (για παράδειγμα τρισδιάστατες) ή και διατάξεις μορφοκλασματικής δομής, για παράδειγμα με μορφοκλασματική διάσταση D_f μεταξύ $2 \leq D_f \leq 3$. Σε κάθε περίπτωση, όσο μεγαλύτερος είναι ο αριθμός των κοντινότερων γειτόνων, τόσο καλύτερη προσέγγιση στη συμπεριφορά του Μέσου Πεδίου επιτυγχάνεται. Αυτό σημαίνει πως όταν ο αριθμός των κοντινότερων γειτόνων γίνει αρκετά μεγάλος, τότε οι επιδράσεις του χωρικού υποβάθρου θα είναι αμελητέες και έτσι η δυναμική του δικτύου θα ακολουθεί τη συμπεριφορά που αντιστοιχεί στον οριακό κύκλο, όπως περιγράφεται και στην τρίτη περίπτωση της ενότητας 1.7.6. Η μετάβαση από τα χαρακτηριστικά του νόμου δύναμης του υπό μελέτη δικτύου, που οφείλονται στους χωρικούς περιορισμούς και στο πεπερασμένο εύρος αλληλεπίδρασης, στα μικρού εύρους χαρακτηριστικά που αντιστοιχούν στον οριακό κύκλο, απαιτεί περαιτέρω ανάλυση.

Όσον αφορά τη μελέτη των φαινομένων χίμαιρας, σχεδιάζουμε τη μελέτη ενός διαφορετικού σχήματος σύζευξης, εισάγοντας ασυμμετρία και κενά στη συνδεσιμότητα των ταλαντωτών με στόχο την παρατήρηση πιθανών μεταβολών στη συμπεριφορά των χιμαιρικών καταστάσεων. Μία ιδέα είναι η χρήση μίας τοπολογίας σύνδεσης των ταλαντωτών, πάντα σε μονοδιαστάστο δακτύλιο, με ιδιότητες μορφοκλασματικής δομής. Τέλος θα είναι χρήσιμο να επαναληφθεί η μελέτη που έχουμε επιχειρήσει σε αυτή τη

διατριβή για ένα δίκτυο μεγαλύτερης διάστασης. Ως παράδειγμα μπορούμε να θεωρήσουμε, όπως άλλωστε έχουμε δει και σε πολλές από τις βιβλιογραφικές μας αναφορές ([148, 149, 150, 146]), ένα σύστημα αποτελούμενο από δύο τοπολογίες δακτυλίων. Ο κάθε δακτύλιος αποτελείται από N κόμβους συζευγμένους μεταξύ τους, ενώ επιπρόσθετα οι δύο δακτύλιοι επικοινωνούν μεταξύ τους με μία διαφορετική μορφή σύζευξης. Τέτοια δίκτυα είναι γνωστά στη βιβλιογραφία με τον όρο *multiplex* και μπορεί να οδηγήσουν σε διαφοροποίηση των χαρακτηριστικών των χημικών καταστάσεων, όπως για παράδειγμα στην περίπτωση ο ένας δακτύλιος να αποτελείται από συγχρονισμένους ταλαντωτές ενώ ο άλλος από ασυγχρονιστους. Κάτι τέτοιο παρουσιάζει εξαιρετικό ενδιαφέρον καθώς πρόσφατα πειράματα [148] δείχνουν προς αυτήν την κατεύθυνση.

Παράρτημα Α - Υπολογισμός των Σημείων Ισορροπίας του Μοντέλου LLC

Για να υπολογίσουμε τα σημεία ισορροπίας στο μοντέλο LLC χρειάζεται να επιλύσουμε το σύστημα:

$$\begin{cases} \dot{x}(t) = F(x, y) = -2p_1x^2y^2 + p_2x(1 - x - y) = 0 \\ \dot{y}(t) = G(x, y) = p_1x^2y^2 - p_3y(1 - x - y) = 0 \end{cases}$$

$$\Leftrightarrow \begin{cases} p_2x(1 - x - y) - 2p_3y(1 - x - y) = 0 \\ p_1x^2y^2 - p_3y(1 - x - y) = 0 \end{cases}$$

Ισοδύναμα:

$$\begin{cases} x = \frac{2p_3}{p_2}y & , & x = 1 - y \\ y = 0 & , & \frac{4p_1p_3^2}{p_2^2}y^3 + \frac{p_3(2p_3+p_2)}{p_2}y - p_3 = 0 \end{cases}$$

- 1^η περίπτωση: $x = 0$ και $y = 0$. Οπότε 1^η λύση: Σημείο $Q_1 = (0, 0)$.

- 2^η περίπτωση:

$$\begin{cases} x = 1 - y \\ p_1(1 - y)^2y^2 - p_3y[1 - (1 - y) - y] = 0 \end{cases} \Leftrightarrow$$

$$\begin{cases} x = 0 & , & x = 1 \\ y = 1 & , & y = 0 \end{cases}$$

Οπότε 2^η λύση: Σημείο $Q_2 = (0, 1)$ και 3^η λύση: Σημείο $Q_3 = (1, 0)$.

• 3^η περίπτωση:

$$\begin{cases} x = \frac{2p_3}{p_2}y \\ y^3 + \frac{2p_2p_3+p_2^2}{4p_1p_3}y - \frac{p_2^2}{4p_1p_3} = 0 \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} x = \sqrt[3]{\frac{p_3^2}{p_1p_2}(1+K)} + \sqrt[3]{\frac{p_3^2}{p_1p_2}(1-K)} \\ y = \sqrt[3]{\frac{p_2^2}{8p_1p_3}(1+K)} + \sqrt[3]{\frac{p_2^2}{8p_1p_3}(1-K)} \end{cases}$$

με $K = \sqrt{1 + (2p_3 + p_2)^3 / (27p_1p_2p_3)}$.

Οπότε: 4^η λύση: Σημείο

$$Q_4 = \left(\sqrt[3]{\frac{p_3^2}{p_1p_2} [1+K]} + \sqrt[3]{\frac{p_3^2}{p_1p_2} [1-K]}, \sqrt[3]{\frac{p_2^2}{8p_1p_3} [1+K]} + \sqrt[3]{\frac{p_2^2}{8p_1p_3} [1-K]} \right).$$

Παράρτημα Β - Ανάλυση Ευστάθειας των Λύσεων του Συστήματος LLC

Υπολογισμός των ιδιοτιμών και ιδιοδιανυσμάτων του Ιακωβιανού Πίνακα του συστήματος:

Για την καλύτερη κατανόηση της ευστάθειας του συστήματος, επιλέγουμε να αναφερθούμε στο Σχήμα 2.1 της ενότητας 2.3 αλλά και στο αντίστοιχο σχήμα της εργασίας [33], το οποίο παραθέτουμε παρακάτω (Σχήμα Β.1). Σημειώνουμε ότι τα σημεία του σχήματος P_1, P_2, P_3, P_4 αντιστοιχούν στα δικά μας Q_1, Q_2, Q_3 και Q_4 αντίστοιχα.

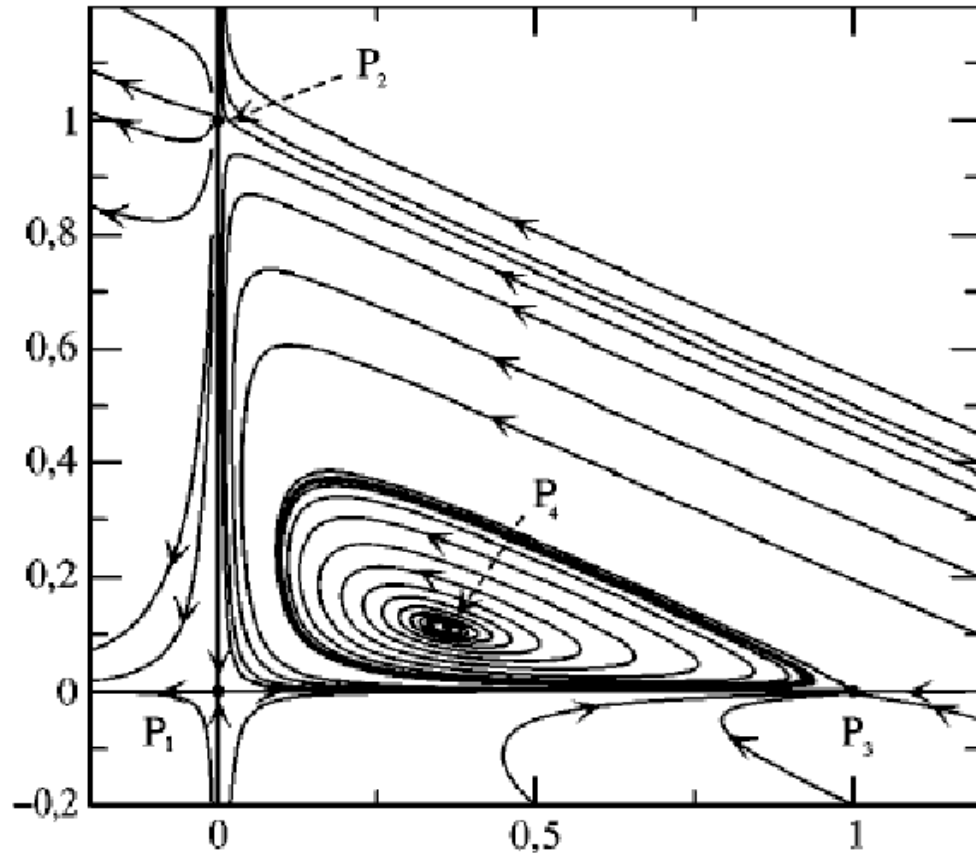
Για ένα σημείο-λύση (x^*, y^*) ενός συστήματος συνήθων διαφορικών εξισώσεων, ο Ιακωβιανός πίνακας ισούται με:

$$J = \begin{bmatrix} \left. \frac{\partial F}{\partial x} \right|_{(x^*, y^*)} & \left. \frac{\partial F}{\partial y} \right|_{(x^*, y^*)} \\ \left. \frac{\partial G}{\partial x} \right|_{(x^*, y^*)} & \left. \frac{\partial G}{\partial y} \right|_{(x^*, y^*)} \end{bmatrix},$$

όπου $\dot{x}(t) = F(x, y) = -2p_1x^2y^2 + p_2x(1 - x - y)$ και
 $\dot{y}(t) = G(x, y) = p_1x^2y^2 - p_3y(1 - x - y)$.

Τότε, για το LLC, η μορφή του Ιακωβιανού πίνακα είναι η εξής:

$$J = \begin{bmatrix} -4p_1xy^2 + p_2(1 - 2x - y) & -4p_1x^2y - p_2x \\ 2p_1xy^2 + p_3y & 2p_1x^2y - p_3(1 - x - y) \end{bmatrix}.$$



Σχήμα Β.1: Ο φασικός χώρος του LLC. Ο οριζόντιος άξονας αντιστοιχεί στη συγκέντρωση x και ο κατακόρυφος άξονας αντιστοιχεί στη συγκέντρωση y .

- 1^η λύση: Σημείο $Q_1 = (0, 0)$

$$J = \begin{bmatrix} p_2 & 0 \\ 0 & -p_3 \end{bmatrix}$$

Η συνθήκη $|J - \lambda I| = 0$ ισοδυναμεί με

$$\begin{vmatrix} p_2 - \lambda & 0 \\ 0 & -p_3 - \lambda \end{vmatrix} = 0.$$

Έτσι προκύπτει ότι $\lambda = p_2 > 0$ ή $\lambda = -p_3 < 0$.

Υπολογίζουμε τώρα τα ιδιοδιανύσματα. Ισχύει ότι $(J - \lambda I)\vec{v} = 0$. Ισοδύναμα:

$$\begin{bmatrix} p_2 - \lambda & 0 \\ 0 & -p_3 - \lambda \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \end{bmatrix} = 0.$$

Επομένως τα δύο ιδιοδιανύσματα είναι τα $\vec{v} = (1; 0)$ και $\vec{v} = (0; 1)$.

Από τα παραπάνω προκύπτει ότι η 1^η λύση του συστήματος είναι σαγματικό σημείο. Υπάρχουν δύο πολλαπλότητες (manifolds), η μία ελκυστική πάνω στον άξονα y και η άλλη απωθητική πάνω στον άξονα x .

- 2^η λύση: Σημείο $Q_2 = (0, 1)$

$$J = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ p_3 & p_3 \end{bmatrix}$$

Η συνθήκη $|J - \lambda I| = 0$ ισοδυναμεί με

$$\begin{vmatrix} 0 - \lambda & 0 \\ p_3 & p_3 - \lambda \end{vmatrix} = 0$$

ή

$$-\lambda(p_3 - \lambda) = 0$$

Έτσι προκύπτει ότι $\lambda = 0$ ή $\lambda = p_3 > 0$.

Υπολογίζουμε τώρα τα ιδιοδιανύσματα. Ισχύει ότι $(J - \lambda I)\vec{v} = 0$. Ισοδύναμα:

$$\begin{bmatrix} -\lambda & 0 \\ p_3 & p_3 - \lambda \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \end{bmatrix} = 0.$$

Το ιδιοδιανύσματα που προκύπτουν είναι το $\vec{v} = (1; -1)$ (μη κανονικοποιημένο) και το $\vec{v} = (0; 1)$.

Το φασικό διάγραμμα κοντά στο σημείο $(0,1)$ δεν έχει σταθερή συμπεριφορά. Η

πολλαπλότητα (manifold) στον άξονα y είναι ασταθής και δεν υπάρχει κάποια σταθερή πολλαπλότητα. Με την παραμικρή μεταβολή που θα οδηγήσει σε απειροστή μετάθεση της τιμής της μηδενικής ιδιοτιμής είτε προς τα θετικά είτε προς τα αρνητικά του άξονα, θα έχει ως αποτέλεσμα να μετατατραπεί το P_2 είτε σε ασταθή κόμβο (αν η ιδιοτιμή γίνει θετική) ή σε σάγμα (αν η ιδιοτιμή γίνει αρνητική). Σε κάθε περίπτωση, όμως, η λύση είναι ασταθής και για το λόγο αυτό μη πραγματοποιήσιμη. Από τα παραπάνω προκύπτει ότι η 1^η λύση του συστήματος είναι σαγματικό σημείο. Υπάρχουν δύο πολλαπλότητες, η μία ελκυστική πάνω στον άξονα y και η άλλη απωθητική πάνω στον άξονα x .

- 3^η λύση: Σημείο $Q_3 = (1, 0)$

$$J = \begin{bmatrix} -p_2 & -p_2 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Η συνθήκη $|J - \lambda I| = 0$ ισοδυναμεί με

$$\begin{vmatrix} -p_2 - \lambda & -p_2 \\ 0 & -\lambda \end{vmatrix} = 0$$

ή

$$\lambda(\lambda + p_2) = 0$$

Έτσι προκύπτει ότι $\lambda = 0$ ή $\lambda = -p_2 < 0$.

Υπολογίζουμε τώρα τα ιδιοδιανύσματα. Ισχύει ότι $(J - \lambda I)\vec{v} = 0$. Ισοδύναμα:

$$\begin{bmatrix} -p_2 - \lambda & -p_2 \\ 0 & -\lambda \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \end{bmatrix} = 0.$$

Το ιδιοδιανύσματα που προκύπτουν είναι το $\vec{v} = (1; -1)$ (μη κανονικοποιημένο) και το $\vec{v} = (1; 0)$.

Το φασικό διάγραμμα κοντά στο σημείο $(1,0)$ δεν έχει σταθερή συμπεριφορά. Υπάρχει όμως σταθερή πολλαπλότητα αυτή τη φορά, στον άξονα x . Και πάλι με

την παραμικρή μεταβολή που θα οδηγήσει σε απειροστή μετάθεση της τιμής της μηδενικής ιδιοτιμής θα έχει ως αποτέλεσμα να μετατατραπεί το είδος του P_3 . Η μία περίπτωση είναι να μετατραπεί σε σάγμα (αν η ιδιοτιμή γίνει θετική) ή σε ευσταθή κόμβο (αν η ιδιοτιμή γίνει αρνητική). Το σενάριο αυτό μπορεί να πραγματοποιηθεί και αντιστοιχεί στην κατάληψη όλου του πλέγματος από σωματίδια τύπου X .

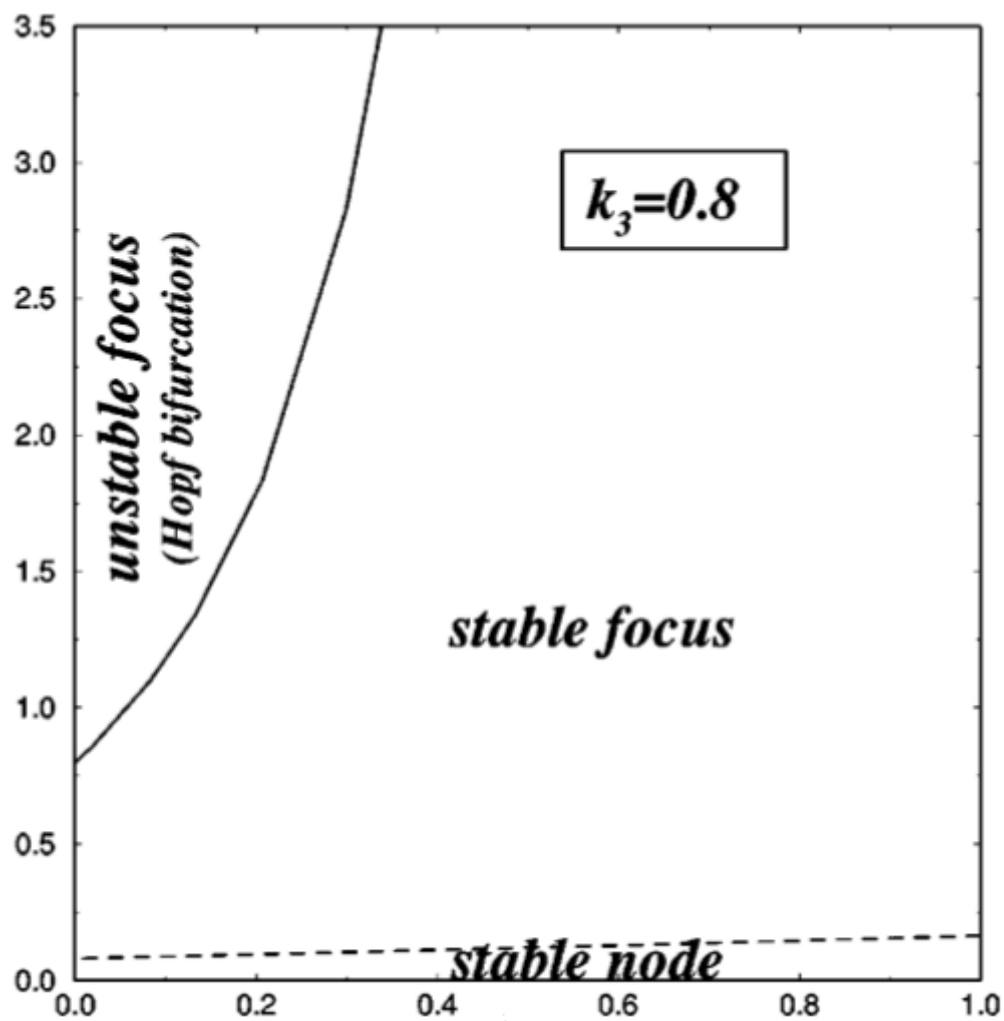
- 4^η λύση: Σημείο

$$Q_4 = \left(\sqrt[3]{\frac{p_3^2}{p_1 p_2} [1 + K]} + \sqrt[3]{\frac{p_3^2}{p_1 p_2} [1 - K]}, \right. \\ \left. \sqrt[3]{\frac{p_2^2}{8 p_1 p_3} [1 + K]} + \sqrt[3]{\frac{p_2^2}{8 p_1 p_3} [1 - K]} \right), \quad (1)$$

$$\text{με } K = \sqrt{1 + (2p_3 + p_2)^3 / (27p_1 p_2 p_3)}.$$

Λόγω της σύνθετης μορφής της 4^{ης} λύσης δεν αποδίδουμε εδώ τις πράξεις. Εφαρμόζουμε όμως την ίδια διαδικασία και τις συνθήκες $|J - \lambda I| = 0$, $(J - \lambda I)\vec{v} = 0$.

Η περίπτωση αυτή έχει μελετηθεί αναλυτικά στην [33] όπου έχει αναλυθεί η ευστάθεια της λύσης Q_4 . Συγκεκριμένα, ανάλογα με τις τιμές των παραμέτρων p_1 , p_2 , p_3 , το Q_4 μπορεί να είναι σταθερός κόμβος ή σταθερή εστία ή ασταθής εστία. Διατηρώντας σταθερές τις τιμές των p_2 , p_3 , και μεταβάλλοντας την παράμετρο p_1 την οποία και ονομάζουμε παράμετρο διακλάδωσης του συστήματος, η συμπεριφορά του Q_4 αλλάζει όπως φαίνεται στο Σχήμα Β.2, όπου η παράμετρος k_3 αντιστοιχεί στη δικιά μας p_3 (από την [33]). Όταν χάνεται η σταθερότητα του Q_4 τότε μέσω μίας διακλάδωσης Hopf, μεταβάλλεται από ευσταθή σε ασταθή εστία. Κοντά στην κρίσιμη τιμή εμφανίζεται ένας οριακός κύκλος ο οποίος αντιστοιχεί σε αρμονικές ταλαντώσεις πολύ μικρού πλάτους. Καθώς η τιμή της p_1 αυξάνεται, ο οριακός κύκλος μεγαλώνει και εμφανίζει σχεδόν τριγωνική μορφή - καθώς πλησιάζει το τρίγωνο που ορίζεται από τα σημεία $(0,0)$, $(0,1)$, $(1,0)$ - και οι ταλαντώσεις γίνονται μη αρμονικές με μεγάλο πλάτος.



Σχήμα Β.2: Η συμπεριφορά του P_4 ανάλογα με τις τιμές των παραμέτρων p_1 , p_2 και p_3 . Η παράμετρος k_3 αντιστοιχεί στη δικιά μας p_3 .

Παράρτημα Γ - Αλγόριθμοι

Παράθεση κάποιων τμημάτων από τους κώδικες που χρησιμοποιήθηκαν:

1. Τμήμα κώδικα για την αντίδραση μικρής απόστασης

```
ccc      pk1 είναι η πιθανότητα να πραγματοποιηθεί η αντίδραση τέταρτης τάξης.
ccc      pk2 είναι η πιθανότητα να πραγματοποιηθεί η αντίδραση γέννησης του X.
ccc      pk3 είναι η πιθανότητα να πραγματοποιηθεί η αντίδραση θανάτου του Y.
ccc      Επιλέγουμε τυχαία ένα κελίο του πλέγματος lat(ir,is), στη θέση (ir,is)
ccc      Οι τέσσερις κοντινοί γείτονες είναι τα κελία lat(irp,is), lat(irm,is),
ccc      lat(ir,isp) και lat(ir,ism).
ccc      Το κατειλημμένο κελίο αντιστοιχεί στη μονάδα ενώ το άδειο κελίο στο μηδέν.
ccc      Ελέγχουμε να δούμε αν μπορεί να γίνει η αντίδραση γέννησης του X.
ccc      Πρέπει στο επιλεγμένο κελίο να υπάρχει S (κενό κελίο) και να υπάρχει
ccc      η αντίστοιχη πιθανότητα.

          if (lat(ir,is).eq.0.and.re.lt.pk2) then !! S + X -> 2X

ccc      Ελέγχουμε τώρα τους τέσσερις πλησιέστερους γείτονες,
ccc      για να βρούμε ένα X.

          if (lat(irp,is).eq.1.or.lat(irm,is).eq.1
& .or.lat(ir,isp).eq.1.or.lat(ir,ism).eq.1)
& lat(ir,is)=1      !! Λαμβάνει χώρα η αντίδραση
              go to 999
          endif
```



```

ccc      Ελέγχουμε να δούμε αν μπορεί να γίνει η αντίδραση θανάτου του Y.
ccc      Πρέπει στο επιλεγμένο κελίο να υπάρχει Y και να υπάρχει
ccc      η αντίστοιχη πιθανότητα.

          if (lat(ir,is).eq.-1.and.re.lt.pk3) then !! Y + S -> 2S

ccc      Ελέγχουμε τώρα τους τέσσερεις πλησιέστερους γείτονες,
ccc      για να βρούμε ένα S

          if (lat(irp,is).eq.0.or.lat(irm,is).eq.0

& .or.lat(ir,isp).eq.0.or.lat(ir,ism).eq.0)
& lat(ir,is)=0      !! Λαμβάνει χώρα η αντίδραση.
          go to 999
          endif

```

2. Τμήμα κώδικα για την αντίδραση μεγάλης απόστασης

```

ccc       $l_{longre}$  είναι η απόσταση μέσα στην οποία επιτρέπουμε να
ccc      λάβει χώρα η αντίδραση μεγάλης απόστασης.
ccc      Οι γείτονες του lat(ir,is), που λαμβάνονται υπ'όψη τώρα, βρίσκονται μέσα
ccc      στο επιτρεπόμενο εύρος και είναι οι lat(ir1,is1), lat(ir2,is2), lat(ir3,is3).

400      if (lat(ir,is).eq.0.and.re.lt.pk2) go to 501
          if (lat(ir,is).eq.-1.and.re.lt.pk3) go to 511
          if (lat(ir,is).eq.1.and.re.lt.pk1) go to 521

          go to 999

501      rara1 = rand()
          ir1 = rara1 * ( $l_{longre}$ ) + 1.0

```

```
ccc      Θα ασχοληθούμε με το αν μπορεί να γίνει η αντίδραση γέννησης του X.
ccc      Χρειαζόμαστε ένα δεύτερο κελίο κάπου μέσα στο πλέγμα.
```

```
30      p1=rand()
        if (p1.lt.0.5)      ir1 = ir + ir1
        if (p1.ge.0.5)      ir1 = ir - ir1
        rere1 = rand()
        is1 = rere1 * (llongre) + 1.0
31      p2 = rand()
        if (p2.lt.0.5)      is1 = is + is1
        if (p2.ge.0.5)      is1 = is - is1
```

```
ccc      Ελέγχουμε να είμαστε μέσα στο πλέγμα.
```

```
        if (ir1.gt.L) ir1 = ir1 - L
        if (ir1.le.0) ir1 = L + ir1
        if (is1.gt.L) is1 = is1 - L
        if (is1.le.0) is1 = L + is1
        if (lat(ir1,is1).eq.1) then
            lat(ir,is)=1      !! Λαμβάνει χώρα η αντίδραση.
        go to 999
    endif
```

```
ccc      Πραγματοποιήθηκε η αντίδραση γέννησης του X,
ccc      οπότε δε γίνονται πλέον άλλες αντιδράσεις
ccc      σε αυτό το χρονικό βήμα.
```

```
        go to 999
511     rara1 = rand()
        ir1 = rara1 * (llongre) + 1.0
```

```

ccc      Θα ασχοληθούμε με το αν μπορεί
ccc      να γίνει η αντίδραση θανάτου του Y.
ccc      Χρειαζόμαστε ένα δεύτερο κελίο κάπου μέσα στο πλέγμα.

32      p11=rand()
        if (p11.lt.0.5)    ir1 = ir + ir1
        if (p11.ge.0.5)    ir1 = ir - ir1
        rere1 = rand()
        is1 = rere1 * (llongre) + 1.0

33      p12 = rand()
        if (p12.lt.0.5)    is1 = is + is1
        if (p12.ge.0.5)    is1 = is - is1

ccc      Ελέγχουμε να είμαστε μέσα στο πλέγμα.
        if (ir1.gt.L)      ir1 = ir1 - L
        if (ir1.le.0)      ir1 = L + ir1
        if (is1.gt.L)      is1 = is1 - L
        if (is1.le.0)      is1 = L + is1
        if (ir1.eq.ir.and.is1.eq.is) go to 511
        if (lat(ir1,is1).eq.0) then
            lat(ir,is)=0      !! Λαμβάνει χώρα η αντίδραση.
        go to 999
        endif

ccc      Πραγματοποιήθηκε η αντίδραση γέννησης του X,
ccc      οπότε δε γίνονται πλέον άλλες αντιδράσεις σε αυτό το χρονικό βήμα.

        go to 999

521     rara1 = rand()
        ir1 = rara1 * (llongre) + 1.0

```

```

ccc      Θα ασχοληθούμε με το αν μπορεί να γίνει η κύρια αντίδραση μεταξύ των X,
Y.
ccc      Χρειαζόμαστε άλλα τρία κελία κάπου μέσα στο πλέγμα.
ccc      Εδώ επιλέγουμε το πρώτο από τα άλλα τρία κελία.

34      p1=rand()
        if (p21.lt.0.5)    ir1 = ir + ir1
        if (p21.ge.0.5)    ir1 = ir - ir1
        rere1 = rand()
        is1 = rere1 * (llongre) + 1.0

35      p2 = rand()
        if (p22.lt.0.5)    is1 = is + is1
        if (p22.ge.0.5)    is1 = is - is1

ccc      Ελέγχουμε να είμαστε μέσα στο πλέγμα.
        if (ir1.gt.L)      ir1 = ir1 - L
        if (ir1.le.0)      ir1 = L + ir1
        if (is1.gt.L)      is1 = is1 - L
        if (is1.le.0)      is1 = L + is1
        if (ir1.eq.ir.and.is1.eq.is)    go to 521
        if (ir1.eq.ir.and.is1.eq.is)    go to 521
        go to 502

502      rara2 = rand()
        ir2 = rara2 * (llongre) + 1.0

ccc      Εδώ επιλέγουμε το δεύτερο από τα άλλα τρία κελία στο πλέγμα.

40      p3 = rand()
        if (p3.lt.0.5)    ir2 = ir + ir2
        if (p3.ge.0.5)    ir2 = ir - ir2
        rere2 = rand()
        is2 = rere2 * (llongre) + 1.0

41      p4 = rand()
        if (p4.lt.0.5)    is2 = is + is2
        if (p4.ge.0.5)    is2 = is - is2

```

```

ccc      Ελέγχουμε να είμαστε μέσα στο πλέγμα.
          if (ir2.gt.L)    ir2 = ir2 - L
          if (ir2.le.0)    ir2 = L + ir2
          if (is2.gt.L)    is2 = is2 - L
          if (is2.le.0)    is2 = L + is2
          if (ir2.eq.ir.and.is2.eq.is)    go to 502
          if (ir2.eq.ir1.and.is2.eq.is1)  go to 502
          go to 503
503      rara3 = rand()
          ir3 = rara3 * (llongre) + 1.0
ccc      Εδώ επιλέγουμε το τρίτο από τα άλλα τρία κελία στο πλέγμα.
50      p5 = rand()
          if (p5.lt.0.5) ir3 = ir + ir3
          if (p5.ge.0.5) ir3 = ir - ir3
          rere3 = rand()
          is3 = rere3 * (llongre) + 1.0
51      p6 = rand()
          if (p6.lt.0.5)    is3 = is + is3
          if (p6.ge.0.5)    is3 = is - is3
ccc      Ελέγχουμε να είμαστε μέσα στο πλέγμα.
          if (ir3.gt.L)    ir3 = ir3 - L
          if (ir3.le.0)    ir3 = L + ir3
          if (is3.gt.L)    is3 = is3 - L
          if (is3.le.0)    is3 = L + is3
          if (ir3.eq.ir.and.is3.eq.is)    go to 503
          if (ir3.eq.ir1.and.is3.eq.is1)  go to 503
          if (ir3.eq.ir2.and.is3.eq.is2)  go to 503

ccc      Ελέγχουμε τώρα ανάμεσα στα τρία επιπλέον επιλεγμένα κελία-γείτονες
ccc      μέσα στο πλέγμα, για να βρούμε τον απαραίτητο
ccc      συνδυασμό σωματιδίων (ακόμα ένα X και δύο Y).

```

```

        cb = 0.0
        if (lat(ir1,is1).eq.-1)    cb = cb + 1.0
        if (lat(ir2,is2).eq.-1)    cb = cb + 1.0
        if (lat(ir3,is3).eq.-1)    cb = cb + 1.0
        if (cb.ge.2.0)    then
ccc      Λαμβάνει χώρα η αντίδραση:
        if (lat(ir1,is1).eq.1)    then
            lat(ir,is) = 0
            lat(ir1,is1) = -1 ]
        go to 999
        endif
        if (lat(ir2,is2).eq.1)    then
            lat(ir,is) = 0
            lat(ir2,is2) = -1
        go to 999
        endif
        if (lat(ir3,is3).eq.1) 0.5cm then
            lat(ir,is) = 0
            lat(ir3,is3) = -1
        go to 999
        endif
    endif
    go to 999

```

3. Τμήμα κώδικα για τη διάχυση μεγάλης απόστασης

```

ccc      Η παράμετρος  $l_{diff}$  ορίζει το εύρος μέσα στο οποίο επιτρέπουμε
ccc      να πραγματοποιηθεί η διάχυση μεγάλης απόστασης.
400      ra1=rand()
           $ir1 = ra1 * dble(L) + 1.0$ 

```

```

    ra1=rand()
    is1 = ra1 * dble(L) + 1.0
    ra_d = rand()
    r_diff = ra_d * l_diff + 1.0
    ang0=rand()
    ang1 = ang0 * 360.0
    ang1 = ang1 * (pi/180.0)
    r1=ang1

ccc      Επιλέγουμε τυχαία ένα κελίο μέσα σε έναν κύκλο
ccc      ακτίνας  $r_{diff}$ 

    ir2 = r_diff * DCOS(r1)
    is2 = r_diff * DSIN(r1)
    ir2=ir1+ir2

ccc      Ελέγχουμε να είμαστε μέσα στο πλέγμα
    if (ir2.gt.L) ir2=ir2-L
    if (ir2.le.0) ir2=L + ir2
    is2=is1+is2

ccc      Ελέγχουμε να είμαστε μέσα στο πλέγμα
    if (is2.gt.L)    is2=is2-L
    if (is2.le.0)    is2=L + is2
    rad2=rand()
    if (rad2.le.pd2)    then

ccc      Με πιθανότητα pd2 λαμβάνει χώρα η ανταλλαγή
ccc      των περιεχομένων των δύο επιλεγμένων κελίων.

    l1=lat(ir1,is1)
    lat(ir1,is1)=lat(ir2,is2)
    lat(ir2,is2)=l1

```

```

ccc      Μετρητής του αριθμού των φορών που πραγματοποιείται διάχυση.
          pdcc = pdcc + 1
          endif
          go to 999

```

4. Διάγραμμα γενικού αλγορίθμου για την προσομείωση του LLC

```

ccc      Ανοίγει ο επαναληπτικός βρόχος για τον χρόνο.
ccc      Ανοίγει ο επαναληπτικός βρόχος για τους ταλαντωτές.
ccc      Λαμβάνουν χώρα οι αντιδράσεις.
ccc      Κλείνει ο επαναληπτικός βρόχος για τους ταλαντωτές.
ccc      Υπολογίζουμε για κάθε βήμα τις συγκεντρώσεις x, y, s.
ccc      Κλείνει ο επαναληπτικός βρόχος για τον χρόνο.
ccc      Υπολογίζουμε τον μέσο όρο της κάθε συγκέντρωσης
ccc      και την αντίστοιχη διασπορά.

```

5. Διάγραμμα αλγορίθμου για την προσομείωση του LLC, στην περίπτωση της Ενεργού Προσέγγισης Μέσου Πεδίου.

```

ccc      Ανοίγει ο επαναληπτικός βρόχος για τον χρόνο.
ccc      Ανοίγει ο επαναληπτικός βρόχος για τους ταλαντωτές.
ccc      Λαμβάνουν χώρα οι αντιδράσεις.
ccc      Κάθε φορά που λαμβάνει χώρα μία από τις τρεις αντιδράσεις,
ccc      αυξάνεται κατά μία μονάδα ο αντίστοιχος μετρητής p1cc, p2cc, p3cc.
ccc      Κλείνει ο επαναληπτικός βρόχος για τους ταλαντωτές.
ccc      Για κάθε βήμα διαιρούμε την τελική τιμή κάθε μετρητή
ccc      με το άθροισμα των τιμών όλων των μετρητών:
          p1cc = p1cc / (p1cc + p2cc + p3cc)
          p2cc = p2cc / (p1cc + p2cc + p3cc)
          p3cc = p3cc / (p1cc + p2cc + p3cc)
ccc      Αθροίζουμε σε κάθε βήμα την τιμή του κάθε μετρητή:

```


$p1count = p1count + p1cc$

$p2count = p2count + p2cc$

$p3count = p3count + p3cc$

ccc Υπολογίζουμε για κάθε βήμα τις συγκεντρώσεις x, y, s.

ccc Κλείνει ο επαναληπτικός βρόχος για τον χρόνο.

ccc Υπολογίζουμε τον μέσο όρο της κάθε συγκέντρωσης

ccc και την αντίστοιχη διασπορά.

ccc Υπολογίζουμε το μέσο όρο για την τιμή του κάθε μετρητή:

$p1count = p1count / dble(ITIME2)$

$p2count = p2count / dble(ITIME2)$

$p3count = p3count / dble(ITIME2)$

ccc Εισάγουμε τις τιμές των μετρητών,

ccc που είναι οι "ενεργοί" ρυθμοί των τριών αντιδράσεων,

ccc στις εξισώσεις του Μέσου Πεδίου και

ccc λαμβάνουμε τις "ενεργές" συγκεντρώσεις x, y, z.

6. Τμήμα κώδικα υπολογισμού του πίνακα συνδεσιμότητας του χώρου φάσεων του αφηρημένου δικτύου.

ccc Συμβολίζουμε τον πίνακα συνδεσιμότητας με net. ccc Έχουμε ορίσει τον πίνακα net στην αρχή του προγράμματος.

ccc Ξεκινάει ο επαναληπτικός βρόχος για τον χρόνο.

ccc Όπως τα έχουμε εξηγήσει στον πρώτο αλγόριθμο που αναλύσαμε.

ccc

ccc Ξεκινάει ο επαναληπτικός βρόχος για τα κελία του πλεγματος.

ccc

```

ccc      Κλείνει ο επαναληπτικός βρόχος για τα κελία του πλέγματος.
ccc      Στο σημείο αυτό έχουμε τη συγκέντρωση του x και τη συγκέντρωση του y.
ccc      Η συγκέντρωση του x σε κάθε χρονικό βήμα δίνεται από τη μεταβλητή xx1.

```

```

      maa1=xx1*100
      mxx1old=xx1old*100
      net(mxx1old,mxx1)=net(mxx1old,mxx1)+1
      xx1old=xx1

```

```

ccc      Κλείνει ο επαναληπτικός βρόχος για τον χρόνο.

```

```

      do i=1,100
      do j=1,100
      netall=netall+net(i,j)

```

```

ccc      Γράφουμε σε ένα αρχείο τα μη μηδενικά στοιχεία
ccc      του πίνακα συνδεσιμότητας.

```

```

      if (net(i,j).ne.0)    write(88,*) i,j,net(i,j)
      enddo
      enddo

```

7. Τμήμα κώδικα υπολογισμού της κατανομής του βαθμού του αφηρημένου δικτύου.

```

ccc      degree(i1) είναι ο βαθμός του κόμβου i1 του αφηρημένου δικτύου.
ccc      bins(i) είναι η συντεταγμένη αρχής του κελίου i του πίνακα συνδεσιμότητας.
ccc      mbins είναι ο συνολικός αριθμός των διαμερίσεων.
ccc      Διαβάζουμε από ένα αρχείο τις τιμές του βαθμού κάθε κελίου,
ccc      και έχουμε έτσι ένα διάνυσμα που είναι ο βαθμός του δικτύου.

```

```

do i=1,Lmax
  read(11,*,end=18) i1,degree(i1)
enddo

ccc      Βρίσκουμε τη μέγιστη και την ελάχιστη τιμή του διανύσματος του βαθμού.
ccc      Χωρίζουμε το εύρος των τιμών του διανύσματος του βαθμού σε διαμερίσεις,
ccc      μεγέθους binsize.

ccc      Υπολογίζουμε τώρα την κατανομή.

ccc      Πρώτα, για κάθε διαμέριση, συγκρίνουμε την κάθε τιμή του διανύσματος του
ccc      βαθμού με την τιμή που ήδη υπάρχει στη διαμέριση αυτή
ccc      και με την τιμή που υπάρχει στην επόμενη διαμέριση.
ccc      Έτσι κατανέμουμε τις τιμές του διανύσματος του βαθμού σωστά στις
ccc      διάφορες διαμερίσεις.

countt=0.
do 1000 i1=1,LL
  do 2000 jj=1,mbins-1
    if (degree(i1).gt.bins(jj).and.
& degree(i1).le.bins(jj+1)) then

ccc      Ξεκινάμε τον υπολογισμό της κατανομής.
ccc      Αναλόγως με την προηγούμενη σύγκριση, αυξάνουμε ή όχι,
ccc      κατά μία μονάδα την τιμή της κάθε διαμέρισης.

                                idistr(jj)=idistr(jj)+1
countt=countt+1.
go to 1000
endif
2000 enddo

```

```
1000      enddo
          itotal=0

ccc      Υπολογίζουμε το άθροισμα όλων των τιμών των διαμερίσεων:
          do i=1,mbins
            itotal=itotal+idistr(i)
          enddo

ccc      Για κάθε διαμέριση υπολογίζουμε τη μέσο όρο της τιμής
ccc      που αντιστοιχούσε στη διαμέριση:

          do i=1,mbins
            if (idistr(i).ne.0) then
              distr(i)=dble(idistr(i))/dble(itotal)    !! Η κατανομή.
            endif
          enddo

ccc      Εδώ υπολογίζουμε την αθροιστική κατανομή των τιμών του διανύσματος
ccc      του βαθμού:

          dd=0.0
          do i=mbins,1,-1
            dd=dd+distr(i)    !! Η αθροιστική κατανομή.
            if (distr(i).ne.0.0) write(99,*) bins(i+1), distr(i), dd, i
          enddo
```

8. Τμήμα κώδικα υπολογισμού της κατανομής του συντελεστή συσσωμάτωσης του αφηρημένου δικτύου.

```

ccc      clusterc(i1) είναι ο συντελεστής συσσώματωσης του κόμβου i1
ccc      του αφηρημένου δικτύου.
ccc      bins(i) είναι η συντεταγμένη αρχής του κελίου i του πίνακα συνδεσιμότητας.
ccc      mbins είναι ο συνολικός αριθμός των διαμερίσεων.
ccc      Διαβάζουμε από ένα αρχείο τις τιμές του συντελεστή συσσώματωσης
ccc      κάθε κελίου,
ccc      και έχουμε έτσι ένα διάνυσμα που είναι ο συντελεστής συσσώματωσης
ccc      του δικτύου:

```

```

do i=1,Lmax
  read(11,*,end=18) i1, clusterc(i1)
enddo

```

```

ccc      Βρίσκουμε τη μέγιστη και την ελάχιστη τιμή του διανύσματος
ccc      του συντελεστή συσσώματωσης.
ccc      Χωρίζουμε το εύρος των τιμών του διανύσματος του συντελεστή
ccc      συσσώματωσης σε διαμερίσεις, μεγέθους binsize.

```

```

ccc      Υπολογίζουμε τώρα την κατανομή:

```

```

ccc      Πρώτα, για κάθε διαμέριση, συγκρίνουμε την κάθε τιμή του διανύσματος
ccc      του συντελεστή συσσώματωσης με την τιμή που ήδη υπάρχει στη διαμέριση
ccc      αυτή, και με την τιμή που υπάρχει στην επόμενη διαμέριση.
ccc      Έτσι κατανέμουμε τις τιμές του διανύσματος του συντελεστή
ccc      συσσώματωσης, σωστά στις διάφορες διαμερίσεις.

```

```

countt=0.
do 1000 i1=1,LL
  do 2000 jj=1,mbins-1
    if (clusterc(i1).gt.bins(jj).and.
& clusterc(i1).le.bins(jj+1)) then

```

```
ccc      Ξεκινάμε τον υπολογισμό της κατανομής:
ccc      Αναλόγως με την προηγούμενη σύγκριση, αυξάνουμε ή όχι,
ccc      κατά μία μονάδα την τιμή της κάθε διαμέρισης.

        idistr(jj)=idistr(jj)+1
        countt=countt+1.
        go to 1000
        endif
2000     enddo
1000     enddo
        itotal=0
ccc      Υπολογίζουμε το άθροισμα όλων των τιμών των διαμερίσεων:
        do i=1,mbins
        itotal=itotal+idistr(i)
        enddo

ccc      Για κάθε διαμέριση υπολογίζουμε τη μέσο όρο της τιμής που
ccc      αντιστοιχούσε στη διαμέριση:

        do i=1,mbins
        if (idistr(i).ne.0)    then
        distr(i)=dble(idistr(i))/dble(itotal)    !! Η κατανομή.
        endif
        enddo

ccc      Εδώ υπολογίζουμε την αθροιστική κατανομή των τιμών του διανύσματος
ccc      του συντελεστή συσσώματωσης:

        dd=0.0
        do i=mbins,1,-1
        dd=dd+distr(i)    !! Η αθροιστική κατανομή.
```

```

if (distr(i).ne.0.0)    write(99,*) bins(i+1), distr(i), dd, i
enddo

```

9. Τμήμα κώδικα για τη μελέτη των χιμαιρικών καταστάσεων.

```

ccc    Παρουσιάζεται ο επαναληπτικός βρόχος για την ολοκλήρωση
ccc    του συστήματος.
ccc    των συζευγμένων σε δομή δακτυλίου ταλαντωτών.
ccc    Ο αριθμός των ταλαντωτών δίνεται από την παράμετρο le.
        do k=1,le

```

```

ccc    Για τον k ταλαντωτή ελέγχουμε τους nr γείτονες από τα δεξιά
ccc    και τους nr γείτονες από τα αριστερά:

```

$$j_{left} = k - nr$$

$$j_{right} = k + nr$$

```

ccc    Συνθέτουμε το τμήμα των διαφορικών εξισώσεων που αντιστοιχεί
ccc    στη σύζευξη των ταλαντωτών.

```

$$\text{do } j = j_{left}, j_{right}$$

```

ccc    Προσέχουμε να λάβουμε υπ'όψη μας τους σωστούς κόμβους του δακτυλίου
ccc    για τον κάθε ταλαντωτή, χρησιμοποιώντας μία συνθήκη διόρθωσης:

```

```

j=j
if (j.le.0) then
j=le + j
endif
if (j.gt.le) then

```

```

        j=j - le
    endif

ccc    Εφαρμόζουμε "άμεση" σύζευξη στα είδη x και y:
        sum1(1,k)=x(1,j)-x(1,k)
        sum2(1,k)=y(1,j)-y(1,k)
         $b_{suma}(1,k) = b_{suma}(1,k) + (b_{xx} * sum1(1,k) + b_{xy} * sum2(1,k))$ 
         $b_{sumb}(1,k) = b_{sumb}(1,k) + (b_{yx} * sum1(1,k) + b_{yy} * sum2(1,k))$ 
    enddo

ccc    Κατασκευάζουμε τώρα τις διαφορικές εξισώσεις με τη σύζευξη:
        tm1(1,k) = -2.*pk1*x(1,k)*x(1,k)*y(1,k)*y(1,k) + pk2
        & *x(1,k)*(1.-x(1,k)-y(1,k)) + coeff *bsuma(1,k)
        tm2(1,k) = pk1*x(1,k)*x(1,k)*y(1,k)*y(1,k) - pk3
        & *y(1,k)*(1.-x(1,k)-y(1,k)) + coeff *bsumb(1,k)
        x(1,k) = x(1,k) + h*tm1(1,k)
        y(1,k) = y(1,k) + h*tm2(1,k)


ccc    Υπολογισμοί μεγεθών που οδηγούν στον υπολογισμό της
ccc    Μέσης Φασικής Ταχύτητας:
ccc    Αφήνουμε να περάσει λίγος χρόνος στην αρχή για να
ccc    αγνοήσουμε φαινόμενα προσαρμογής:

        if (i.gt.30000) then
             $a(1,k) = dble((x(1,k) - x_{init}(1,k))/h)$ 
ccc    h είναι το βήμα ολοκλήρωσης.
             $x_{init}(1,k) = x(1,k)$ 


ccc    Ελέγχουμε πότε αλλάζει η κλίση της μεταβλητής x,
ccc    δηλαδή πότε αλλάζει πρόσημο η παράγωγος της συγκέντρωσης x.
ccc    Δηλαδή βρίσκουμε πότε υπάρχει ακρότατο της συνάρτησης x:

```



```

        if ((aa(1,k)*a(1,k)).lt.0)    then
ccc      Μετράμε τον αριθμό των φορών που επιτυγχάνεται
ccc      αλλαγή της κλίσης της x:
        counter(1,k)=counter(1,k)+1

ccc      Υπολογίζουμε το χρόνο που περνάει ανάμεσα στις στιγμές των ακροτάτων:
        if (counter(1,k).ge.2) then
            timelength(1,k)=dble(i)*h - timespot(1,k)
            period(1,k)=period(1,k)+timelength(1,k)
            counterr(1,k)=counterr(1,k)+1
        endif
        timespot(1,k) = dble(i)*h
        endif
        aa(1,k)=a(1,k)
        endif

```

10. Τμήμα κώδικα υπολογισμού της Μέσης Φασικής Ταχύτητας των συζευγμένων ταλαντωτών.

```

ccc      Ξεκινάει ο επαναληπτικός βρόχος για το χρόνο,
ccc      δηλαδή για την ολοκλήρωση του συστήματος.
ccc      .....
ccc      Ξεκινάει ο επαναληπτικός βρόχος για τους ταλαντωτές.
ccc      Το κομμάτι που παρουσιάσαμε ακριβώς παραπάνω.
ccc      Κλείνει ο επαναληπτικός βρόχος για τους ταλαντωτές.
ccc      Υπολογίζουμε την περίοδο της ταλάντωσης κάθε ταλαντωτή:
        do i=1,le
            period(1,i)=dble(period(1,i))/dble(counterr(1,i))
ccc      Υπολογίζουμε τη Μέση Φασική Ταχύτητα κάθε ταλαντωτή:
            phasemeanvel(1,i)=dble(2*pi)/dble(period(1,i))
ccc      Γράφουμε σε ένα αρχείο τις τιμές των μεγεθών που μας ενδιαφέρουν:

```

```
write(15000,*) i, counterr(1,i), period(1,i), phasemeanvel(1,i)  
enddo
```

ccc Κλείνει ο επαναληπτικός βρόχος για τον χρόνο.

Βιβλιογραφία

- [1] V. A. A. Jansen, "The Dynamics of Two Diffusively Coupled Predator-Prey Populations", *TPB* **59**, 119-131 (2001).
- [2] A. El-Gohary, M. T. Yassen, "Optimal Control and Synchronization of Lotka-Volterra Model", *Chaos, Solitons & Fractals* **12**, 2087-2093 (2001).
- [3] E. A. Ahmend, A. S. Hegazi, A. S. Elgazzar, H. M. Yehia, "On Synchronization, Persistence and Seasonality in some Spatially Inhomogeneous Models in Epidemics and Ecology", *Phys. A* **332**, 155-168 (2003).
- [4] D. A. Vasseur, J. W. Fox, "Phase-Locking and Enviromental Fluctuations Generate Synchrony in a Predator-Prey Community", *Nature Letts.* **460**, 1007-1011 (2009).
- [5] N. Kouvaris, A. Provata, D. Kugiumtzis, "Detecting synchronization in coupled stochastic ecosystem networks", *Phys. Letts. A* **374**, 507–515 (2010).
- [6] A.P.J. Jansen and J.J. Lukkien, "Dynamic Monte-Carlosimulations of Reactions in Heterogeneous Catalysis", *Catalysis Today*, **53**, 259–271 (1999).
- [7] M. Nagasaka, H. Kondoh, I. Nakai and T. Ohta, "CO Oxidation Reaction on Pt(111) Studied by the Dynamic Monte Carlo Method Including Lateral Interactions of Adsorbates", *J. Chem. Phys.*, **126**, 044704 (2007).
- [8] N. V. Petrova and I. N. Yakovkin, "Mechanism of Associative Oxygen Desorption from Pt(111) Surface", *Eur. Phys. J. B* **58**, 257-262 (2007) .
- [9] Y. De Decker and F. Baras, "Bistability and Explosive Transients in Surface Reactions: The Role of Fluctuations and Spatial Correlations", *Eur. Phys. J. B* **78**, 173-186 (2010).

- [10] L. Alvarez-Falcon and L. Vicente, "Dynamic Monte Carlo Simulations of NO Decomposition on Pt(100): Temperature-Programmed Desorption Spectra", *Int. Journ. of Qunatum Chemistry* **112**, 1803-1809 (2012).
- [11] A. Farkas, F. Hess and H. Over, "Experiment-Based Kinetic Monte Carlo Simulations: CO Oxidation over RuO₂(110)", *J. Phys. Chem. C* **116**, 581-591 (2012).
- [12] S.J. Alas and L. Vicente, "TPD Study of NO Decomposition on Rh(111) by Dynamic Monte Carlo Simulation", *Surface Science* **604**, 957-964 (2010).
- [13] R. Imbihl and G. Ertl, "Oscillatory Kinetics in Heterogeneous Catalysis", *Chem. Rev.* **95**, 697-733 (1995).
- [14] R. Imbihl, T. Fink and K. Krisher, "Bifurcation Analysis of the Three-Variable Model for the NO+CO Reaction on Pt Surfaces", *J. Chem. Phys.* **96**, 6236 (1992).
- [15] O. Kortluke, V. N. Kuzovkov and W. von Niessen, "Oscillation Phenomena Leading to Chaos in a Stochastic Surface Reaction Model", *Phys. Rev. Letts.*, **81**, 2164-2167 (1998).
- [16] V. P. Zhdanov, "Kinetic Oscillations on nm-sized Catalyst Particles: NO Reduction by CO on Pt", *Catalysis Letts* **93**, 135-138 (2004).
- [17] R. Imbihl, "Nonlinear Dynamics on Catalytic Surfaces: The Contribution of Surface Science", *Surface Science* **603** (10-12), 1671 - 1679 (2009).
- [18] B. Blasius, A. Huppert, L. Stone, "Complex Dynamics and Phase Synchronization in Spatially Extended Ecological Systems", *Nature* **399** 354-359 (1999).
- [19] J.L. Deneubourg, A. Lioni, C. Detrain, "Dynamics of Aggregation and Emergence of Cooperation", *Biol. Bull.* **202**, 262-267 (2002).
- [20] M. Kuperman and G. Abramson, "Small World Effect in an Epidemiological Model", *Phys. Rev. Lett.* **86**, 2909 (2001).
- [21] D.H. Zanette and M. Kuperman, "Effects of Immunization in Small-World Epidemics", *Physica A* **309**, 445-452 (2002).
- [22] U. Naether, E. B. Postnikov, I.M. Sokolov, "Infection Fronts in Contact Disease Spread", *Eur. Phys. J. B* **65**, 353-359 (2008).

- [23] C. P. Ferreira, J. F. Fontanari and R. M. Z. dos Santos, "Phase Transitions in a Model for the Formation of Herpes Simplex Ulcers", *Phys. Rev. E*, **64**, 041903 (2001).
- [24] R.S. Baghel, J. Dhar, R. Jain, "Bifurcation and Spatial Pattern Formation in Spreading of Disease with Incubation Period in a Phytoplankton Dynamics", *E. J. Diff. Equations* **2012** (21), 1-12 (2012).
- [25] V. P. Zhdanov, "Island Growth and Phase Separation in Chemically Reactive Adsorbed Overlayers", *Surface Science* **392**, 185-198 (1997).
- [26] V. P. Zhdanov, "Pattern Formation in Catalytic Reactions due to Lateral Adsorbate-Adsorbate Interactions", *Langmuir* **17** 1793-1799 (2001).
- [27] V. Kuzovkov and E. Kotomin, "Kinetics of Bimolecular Reactions in Condensed Media - Critical Phenomena and Microscopic Self-Organisation", *Rep. Prog. Phys.*, **51**, 1479-1523 (1988).
- [28] J. P. Hovi, A. P. J. Jansen and R. M. Nieminen, "Oscillatory Temporal Behavior in an Autocatalytic Surface Reaction Model", *Phys. Rev. E* **55**, 4170-4178 (1997).
- [29] E. Kotomin and V. Kuzovkov, "Cooperative Phenomena in Bimolecular Reactions", *Modern Aspects of Diffusion-Controlled Processes*, **34**, Elsevier Science B. V., Amsterdam (1996).
- [30] V. Kashcheyevs and V. N. Kuzovkov, "Global Oscillation Mechanism in the Stochastic Lotka Model", *Phys. Rev. E*, **63**, 061107 (2001) .
- [31] A. Provata, G. Nicolis and F. Baras, "Oscillatory Dynamics in Low-Dimensional Supports: A Lattice Lotka-Volterra Model", *J. Chem. Phys.* **110**, 8361 (1999).
- [32] A. Efimov, A. Shabunin, A. Provata, "Synchronization of Stochastic Oscillations due to Long-Range Diffusion", *Phys. Rev. E* **78**, 056201 (2008).
- [33] A. V. Shabunin, F. Baras, A. Provata, "Oscillatory Reactive Dynamics on Surfaces: A Lattice Limit Cycle Model", *Phys. Rev. E* **66**, 036219 (2002) .
- [34] A. Provata, G. A. Tsekouras, F. Diakonou, et al., "Fluctuation-Induced Local Oscillations and Fractal Patterns in the Lattice Limit Cycle Model", *Fluctuation and Noise Letters* **3**, L241-L250 (2003) .
- [35] G. Nicolis and A. De Wit, "Reaction Diffusion Systems", *Scholarpedia* **2** (9) (1475).

- [36] A. T. Fechner, Ueber Umkehrungen der Polarität der einfachen Kette, Schweigg. J. **53**, 61-76 (1828).
- [37] F. Sagués and I. R. Epstein, "Nonlinear Chemical Dynamics", Royal Soc. Chem., Dalton Trans., 1201-1217 (2003).
- [38] W. C. Bray, "A Periodic Reaction in Homogeneous Solution and Its Relation to Catalysis", J. Am. Chem. Soc. **43** (6), 1262-1267 (1921).
- [39] Philip Ball, "Turing - Patterns", Chem. World, Royal Soc. Chem. (2012).
- [40] B. P. Belousov, "Sbornik Referator po Radiatsioni Medizin" (conference proceedings), p.145 (1958).
- [41] A.M. Turing, "The Chemical Basis of Morphogenesis", Phil. Trans. of the Royal Soc. of London. Series B, Biological Sciences, **237**, 641, 37-72 (1952).
- [42] K. W. Cable, Kestrels and Cerevisiae, "Alan Turing's Reaction-Diffusion Model – Simplification of the Complex"
- [43] A. M. Zhabotinsky, "Periodical Oxidation of Malonic Acid in Solution (a Study of the Belousov Reaction Kinetics)", Biofizika **9**, 306-311 (1964).
- [44] R. J. Field, E. Körös and R. M. Noyes, "Oscillations in Chemical Systems. II. Thorough Analysis of Temporal Oscillation in the Bromate-Cerium-Malonic Acid-Starch System", J. Am. Chem. Soc. **94**, 8649-8664 (1972).
- [45] D. Edelson, R. J. Field and R.M. Noyes, "Mechanistic Details of the Belousov-Zhabotinskii Oscillations", Int. J. Chem. Kinet. **7**, 417-432 (1975).
- [46] P. De Kepper, K. Kustin and I. R. Epstein, "A Systematically Designed Homogeneous Oscillating Reaction: The Arsenite-Iodate-Chlorite System", J. Am. Chem. Soc. **103**, 2133-2134 (1981).
- [47] V. Casters, E. Dulos, J. Boissonade, and P. De Kepper, "Experimental Evidence of a Sustained Standing Turing-Type Nonequilibrium Chemical Pattern", Phys. Rev. Lett. **64**, 2953 (1990).
- [48] I. Lengyel and I. R. Epstein, "Modeling of Turing Structures in the Chlorite-Iodide-Malonic Acid-Starch Reaction System", Science **251**, 650-652 (1991).
- [49] I. Lengyel and I. R. Epstein, "A Chemical Approach to Designing Turing Patterns in Reaction-Diffusion Systems", Proc. Natl. Acad. Sci. USA **89**, 3977-3979 (1992).

- [50] A. E. Bugrim, A. M. Zhabotinsky, I. R. Epstein, "Interference of Crossing Trigger Waves in Multilayer Reaction-Diffusion Systems", *Phys. Rev. Letts.* **75** (6), 1206-1209 (1995).
- [51] I. R. Epstein, K. Showalter, "Oscillations, Patterns and Chaos", *J. Phys. Chem.* **100**, 13132-13147 (1996).
- [52] V. K. Vanag, I. R. Epstein, "Pattern Formation in a Tunable Medium: The Belousov-Zhabotinsky Reaction in an Aerosol OT Microemulsion", *Phys. Rev. Letts.* **87** (22), 228301 (2001).
- [53] L. Yang, M. Dolnik, A. M. Zhabotinsky, I. R. Epstein, "Pattern Formation Arising from Interactions between Turing and Wave Instabilities", *J. Chem. Phys.* **117** (15), 7259 (2002).
- [54] L. Yang, M. Dolnik, A. M. Zhabotinsky, I. R. Epstein, "Turing Patterns beyond Hexagons and Stripes", *Chaos* **16** (3), 037114 (2006).
- [55] A. Kaminaga, V. K. Vanag, I. R. Epstein, "A Reaction-Diffusion Memory Device", *Angewandte Chem. Int. Ed.* **45** (19), 3087-9 (2006).
- [56] encyclopedia.com, Complete Dictionary of Scientific Biography: Ilya Prigogine (2008).
- [57] "Ilya Prigogine - Biographical", Nobelprize.org. Nobel Media AB (2014), (1977).
- [58] C. Maes, K. Netocny, "Minimum Entropy Production Principle", *Scholarpedia* **8** (9), 9664 (2013).
- [59] I. Prigogine, "Time, Structure and Fluctuations", Nobel Lecture (8 December 1977).
- [60] I. Prigogine and G. Nicolis, "On SymmetryBreaking Instabilities in Dissipative Systems", *J. Chem. Phys.* **46**, 1045 (1967).
- [61] R. Lefever, G. Nicolis and I. Prigogine, "On the Occurrence of Oscillations around the Steady State in Systems of Chemical Reactions far from Equilibrium", *J. Chem. Phys.* **47**, 1045 (1967).
- [62] I. Prigogine and R. Lefever, "Symmetry Breaking Instabilities in Dissipative Systems. II", *J. Chem. Phys.* **48**, 1695 (1968).

- [63] G. Nicolis and A. Babloyantz, "Fluctuations in Open Systems", *J. Chem. Phys.* **51**, 2632 (1969).
- [64] G. Nicolis, I. Prigogine, "Self-Organization in Nonequilibrium Systems: From Dissipative Structures to Order through Fluctuations", Wiley-Interscience, New York (1977).
- [65] J.J. Tyson, "Some Further Studies of Nonlinear Oscillations in Chemical Systems", *J. Chem. Phys.* **58** (9), 3919-3930 (1973).
- [66] A. De Wit, "Spatial Patterns and Spatiotemporal Dynamics in Chemical Systems", *Adv. Chem. Phys.* **109**, 435-513 (1999).
- [67] P. De Kepper, E. Dulos, J. Boissonade, A. De Wit, G. Dewel and P. Borkmans, "Reaction-Diffusion Patterns in Confined Chemical Systems", *J. Stat. Phys.* **101**, 495-508 (2000).
- [68] Y. De Decker and A. S. Mikhailov, "Promoter-Induced Nonlinear Pattern Formation in Surface Chemical Reactions", *J. Phys. Chem. B* **108** (38), 14759-14765 (2004).
- [69] P. Gaspard, "Fluctuation Theorem for Nonequilibrium Reactions", *J. Chem. Phys.* **120**, 8898-8905 (2004).
- [70] D. Bullara, Y. De Decker and R. Lefever, "Nonequilibrium Chemistry in Confined Environments: A lattice Brusselator Model", *Phys. Rev. E* **87**, 062923 (2013).
- [71] C. Beta and A.S. Mikhailov, "Controlling Spatiotemporal Chaos in Oscillatory Reaction-Diffusion Systems by Time-Delay Autosynchronization", *Physica D* **199**, 173-184 (2004).
- [72] N. E. Kouvaris, H. Kori and A. S. Mikhailov, "Traveling and Pinned Fronts in Bistable Reaction-Diffusion Systems on Networks", *PLoS ONE* **7** (9), e45029 (2012).
- [73] N. E. Kouvaris and A. S. Mikhailov, "Feedback-Induced Stationary Localized Patterns in Networks of Diffusively Coupled Bistable Elements", *Europhys. Letts.* **102**, 16003 (2013).
- [74] G. Ertl, H. Knözinger, F. Schüth, and J. Weitkamp (eds.), "Handbook of Heterogeneous Catalysis", 2nd ed., 8 vols. Wiley-VCH, Weinheim (2008).

- [75] G. Ertl, Reactions at Surfaces: "From Atoms to Complexity", Nobel Lecture (2007).
- [76] B. B. Mandelbrot, "Fractals: Form, Chance and Dimension", W. H. Freeman and Company San Francisco (1977).
- [77] B. B. Mandelbrot, "The Fractal Geometry of Nature", H. Freeman and Company San Francisco, pp 460 (1982).
- [78] H. Takayasu, "Fractals in The Physical Sciences", Nonlinear Science Theory and Applications, Manchester University Press (1990).
- [79] B. J. West, "Fractal Physiology and Chaos in Medicine", Studies of Nonlinear Phenomena in Life Science **1**, World Scientific (1990).
- [80] B. J. West, V. Bhargava and A. I. Goldberger, "Beyond the Principle of Similitude: Renormalization in the Bronchial Tree", J. Appl. Physiol. **60**, 189-197 (1986).
- [81] Τ. Μπούνητης, "Ο Θαυμαστός Κόσμος των Fractal: Μιά Περιήγηση στη Νέα Επιστήμη του Χάους και της Πολυπλοκότητας", Leader Books (2004).
- [82] A. N. Kolmogorov, "Entropy per unit time as a metric invariant of automorphisms" (στα Ρώσικα), Dokl. Akad. Nauk. SSSR **124**, 754 (1959). (Αγγλική μετάφραση: Math. Rev. **21**, 2035).
- [83] G. A. Edgar, "Classics on Fractals", Studies in Nonlinearity, ABP (2004).
- [84] J. L. McCauley, "Chaos, Dynamics and Fractals: An Algorithmic Approach to Deterministic Chaos", Cambridge Nonlinear Science Series 2, Cambridge University Press (1963).
- [85] A. J. Lotka, "Contribution to the Theory of Periodic Reaction", J. Phys. Chem. **14** (3), 271–274 (1910).
- [86] A. J. Lotka, "Analytical Note of Certain Rhythmic Relations in Organic Systems", Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America **6**, 7, 410-415 (1920).
- [87] A. J. Lotka, "Undamped Oscillations Derived from the Law of Mass Action", J. Am. Chem. Soc. **42**, 1595-1599 (1920).
- [88] T. Turanyi and A. S. Tomlin, "Analysis of Kinetic Reaction Mechanisms", Springer (2014).

- [89] N. Baca'ér, "A Short History of Mathematical Population Dynamics", Springer (2011).
- [90] V. Volterra, "Fluctuations in the Abundance of a Species Considered Mathematically", *Nature* **118**, 558-560 (1926).
- [91] V. Volterra, "Leçons sur la Théorie Mathématique de la Lutte pour la Vie" (redigés par Marcel Brelot), Paris, Gauthier-Villars (1931).
- [92] J.D. Murray, "Mathematical Biology", Biomathematics Texts, Springer-Verlang, Berlin Heidelberg (1993).
- [93] Γ-Α. Σ. Τσεκούρας, "Μη Γραμμικά Χωροχρονικά Μορφώματα σε Διακριτά Πλέγματα", Διδακτορική Διατριβή, ΕΚΠΑ, Αθήνα (2004).
- [94] L. Frachebourg, P. L. Krapivsky, and E. Ben-Naim, "Segregation in a One-Dimensional Model of Interacting Species", *Phys. Rev. Letts.* **77**, 2125 (1996).
- [95] L. Frachebourg, P.L. Krapivsky, E. Ben-Naim, "Spatial Organization in Cyclic Lotka-Volterra Systems", *Phy. Rev. E.* **54**, 6186 (1996).
- [96] A. Provata, E. Panagakou, "Abstract Phase Space Networks Describing Reactive Dynamics", *Phys. A* **414**, 181-193 (2014).
- [97] M. Bowker and D. A. King, "Adsorbate Diffusion on Single Crystal Surfaces I", *Surf. Sci.*, **71**, 583 (1978).
- [98] E. V. Albano, "The Monte-Carlo Simulation Method: a Powerful Tool for the Study of Reaction Processes", *Het. Chem. Rev.*, **3**, 389 (1996).
- [99] M. E. J. Newman and G. T. Barkena, "Monte Carlo Methods in Statistical Physics", Clarendon Press, Oxford (1999) .
- [100] D. P. Landau and K. Bidner, "A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics", Cambridge University Press (2000) .
- [101] N. Metropolis and S. Ulam, "The Monte Carlo Method", *J. Am. Stat. Assoc.* **44**(247), 335-341 (1949).
- [102] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth and M.N. Rosenbluth, A.H. Teller and E. Teller, "Equation of State Calculations by Fast Computing Machines", *J. Chem. Phys.* **21**(6), 1087 (1953).

- [103] N. Metropolis, "The Beginning of the Monte Carlo Method", Los Alamos Science, **12**, 125-130 (1987).
- [104] M. E. J. Newman, "The structure and function of complex networks", SIAM Rev. **45**, 167-256 (2003).
- [105] A. L. Barabasi, M. Newman and D. J. Watts, "The Structure and Dynamics of Networks", Princeton University Press, Princeton (2006) .
- [106] A. Barrat, M. Barthelemy and A. Vespignani, "Dynamical Processes on Complex Networks", Cambridge University Press, New York (2008).
- [107] A. Barrat, M. Barthelemy, R. Pastor-Satorras and A. Vespignani, "The Architecture of Complex Weighted Networks", PNAS **101**, 3747-3752 (2004).
- [108] I. Vragovic, E. Louis, A. Diaz-Guilera, "Efficiency of Informational Transfer in Regular and Complex networks, Phys. Rev. E **71**, 036122 (2005) .
- [109] S. Yoon, S. Lee, S. H. Yook and Y. Kim, "Statistical Properties of Sampled Networks by Random Walks", Phys. Rev. E **75**, 046114 (2007).
- [110] R. Albert, A. L. Barabasi, "Statistical Mechanics of Complex Networks", Rev. of Modern Physics **74**, 47-97 (2002).
- [111] S. N. Dorogovtsev, A. V. Goltsev, J. F. F. Mendes, "Critical Phenomena in Complex Networks", Rev. of Modern Physics **80**, 1275-1335 (2008).
- [112] S. Boccaletti, V. Latora, Y. Moreno, M. Chavez, D. U. Hwang, "Complex networks: Structure and dynamics", Phys. Reports **424** (4), 175-308 (2006).
- [113] S. Fortunato, "Community Detection in Graphs", Phys. Reports **486**, 3-5, 75-174 (2010).
- [114] L. Lacasa, B. Luque, J. Luque and J. C. Nuno, "The Visibility Graph: A New Method for Estimating the Hurst Exponent in Fractional Brownian Motion", Europhys. Letts. **86**, 30001 (2009).
- [115] Y. Yang and H. Yang, "Complex Network-Based Time Series Analysis", Physica A **387**, 1381-1386 (2007).
- [116] Y. Dong, W. Huang, Z. Liu and S. Guan, "Network Analysis of Time Series under the Constraint of Fixed Nearest Neighbours", Physica A **392**, 967-973 (2013).

- [117] A. Provata and C. Beck, "Coupled Intermittent Maps Modeling the Statistics of Genomic Sequences: A network Approach", *Phys. Rev. E* **86**, 046101 (2012).
- [118] R. Sinatra, D. Condorelli and V. Latora, "Networks of Motifs from Sequences of Symbols", *Phys. Rev. Letts.* **105**, 178702 (2010).
- [119] J. Schnakenberg, "Network Theory of Microscopic and Macroscopic Behavior of Master Equation Systems", *Rev. Mod. Phys.* **48**, 571-585 (1976).
- [120] F. Schlögl, "Chemical Reaction Models for Non-Equilibrium Phase Transition", *Zeitschrift für Physik*, **253**, 147–161 (1972).
- [121] I. Martinez-Forero, A. Pelaez-Lopez and P. Villoslada, "Steady State Detection of Chemical Reaction Networks Using a Simplified Analytical Method", *PLOS ONE* **5**, e10823 (2010) .
- [122] P. De Leenheer, D. Angeli and E. D. Sontag, "Monotone Chemical Reaction Networks", *J. Math. Chem.* **41**, 295-314 (2007).
- [123] P.D. Kourdis, R. Steuer and D.A. Goussis, "Physical Understanding of Complex Multiscale Biochemical Models via Algorithmic Simplification: Glycolysis in *Saccharomyces Cerevisiae*", *Physica* **239**, 1789-1817 (2010) .
- [124] A. Bernal and E. Daza, "Metabolic Networks": Beyond the Graph, *Current Computer-aided Drug Design* **7**, 122-132 (2011).
- [125] P.V. Coveney, J. B. Swadling, J. A. D. Wattis and H. C. Greenwell, "Theory, Modelling and Simulation in Origins of Life Studies", *Chem. Soc. Rev.* **41**, 5430-5446 (2012) .
- [126] V. M. Zolotarev, "On Representation of Densities of Stable Laws by Special Functions", *Theory Probab. Appl. (SIAM)* **39**, 354–362 (1995).
- [127] P. Grindrod, "Range Dependent Random Graphs and Their Applications to Modelling Large Small-World Networks", *Phys. Rev. E* **66**, 066702 (2002).
- [128] J. Saramaki, M. Kivela, J. -P. Onnela, K. Kaski and J. Kertesz, "Generalisation of the Clustering Coefficient to Weighted Complex Networks", *Phys. Rev. E* **75**, 027105, (2007).
- [129] D. J. Watts and S. H. Strogatz, "Small World Networks", *Nature* **393**, 440-442 (1998).

- [130] E. Ravasz and A. L. Barabasi, "Hierarchical Organisation in Complex Networks", *Phys. Rev. E* **67**, 026112 (2003).
- [131] A. Andronov, A. A. Vitt and S. E. Khaykin, "Theory of Oscillators" (στα Ρώσικα), Gostekhizdat, Moscow (1937), Αγγλική μετάφραση: Pergamon Press, Oxford, New York, Toronto (1966).
- [132] A. Pikovski and M. Rosenblum, "Synchronization", *Scholarpedia* **2**, 12, 1469 (2007).
- [133] A. Pikovsky, M. Rosenblum, J. Kutzrs, R. C. Hilborn, "Synchronization: A Universal Concept in Nonlinear Sciences", Cambridge University Press (2001).
- [134] Y. Kuramoto and D. Battogtokh, "Coexistence of Coherence and Incoherence in Nonlocally Coupled Phase Oscillators", *Nonlinear Phenomena in Complex Systems*, **5**, 380 (2002).
- [135] I. Omelchenko, O. Omel'chenko, P. Hövel and E. Schöll, "When Nonlocal Coupling between Oscillators Becomes Stronger: Patched Synchrony or Multichimera States", *Phys. Rev. Lett.*, **110**, 224101 (2013).
- [136] Ch . Huygens (Hugenii), "Horologium Oscillatorium", Apud F. Muguet, Parisiis, France (1673), English translation: The Pendulum Clock, Iowa State University Press, Ames (1986).
- [137] Ch. Huygens, *Oeuvres Completes*, **15**, Swets & Zeitlinger B. V., Amsterdam (1967)
- [138] J. Rayleigh, "The Theory of Sound", Dover Publishers, New York (1945).
- [139] N. Kouvaris, "Study of Synchronization in Discrete Biological Models", Διδακτορική Διατριβή, ΑΠΘ, Θεσσαλονίκη (2011).
- [140] D. M. Abrams and S. H. Strogatz, "Chimera States for Coupled Oscillators", *Phys. Rev. Lett.*, **93**, 174102 (2004).
- [141] D. M. Abrams, R. Mirollo, S. H. Strogatz, and D. A. Willey, "Solvable Model for Chimera States of Coupled Oscillators", *Phy. Rev. Lett.* **101**, 084103, (2008).
- [142] C. R. Laing, K. Rajendran, and I. G. Kevrekidis, "Chimeras in Random Non-Complete Networks of Phase Oscillators", *Chaos* **22**, 013132, (2012).

- [143] I. Omelchenko, B. Riemenschneider, P. Hövel, Y. Maistrenko and E. Schöll, "Transition from Spatial Coherence to Incoherence in Coupled Chaotic Systems", *Phys. Rev. E*, **85**, 026212 (2012).
- [144] C. R. Laing, "Chimeras in Networks of Planar Oscillators", *Phys. Rev. E* **81**, 066221 (2010).
- [145] J. Hizanidis, V. Kanas, A. Bezerianos, T. Bountis, "Chimera States in Networks of Nonlocally Coupled Hindmarsh-Rose Neuron Models", *Int. J. of Bifurc. and Chaos* **24**, 1450030, (2013).
- [146] J. C. Gonzalez-Avella, M. G. Cosenza, and M. San Miguel, "Localized Coherence in Two Interacting Populations of Social Agents", *Physica A* **399**, 24–30, (2014).
- [147] A. Vüellings, J. Hizanidis, I. Omelchenko, and P. Hövel, "Clustered Chimera States in Systems of Type-I Excitability", submitted: *New J. Phys.* (2014).
- [148] M. R. Tinsley and K. Showalter, "Chimera and Phase Cluster States in Populations of Coupled Chemical Oscillators", *Nature Physics* **8**, 662, (2012).
- [149] A. M. Hagerstrom, E. Thomas, R. Roy, P. Hövel, I. Omelchenko, and E. Schöll, "Chimeras in Coupled-Map Lattices: Experiments on a Liquid Crystal Spatial Light Modulator System", *Nature Physics* **8**, 658, (2012).
- [150] E. A. Martens, S. Thutupalli, A. Fourrière, and O. Hallatschek, "Chimera States in Mechanical Oscillator Networks", *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America PNAS* **110**, 26 , 10563–10567 (2013).
- [151] L. Larger, B. Penkovsky and Y L Maistrenko, "Virtual chimera states for delayed-feedback systems", *Phys. Rev. Letts.*, **111**, 054103 (2013).
- [152] M. Wickramasinghe and I Z Kiss, "Spatially Organized Dynamical States in Chemical Oscillator Networks: Synchronization, Dynamical Differentiation, and Chimera Patterns", *PLoS ONE*, **8**, e80586 (2013).
- [153] L. Schmidt, K. Schönleber, K. Krischer and V. Garcia-Morales, "Pattern Formation During the Oscillatory Photoelectrodissolution of N-Type Silicon: Turbulence, Clusters and Chimeras", *Chaos*, **24**, 013102 (2014).
- [154] M. J. Panaggio, and D. M. Abrams, "Chimera states: Coexistence of Coherence and Incoherence in Networks of Coupled Oscillators", *arXiv:1403.6204v2 [nlin.CD]* (2014).

- [155] R. Ma, J. Wang, and Z. Liu, "Robust Features of Chimera States and the Implementation of Alternating Chimera States", *Europhys. Letts.* **91** (4), 40006 (2010).
- [156] J. M. Davidenko, A. V. Pertsov, R. Salomonsz, W. Baxter, and J. Jalife, "Stationary and Drifting Spiral Waves of Excitation in Isolated Cardiac Muscle", *Nature* **355** (6358), 349-351 (1992).
- [157] G. Filatrella, A. H. Nielsen, and N. F. Pedersen, "Analysis of a power grid using a kuramoto-like model", *Eur. Phys. J. B* **61** (4), 485–491 (2008).
- [158] R. Axelrod, "Dissemination of Culture", *J. Conflict Res.* **41**, 203 (1997).
- [159] G. Deffuant, D. Neau, F. Amblard, G. Weisbuch, "Mixing Beliefs Among Interacting Agents", *Advs. Complex Syst.* **3**, 87, (2000).
- [160] R. M. May, "Stability and Complexity in Model Ecosystems", Princeton University Press, Princeton (2001).
- [161] G. A. Tsekouras and A. Provata, "Fractal Properties of the Lattice Lotka-Volterra Model", *Phys. Rev. E*, **65**, 016204 (2001).
- [162] A. Provata and G. A. Tsekouras, "Spontaneous Formation of Dynamical Patterns with Fractal Fronts in the Cyclic Lattice Lotka-Volterra Model", *Phys. Rev. E* **67**, 056602 (2003).
- [163] A. Shabunin, V. Astakhov, V. Demidov, A. Provata, F. Baras, G. Nicolis, V. Anishchenko, "Modeling Chemical Reactions by Forced Limit-Cycle Oscillator: Synchronization Phenomena and Transition to Chaos", *Chaos Solitons & Fractals* **15**, 395-405 (2003).
- [164] J. Schnakenberg, "Simple Chemical Reaction Systems with Limit Cycle Behaviour", *J. Theor. Biol.* **81**, 389–400 (1979).
- [165] G. A. Tsekouras, A. Provata, "Fractal Formations in the Lattice Limit Cycle Model", *Eur. Phys. J. B* **52**, 107-111 (2006).
- [166] J.-S. Wang, R. H. Swendsen, "Transition Matrix Monte Carlo Method, *Journal of Statistical Physics*", **106**, pp 245-285 (2002).
- [167] E. B. Postnikov, I. M. Sokolov, "Continuum Description of a Contact Infection Spread in a SIR Model", *Mathematical Biosciences* **208**, 205 (2007).

- [168] N. Pavlenko, R. Imbihl, J. W. Evans, D. J. Liu, "Critical Behavior in an Atomistic Model for a Bistable Surface Reaction: CO oxidation with rapid CO diffusion", *Phys. Rev. E* **68**, 016212 (2003) .
- [169] K. Judd, M. Small, T. Stemler, "What Exactly Are the Properties of Scale-Free and Other Networks?", *Europhys. Letts.* **103**, 58004, (2013).
- [170] H. Seyed-allaei, G. Bianconi and M. Marsili, "Scale-Free Networks with an Exponent Less Than Two", *Phys. Rev. E*, **73**, 046113 (2006) .
- [171] G.C. Sethia, A. Sen and F.M. Atay, "Clustered Chimera States in Delay-Coupled Oscillator Systems", *Phys. Rev. Lett.*, **100**, 144102 (2008).
- [172] Y. L. Maistrenko, A. Vasylenko, O. Sudakov, R. Levchenko and V. L. Maistrenko, "Cascades of Mylti-Headed Chimera States for Coupled Phase Oscillators", *arXiv*: 1402.1363v1 (2014).
- [173] V. P. Zhdanov, "Surface Restructuring, Kinetic Oscillations, and Chaos in Heterogeneous Catalytic Reactions", *Physical Review E*, **59**, 6292-6305 (2005) .
- [174] A. Provata and V. K. Noussiou, "Spatiotemporal Oscillations and Clustering in the Ziff-Gulari-Barshad Model with Surface Reconstruction" *Physical Review E*, **72**, 066108 (2005) .
- [175] L. V. Lutsevich, O. A. Tkachenko and V. P. Zhdanov, "Thermal-Desorption of Interacting Particles from Honeycomb and Triangular Lattices", *Langmuir* **8**, 1757-1761 (1992) .

Βιογραφικό

Εκπαίδευση:

Τμήμα Φυσικής, Σχολή Θετικών Επιστημών, Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών

Διδακτορικό στη Φυσική

Δεκ 2011 - Ιουν 2015 | Αθήνα, Ελλάδα

Διατριβή: Φαινόμενα Συγχρονισμού σε Πλέγματα Συζευγμένων Ταλαντωτών

Τμήμα Μαθηματικών και Στατιστικής, Πανεπιστήμιο Μασσαχουσέτης

Μεταπτυχιακό Δίπλωμα στα Εφαρμοσμένα Μαθηματικά

Σεπ 2006 - Μάι 2008 | Άμχερστ, MA, Η.Π.Α

Εργασίες: "An investigation of Bose-Einstein Condensates" και "Mathematical Modeling of Tumor Growth"

Τμήμα Φυσικής, Σχολή Θετικών Επιστημών, Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών Πτυχίο Φυσικής

Σεπ 2001 - Σεπ 2007 | Αθήνα, Ελλάδα

Πτυχιακή Εργασία: Συμπυκνώματα Bose-Einstein: Ρήξη Συμμετρίας σε Συμμετρικά και Μη-Συμμετρικά Διπλά Πηγάδια Δυναμικού

Έρευνα:

Γκρουπ Epstein, Τμήμα Χημείας, Πανεπιστήμιο Brandeis, MA, Η.Π.Α | Research Scholar
Φεβ 2015 - Σήμερα

Θέση μεταδιδακτορικής έρευνας

Ανοιχτό Πανεπιστήμιο, Αγγλία | Visiting Research Fellow

Ιουλ 2014 - Σήμερα

Συνεργασία με τον Καθηγητή J. Johnson και την ομάδα *éToile*

Εθνικό Κέντρο Έρευνας Φυσικών Επιστημών "Δημόκριτος" | Υπότροφος - Υπ. Διδάκτορας

Δεκ 2010 - Δεκ 2014 | Athens, Greece.

Ινστιτούτο ATHENS INFORMATION TECHNOLOGY | Μεταπτυχιακή Φοιτήτρια

Φεβ 2009 - Ιουν 2009 | Αθήνα, Ελλάδα

Ερευνητική εργασία: "On the predictability of epileptic seizures from EEG signals".

Τμήμα Μαθηματικών και Στατιστικής, Πανεπιστήμιο Μασσαχουσέτης | Μεταπτυχιακή Φοιτήτρια

Σεπ 2006 - Μάιος 2008 | Άμχερστ, MA, Η.Π.Α

Ερευνητικές Εργασίες: "An investigation of Bose-Einstein Condensates" και "Mathematical Modeling of Tumor Growth"

Τμήμα Φυσικής, Σχολή Θετικών Επιστημών, Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών | Προπτυχιακή Φοιτήτρια

2005 - 2006 | Αθήνα, Ελλάδα

Πτυχιακή Εργασία: Συμπυκνώματα Bose-Einstein: Ρήξη Συμμετρίας σε Συμμετρικά και Μη-Συμμετρικά Διπλά Πηγάδια Δυναμικού

Εθνικό Κέντρο Έρευνας Φυσικών Επιστημών "Δημόκριτος" | Προπτυχιακή Φοιτήτρια

Ιουν 2003 – Αύγ 2003 | Αθήνα, Ελλάδα

Πρώτη επαφή με την επεξεργασία πειραματικών δεδομένων από το CERN.

Δημοσιεύσεις σχετικές με τη Διδακτορική Διατριβή:

1. E. Panagakou, G.C. Boulougouris, A. Provata, "Effective Mean Field Approach to Kinetic Monte Carlo Simulations in Limit Cycle Dynamics with Reactive and Diffusive Rewiring", Eur. Phys. J. B **86**, 277 (2013).

2. A. Provata, E. Panagakou, "Abstract Phase-space Networks Describing Reactive Dynamics", Physica A **414**, 15 (2014).

3. J. Hizanidis, E. Panagakou, I. Omelchenko, E. Shöll, P. Hövel, A. Provata, "Chimera States in Population Dynamics: Networks with Fragmented and Hierarchical Connectivities" (accepted in PRE, Arxiv:1504.08125v1). , **Προγράμματα – Δράσεις:**

1. Πρόγραμμα Ανταλλαγής IKYDA 2013 -2014

Υποστηριζόμενο από το Ίδρυμα Κρατικών Υποτροφιών (IKY) και τον αντίστοιχο γερμανικό φορέα German Academic Exchange Service (DAAD).

Τίτλος: "Καταστάσεις "chimera" σε μη-γραμμικά δυναμικά συστήματα οργανωμένα σε δίκτυα"

Συντονιστές: Δρ. Α. Προβατά και Δρ Ι. Χιτζανίδη (ΕΚΕΦΕ "Δημόκριτος", Ελλάδα), Dr. P. Hövel και Prof. Dr. E. Schöll (TU Berlin, Germany).

2. Maria Sklodowska-Curie Action

Τίτλος: Development and Implementation of new generation of Pseudo Random Number Generators based on Kolmogorov-Anosov K-systems

Συντονιστές: Dr. G.K. Savvidy et al.

Επιστημονικές Επισκέψεις:

1. Εργαστήριο BCCN-Nachwuchsgruppe: Nonlinear Dynamics and Control in Neuroscience, Πολυτεχνείο του Βερολίνου (Technische Universität Berlin) στα πλαίσια του προγράμματος IKYDA 2013 (31/10/2013-13/11/2013).

2. Εργαστήριο Centre for Complexity and Design, Ανοικτό Πανεπιστήμιο της Αγγλίας στα πλαίσια του προγράμματος éToile (Αύγουστος 2014, Ιανουάριος 2015).

Συνέδρια, σχολεία και σεμινάρια:

1. Χειμερινό Εξάμηνο 2010 – 2011: Εξαμηνιαίο μεταπτυχιακό μάθημα με θέμα "Πολύπλοκα Συστήματα: Ειδικά Κεφάλαια", Ομάδα Πολύπλοκων Συστημάτων και Εφαρμογών (ΟΠΣΕ), "Δημόκριτος".

2. 2010 – 2011: Σεμινάρια Εργαστηρίου Μη Γραμμικής Δυναμικής και Στατιστικής Φυσικής του ΕΚΕΦΕ "Δημόκριτος".

3. 18 – 29 Ιουλίου 2011: First European Ph.D. School on "Mathematical Modeling of Complex Systems", Πάτρα, Ελλάδα.

4. 12 – 16 Σεπτεμβρίου 2011: European Conference on Complex Systems (ECCS '11 Vienna), Βιέννη, Αυστρία (ανακοίνωση – αφίσα).

5. Χειμερινό Εξάμηνο 2011 – 2012: Εξαμηνιαίο μεταπτυχιακό μάθημα με θέμα "Πολύπλοκα Συστήματα: Ειδικά Κεφάλαια", Ομάδα Πολύπλοκων Συστημάτων και Εφαρμογών (ΟΠΣΕ), "Δημόκριτος".

6. 2011: Σεμινάρια Εργαστηρίου Μη Γραμμικής Δυναμικής και Στατιστικής Φυσικής του ΕΚΕΦΕ "Δημόκριτος".

7. 2012: Σεμινάρια Εργαστηρίου Μη Γραμμικής Δυναμικής και Στατιστικής Φυσικής του ΕΚΕΦΕ "Δημόκριτος".

8. 16 – 28 Ιουλίου 2012: Second European Ph.D. School on "Mathematical Modeling

of Complex Systems”, Πεσκάρα, Ιταλία.

9. 3 – 7 Σεπτεμβρίου 2012: European Conference on Complex Systems (ECCS '12 Brussels), Βρυξέλλες, Βέλγιο (ανακοίνωση – αφίσα, ομιλία).

10. Χειμερινό Εξάμηνο 2012 – 2013: Σειρά σεμιναρίων με θέμα "Πολύπλοκα Συστήματα: Ειδικά Κεφάλαια", Ομάδα Πολύπλοκων Συστημάτων και Εφαρμογών (ΟΠΣΕ), "Δημόκριτος".

11. Εαρινό Εξάμηνο 2012 – 2013: Εξαμηνιαία μεταπτυχιακά μαθήματα με τίτλο “Στατιστική Φυσική” και “Κβαντομηχανική” στο τμήμα Φυσικής (ΕΚΠΑ).

12. Εαρινό Εξάμηνο 2012 – 2013: Επιτυχής εξέταση στα μαθήματα “Στατιστική Φυσική” και “Κβαντομηχανική” του μεταπτυχιακού προγράμματος στη Βασική Φυσική, του τμήματος Φυσικής, του Πανεπιστημίου Αθηνών.

13. Εαρινό Εξάμηνο 2012 – 2013: Σειρά σεμιναρίων με θέμα "Πολύπλοκα Συστήματα: Ειδικά Κεφάλαια", Ομάδα Πολύπλοκων Συστημάτων και Εφαρμογών (ΟΠΣΕ), "Δημόκριτος".

14. 2013: Σεμινάρια Εργαστηρίου Μη Γραμμικής Δυναμικής και Στατιστικής Φυσικής του ΕΚΕΦΕ "Δημόκριτος".

15. 08 – 13 Απριλίου 2013: Joint CRM-Imperial College School and Workshop in Complex Systems, Βαρκελώνη, Ισπανία (ομιλία).

16. 22 – 27 Ιουλίου 2013: Third European Ph.D. School on "Mathematical Modeling of Complex Systems”, Κρήτη, Ελλάδα.

17. 15 – 20 Σεπτεμβρίου 2013: European Conference on Complex Systems (ECCS '13 Barcelona), Βαρκελώνη, Ισπανία (ομιλία).

18. Χειμερινό Εξάμηνο 2013 – 2014: Σειρά σεμιναρίων με θέμα "Πολύπλοκα Συστήματα: Ειδικά Κεφάλαια", Ομάδα Πολύπλοκων Συστημάτων και Εφαρμογών (ΟΠΣΕ), "Δημόκριτος".

19. 2013: Σεμινάρια Εργαστηρίου Μη Γραμμικής Δυναμικής και Στατιστικής Φυσικής του ΕΚΕΦΕ "Δημόκριτος".

20. Εαρινό Εξάμηνο 2013 – 2014: Σειρά σεμιναρίων με θέμα "Πολύπλοκα Συστήματα: Ειδικά Κεφάλαια", Ομάδα Πολύπλοκων Συστημάτων και Εφαρμογών (ΟΠΣΕ), "Δημόκριτος".

21. 2014: Σεμινάρια Εργαστηρίου Μη Γραμμικής Δυναμικής και Στατιστικής Φυσικής του ΕΚΕΦΕ "Δημόκριτος".

22. 14 – 25 Ιουλίου 2014 Fourth PhD summer School – Conference on "Mathematical Modelling of Complex Systems", Αθήνα, Ελλάδα (ανακοίνωση-αφίσα).

23. 19 – 21 Σεπτεμβρίου 2014 ECCS WarmUp II School on Complex Networks, Λούκα, Ιταλία.

24. 21 – 26 Σεπτεμβρίου 2014 European Conference on Complex Systems (ECCS '14 Lucca), Λούκα, Ιταλία (ομιλία).

25. 26 – 30 Σεπτεμβρίου 2014 Young Researchers Network on Complex Systems Workshop, Λούκα, Ιταλία.

Επίσης η κα Παναγάκου έχει δώσει ομιλίες στο Ινστιτούτο Νανοεπιστήμης και Νανοτεχνολογίας στο Ε.Κ.Ε.Φ.Ε "Δημόκριτος", καθώς και στο εργαστήριο BCCN-Nachwuchsgruppe: Nonlinear Dynamics and Control in Neuroscience, στο Πολυτεχνείο του Βερολίνου.

Χρηματοδότηση:

Ε.Κ.Ε.Φ.Ε. "Δημόκριτος", πρόγραμμα ASSYST, πρόγραμμα éToile.

Δραστηριότητες:

1. Οκτ 2013-Σήμερα: Πρόεδρος του Δικτύου Νέων Ερευνητών στα Πολύπλοκα Συστήματα (YRNCS)

2. Αυγ 2012-Σήμερα: Μέλος του Συμβουλίου της Εταιρείας Πολύπλοκων Συστημάτων (CSS)

3. Αυγ 2012-Σήμερα: Μέλος της ομάδας σχεδίασης του www.yrn.cs.com

4. 2012-Σήμερα: Υπεύθυνη σελίδας <http://limnos.chem.demokritos.gr>

5. 2011-Σήμερα: Μέλος της Εκτελεστικής Επιτροπής του Σκακιστικού Συλλόγου "Αίγλη Παπάγου", Αττική

6. Ιαν 1995-Σήμερα: Μέλος του Σκακιστικού Συλλόγου "Αίγλη Παπάγου", Αττική.

7. Φεβ 2015-Ιουλ 2015: Μέλος της Οργανωτικής Επιτροπής του "5th PhD Summer School Conference on Mathematical Modelling of Complex Systems"

8. Φεβ 2014-Ιουλ 2014: Μέλος της Οργανωτικής Επιτροπής του "4th PhD Summer School Conference on Mathematical Modelling of Complex Systems"

9. Σεπ 2013-Σεπ 2014: Μέλος της Οργανωτικής Επιτροπής του "Workshop of the Young Researchers Network on Complex Systems"

10. Σεπ 2013-Σεπ 2014: Μέλος της Οργανωτικής Επιτροπής του Satellite of the Young Researchers Network on Complex Systems at ECCS'14

11. Σεπ 2012-Σεπ 2013: Μέλος της Οργανωτικής Επιτροπής του Satellite of the Young Researchers Network on Complex Systems at ECCS'13

12. Σεπ 2011-Σεπ 2012: Μέλος της Οργανωτικής Επιτροπής του Satellite of the Young Researchers Network on Complex Systems at ECCS'12

13. Ιαν 1994-Δεκ 1995: Μέλος της Προ-Εθνικής Σκακιστικής Ομάδας

14. Ιαν 1990-Δεκ 1995: Μέλος του Σκακιστικού Συλλόγου Παπάγου Αττικής, Α και Β

Εθνικές Κατηγορίες