УДК 517.9

СТАБИЛЬНЫЕ КОНЦЕНТРАЦИИ, ОПРЕДЕЛЯЕМЫЕ ОДНОМЕРНЫМ УРАВНЕНИЕМ ДИФФУЗИИ С КУБИЧЕСКОЙ НЕЛИНЕЙНОСТЬЮ

А. С. Коротких

Воронежский государственный университет

Поступила в редакцию 02.09.2015 г.

Аннотация. Рассмотрено нелинейное 1-мерное уравнение диффузии с кубической нелинейностью, как простейшее уравнение, моделирующее структурные превращения физической системы, возникающие в результате отклика системы на потерю устойчивости ее первичной фазы. Предполагается выполнение граничного условия Неймана и ограничения «постоянства количества компонента в целом». Изложена методика приближенного вычисления бифурцирующих финальных точек при малых положительных значениях закритического приращения параметра. Вычисление, проведенное на основе перехода к ключевой функции, опирается на ритцевскую аппроксимацию ключевой функции по начальным собственным функциям (модам) главной линейной части градиента функционала энергии (в соответствующем функциональном пространстве состояний). Проведено также вычисление трассы кратчайшего спуска к стабильной фазе. Результат вычисления предельной фазы хорошо согласуется с результатом вычисления (по схеме Ляпунова-Шмидта) бифурцирующей стационарной фазы.

Ключевые слова: бифуркация, редукция Ляпунова–Шмидта, метод градиентного спуска, приближенные вычисления, краевое условие Неймана, функционал энергии, стабильные состояния.

STABLE CONCENTRATIONS DEFINED BY ONE–DIMENSIONAL EQUATION OF DIFFUSION WITH CUBIC NONLINEARITY

A. S. Korotkikh

Abstract. It is considered a nonlinear one-dimensional diffusion equation with cubic nonlinearity as a simple equation modeling structural transformations of a physical system, resulting system response to the loss of stability of its primary phase. It is assumed that the Neumann boundary conditions and restrictions «component amount constancy in general» are satisfied. Also it has been performed a technique bifurcating the approximate calculation of the final points for small positive supercritical values of the incrementing parameter. Calculation, which is based on the transition to the key function, is based on an Ritz approximation of the key functions of primary private functions (modes) of a main linear part of a gradient energy functional (in the corresponding functional states space). It is performed as well a calculation of a shortest route descending to stable phase. The result of evaluating the marginal phase is well agreed with the result of the bifurcating stationary phase calculation (according to the Lyapunov-Schmidt scheme).

Keywords: bifurcation, Lyapunov–Schmidt reduction, gradual descent method, approximate calculations, Neumann boundary conditions, energy functional, stable state.

ВВЕДЕНИЕ

Как известно, изменение параметров внешнего воздействия (температуры, электромагнитного поля, механического сжатия и пр.) на сложную физическую систему (раствор, смесь, сплав и т.п.) может привести к потере устойчивости исходной фазы и, как следствие (как отклик системы), к ее переходу в новое состояние (с новыми структурными свойствами) [1], [2]. Такой переход может сопровождаться спинодальным расслоением (распадом), выраженным в изменении локальных концентраций компонентов, в образовании сначала зернистой структуры, а затем кластеров и доменов новой фазы.

Простейшее уравнение, способное моделировать структурные превращения, является нелинейное 1-мерное уравнение диффузии с кубической нелинейностью:

$$\dot{w} = -\mathrm{grad}\, V(w) := w'' + \lambda w - w^3, \tag{1}$$

где $w = w(x,t)$ — концентрация изучаемого компонента, $x \in U \subset \mathbb{R}$,

$$V(w) := \int\limits_0^1 \left(\frac{|w'|^2}{2} - \lambda \frac{w^2}{2} + \frac{w^4}{4} \right) dx$$

— интеграл энергии по области $U = [0,1]$. Далее предполагается, что выполнено граничное условие Неймана

$$\frac{\partial w(0,t)}{\partial x} = \frac{\partial w(1,t)}{\partial x} = 0,$$

и выполнено естественное ограничение (на количество компонента в целом):

$$\int\limits_0^1 w(x,t)\, dx = c = \mathrm{const} > \ 0.$$

При исследовании локальных бифуркаций экстремалей часто используется (см. [5]) локальная ритцевская аппроксимация функционала

$$W(\xi) := V(c + \xi_1 e_1 + \xi_2 e_2 + \ldots + \xi_n e_n),$$

построенная по начальным собственным функциям (модам) $e_k := \sqrt{2}\cos(\pi\, k\, x)$ оператора $\mathcal{A} := -\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ при заданных краевых условиях, в соответствующим образом подобранном функциональном пространстве состояний.

В нелокальных задачах также можно использовать ритцевскую аппроксимацию, но при этом для достижения требуемой точности решения необходимо использовать большое количество мод, что приводит к большой размерности аппроксимирующей системы. Снизить ее размерность можно за счет нелинейной ритцевской аппроксимации, например, в виде нелокально продолженной ключевой функции [5,6], то есть переходом к конечномерной задаче $\dot{\xi} = \mathrm{grad}\, W(\xi)$, $\xi \in \mathbb{R}^n$, где $W(\xi) := \inf\limits_{\langle w, e_j \rangle = \xi_j} V(w)$ — ключевая функция Ляпунова-Шмидта.

«Общая» траектория данной динамической системы стремится при $t \to \infty$ к точке минимума функционала энергии W. При $\lambda < \pi^2$ функционал W имеет единственную точку минимума. После перехода λ через π^2 из единственной докритической точки минимума рождается две закритические точки, притягивающие к себе траектории системы.

Ниже изложена методика приближенного вычисления бифурцирующих финальных точек при малых положителных значениях закритического приращения $\delta := \lambda - \pi^2$. Вычисление произведено на основе перехода к ключевой функции.

Во втором разделе проведено вычисление трассы кратчайшего спуска к стабильной концентрации. Результат вычисления предельной концентрации хорошо согласуется с результатом вычисления бифурцирующей концентрации, проведенного в первом разделе (по схеме Ляпунова-Шмидта).

1. ВЫЧИСЛЕНИЕ КЛЮЧЕВОЙ ФУНКЦИИ ВБЛИЗИ КРИТИЧЕСКОГО СОСТОЯНИЯ ПРИ МАЛЫХ ЗАКРИТИЧЕСКИХ ПРИРАЩЕНИЯХ И ВЫЧИСЛЕНИЕ БИФУРЦИРУЮЩИХ ЭКСТРЕМАЛЕЙ

Запишем функцию концентрации в виде

$$w = c + \widetilde{w}, \qquad \int\limits_0^1 \widetilde{w}\, dx = 0. \tag{2}$$

Сужение функционала V на подпространство функций с фиксированным средним (равным c) осуществляется подстановкой (2), в результате которой получаем (с точностью до постоянного слагаемого)

$$\widetilde{V}(\widetilde{w}) := V(c+\widetilde{w}) = \mathrm{const} + \int\limits_0^1 \left(\frac{|\widetilde{w}'|^2}{2} - \widetilde{\lambda}\,\frac{\widetilde{w}^2}{2} + \frac{\widetilde{w}^4}{4} + c\,\widetilde{w}^3 \right) dx\,, \qquad \widetilde{\lambda} = \lambda - \frac{3}{2}\,c^2\,, \tag{3}$$

$$-\mathrm{grad}\,(\widetilde{V})(\widetilde{w}) = \widetilde{w}'' + \widetilde{\lambda}\,\widetilde{w} - \widetilde{w}^3 - 3c\,\widetilde{w}^2 - \alpha\,, \tag{4}$$

$\alpha = \int\limits_0^1 \left(\widetilde{w}^3 + 3c\,\widetilde{w}^2\right)\, dx.$

Для отыскания критического значения параметра λ рассмотрим линеаризованное уравнение (в точке $\widetilde{w} = 0$)

$$\widetilde{w}'' + \widetilde{\lambda}\,\widetilde{w} = 0\,.$$

Минимальным критическим значением параметра $\widetilde{\lambda}$ является число π^2 (соответственно $\lambda = \lambda_* = \pi^2 + \frac{3}{2}\,c^2$). Модой бифуркации при таком значении λ является функция $e = \sqrt{2}\,\cos(\pi\,x)$. При малых $\delta := \lambda - \lambda_*$ главной частью ключевой функции является полином — ритцевская аппроксимация функционала энергии (см. [5]–[6]):

$$W_1(\xi) = W(\xi\,e) = -\delta\,\frac{\xi^2}{2} + \frac{3}{8}\,\xi^4.$$

Амплитуда вариации концентрации определяется уравнением

$$-\delta\,\xi + \frac{3}{2}\xi^3 = 0\,,$$

из которого получим пару ветвей критических точек

$$\xi = \pm\sqrt{\frac{2}{3}\,\delta} + o(\delta).$$

Таким образом, для соответствующей бифурцирующей концентрации получаем асимптотическое представление

$$w = c \pm 2\sqrt{\frac{\delta}{3}}\,\cos(\pi\,x) + o(\delta). \tag{5}$$

2. ПОСТРОЕНИИ «ТРАССЫ КРАТЧАЙШЕГО СПУСКА» К ТОЧКЕ МИНИМУМА

Первый шаг в построении «трассы кратчайшего спуска» к минимуму — решение уравнения (относительно s):

$$\langle \mathrm{grad}\widetilde{V}(a_0 + sh_0), h\rangle = 0. \tag{7}$$

Здесь $h_0 = -\mathrm{grad}\widetilde{V}(a_0)$, $g = -\mathrm{grad}\widetilde{V}$, a_0 — начальная (порождающая) точка. Например, можно положить (для определенности)

$$a_0 = \cos(7\pi x_1) + \varepsilon \sum_{k=1}^{6} \cos(k\pi x)\,, \tag{6}$$

ε — некоторая фиксированная малая величина. Используя для $g(a+sh_0)$ разложение Тейлора, получим соотношение

$$g(a_0 + sh_0) = g(a_0) + s\frac{\partial g}{\partial x}(a_0)h_0 + o(s),$$

$\frac{\partial g}{\partial x}(a_0)$ — производная Фреше градиентного отображения g, и

$$\langle g(a_0 + sh_0), h_0\rangle = \langle g(a_0), h_0\rangle + s\langle(\partial g/\partial x)(a_0)h_0, h_0\rangle + o(|s|).$$

Следовательно, исходя из уравнения (7), можно положить (с некоторой точностью)

$$s = s_0 := -\frac{\langle g(a_0), h_0\rangle}{\langle(\partial g/\partial x)(a_0)h_0, h_0\rangle} = -\frac{\|g(a_0)\|^2}{\langle(\partial g/\partial x)(a_0)h_0, h_0\rangle}\,.$$

В случае рассмотренного нами уравнения (с кубической нелинейностью) поиск значения s_0 можно осуществить более точно — посредством отыскания точки минимума полинома четвертой степени

$$p(s) = s^4 + p_3 s^3 + p_2 s^2 + p_1 s \ \sim\ \widetilde{V}(a_0 + s\,h_0)$$

(рассмотренного с точностью до постоянного множителя и постоянного слагаемого).

Второй шаг кратчайшего спуска — повторение первого шага для новой порождающей точки $a_1 := a_0 + s_0 h_0$ и т.д. Ниже, на рисунке 1, изображены графики, полученные при

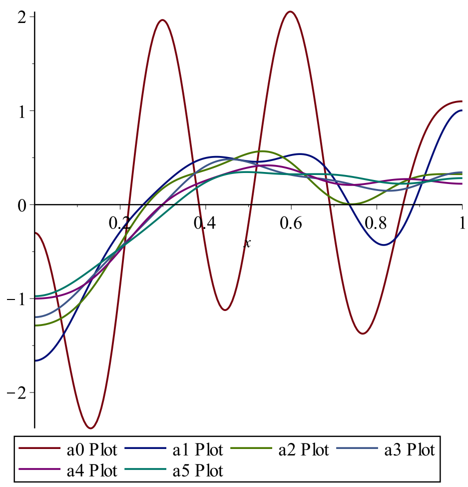

Рис. 1. *Первые пять итераций расчетных функций плотности концентраций.*

$\lambda > \pi^2$ соответствующих промежуточных и финальной функций концентрации после некоторого предварительного подбора коэффициентов разложения Фурье для начальной функции концентрации (3).

На основе данного алгоритма были получены следующие кривые для удельной концентрации инвестиций.

По характеру данного рисунка видно, что он иллюстрирует выход на стабильную концентрацию, заданную асимптотической формулой (5) (в случае минуса).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Скрипов, В. П. Спинодальный распад (Фазовый переход с участием неустойчивых состояний) / В. П. Скрипов, А. В. Скрипов // Успехи физических наук. — 1979. — Т. 123, № 2. — С. 193–231.

2. Численное моделирование спинодального распада на основе вариационного подхода / А. В. Обухов, А. А. Обухов, В. Г. Лебедев, Т. А. Новикова // Вестник Удмурдского университета. Сер.: Физика. Химия. — 2011. — Т. 31, вып. 1. — С. 31–40.

3. Cahn, J. W. Free energy of a nonuniform system. I. Interfacial free energy / J. W. Cahn, J. E. Hilliard // J. Chem. Phys. — 1958. — V. 28. — P. 258–267.

4. Инфельд, Э. Нелинейные волны, солитоны и хаос / Э. Инфельд, Дж. Роуландс. — М. : ФИЗМАТЛИТ, 2006. — 480 с.

5. Даринский, Б. М. Бифуркации экстремалей фредгольмовых функционалов / Б. М. Даринский, Ю. И. Сапронов, С. Л. Царев // Современная математика. Фундаментальные направления. — 2004. — Т. 12. — С. 3–134.

6. Костин, Д. В. Функциональный анализ и многомодовые прогибы упругих систем / Д. В. Костин, Ю. И. Сапронов. — Воронеж : Издательско-полиграфический центр Воронежского государственного университета, 2012. — 207 с.

7. Баев, А. Д. Теоремы о “следах” для одного класса псевдодифференциальных операторов с вырождением / А. Д. Баев, Р. А. Ковалевский, М. Б. Давыдова // Вестн. Воронеж. гос. ун-та. Сер. Физика, математика. — 2015. — № 2. — С. 63–75.

8. Баев А. Д. О свойствах коммутации одного класса вырождающихся псевдодифференциальных операторов с операторами дифференцирования / А. Д. Баев, П. А. Кобылинский, М. Б. Давыдова // Вестн. Воронеж. гос. ун-та. Сер. Физика, математика. — 2014. — № 4. — С. 102–108.

REFERENCES

1. Skripov V.P., Scripov A.V. Spinodal decay (Phase trasfer with non-stable conditions.). [Skripov V.P., Skripov A.V. Spinodal'nyj raspad (Fazovyj perexod s uchastiem neustojchivyx sostoyanij)]. *Uspexi fizicheskix nauk — Physics-Uspekhi*, 1979, vol. 123, iss. 2, pp. 193–231.

2. Obuhov A.V., Obuhov A.A., Lebedev V.G., Novikova T.A. Variational approach to numerical simulation of the spinodal decomposition. [Obuxov A.V., Obuxov A.A., Lebedev V.G., Novikova T.A. Chislennoe modelirovanie spinodal'nogo raspada na osnove variacionnogo podxoda]. *Vestnik Udmurdskogo universiteta. Ser.: Fizika. Ximiya — Bulletin of Udmurt university. Ser.: Phys. Chem*, 2011, vol. 31, iss. 1, pp. 31–40.

3. Cahn J.W., Hilliard J.E. Free energy of a nonuniform system. I. Interfacial free energy. J. Chem. Phys., 1958, vol. 28, pp. 258–267.

4. Infeld E., Roulands J. Nonlinear waves, solitons and chaos. [Infel'd E'., Roulands Dzh. Nelinejnye volny, solitony i xaos]. Moscow: Phys. Math. Lit., 2006, 480 p.

5. Darinsky B.M., Sapronov Y.I., Tsarev S.L. Bifurcations of Fredholm functionals extremals. [Darinskij B.M., Sapronov Yu.I., Carev S.L. Bifurkacii e'kstremalej fredgol'movyx funkcionalov]. *Sovremennaya matematika. Fundamental'nye napravleniya — Modern Mathematics. Fundamental*

directions, 2004, vol. 12, pp. 3–134.

6. Kostin D.V., Sapronov Y.I., Functional analysis and multimode deflections of elastic systems. [Kostin D.V., Sapronov Yu.I., Funkcional'nyj analiz i mnogomodovye progiby uprugix sistem]. Voronezh: Voronezh State University, 2012, 207 p.

7. Baev A. D., Kovalevsky R. A., Davidova M. B. Theorems about the «trecas» for a class of pseudodifferential operators with degeneracy. [Baev A. D., Kovalevskij R. A., Davydova M. B. Teoremy o "sledax" dlya odnogo klassa psevdodifferencial'nyx operatorov s vyrozhdeniem]. *Vestnik Voronezhskogo gosudarstvennogo universiteta. Seriya: Fizika. Matematika — Proceedings of Voronezh State University. Series: Physics. Mathematics*, 2015, no. 2, pp. 63–75.

8. Baev A. D., Kobylinskii P. A., Davidova M. B. On the Properties of Switching a Class of Degenerate Pseudo-Differential Operators with the Operators Of Differentiation. [Baev A. D., Kobylinskij P. A., Davydova M. B. O svojstvax kommutacii odnogo klassa vyrozhdayushhixsya psevdodifferencial'nyx operatorov s operatorami differencirovaniya]. *Vestnik Voronezhskogo gosudarstvennogo universiteta. Seriya: Fizika. Matematika — Proceedings of Voronezh State University. Series: Physics. Mathematics*, 2014, no. 4, pp. 102–108.

Коротких Андрей Сергеевич, аспирант кафедры математического моделирования математического факультета Воронежского государственного университета, Воронеж, Российская Федерация
E-mail: korotkikh.andrey@gmail.com

Korotkikh Andrey Sergeyevich, postgraduate of Department of Mathematical Modelling, faculty of Math, Voronezh State University, Voronezh, Russian Federation
E-mail: korotkikh.andrey@gmail.com