

БИФУРКАЦИИ СТАЦИОНАРНЫХ РЕШЕНИЙ УРАВНЕНИЯ «РЕАКЦИЯ-ДИФФУЗИЯ» И ПЕРЕХОД КОНЦЕНТРАЦИЙ В СТАБИЛЬНОЕ СОСТОЯНИЕ

А. С. Коротких

Воронежский государственный университет

Поступила в редакцию 07.03.2016 г.

Аннотация. Рассмотрено стационарное уравнение «реакция-диффузия» с кубической нелинейностью при краевом условии Неймана и фиксированном значении средней величины искомого бифурцирующего решения. Изложена методика приближенного вычисления бифурцирующих решений при малых и конечных значениях закритического приращения параметра. Вычисления проведены на основе редуцирующей процедуры Ляпунова-Шмидта и опираются на ритцевскую аппроксимацию ключевой функции по набору собственных функций (мод) главной линейной части градиента функционала энергии. Приведена методика оценки размера области функционального пространства, на которой допускается конечномерная редукция Ляпунова-Шмидта. В случае локальной редукции найдена главная часть ключевой функции и вычислены асимптотические представления ветвей бифурцирующих решений по малому закритическому приращению бифуркационного параметра. Выявлена связь процедур поиска решений уравнения «реакция-диффузия» и уравнения Кана-Хилларда (при расширенном краевом условии Неймана). Представлены графические иллюстрации.

Ключевые слова: уравнение «реакция-диффузия», кубическая нелинейность, редуцирующая процедура Ляпунова-Шмидта, ритцевская аппроксимация, градиент функционала энергии.

STABLE CONCENTRATIONS DEFINED BY TWO-DIMENSIONAL EQUATION OF DIFFUSION WITH CUBIC NONLINEARITY

A. S. Korotkikh

Abstract. It's considered stationary «reaction-diffusion» equation with cubic non-linearity for Neumann boundary conditions and fixed average value of the desired bifurcating solutions. It's been presented method of approximate calculation of bifurcating solutions for small and finite values of supercritical parameter increment. Computing is based on the Lyapunov-Schmidt reducing procedure and is leaning on key functions Ritz' approximation of the set eigenfunctions (modes) of main linear part of gradient energy functional. It's performed a technique of evaluating of a functional space size, where Lyapunov-Schmidt reduction can be applied. In case of a local reduction the main part of the key function has been found and asymptotic presentation branches of bifurcating solutions for small supercritical increment of bifurcation parameter is calculated. It's also performed the relation between solutions search procedures for «reaction-diffusion» equations and Cahn-Hilliard equation (with extended Neumann boundary conditions). Graphics are presented.

Keywords: «reaction-diffusion» equation, cubic non-linearity, Lyapunov-Schmidt reducing procedure, Ritz' approximation, energy functional gradient.

ВВЕДЕНИЕ И ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Как известно, структурные изменения вещества изучаются посредством специальным образом подобранных модельных дифференциальных уравнений при краевых условиях Пуассона. Например, при изучении динамики спонтанного разделения фаз (бинарного) вещества (сплава) часто используется уравнение Кана-Хилларда [1]-[6]

$$\dot{w} = \mathcal{D} \operatorname{grad} V(w) := \mathcal{D} \Delta(w^3 - w - \gamma \Delta(w)), \quad (CH)$$

в котором $w = w(x, t)$ — относительная коцентрация компоненты вещества, $x \in U \subset \mathbb{R}^2$, $-1 \leq w \leq 1$, \mathcal{D} — коэффициент диффузии,

$$V(w) := \mathcal{D} \iint_U \left(\frac{(w^2 - 1)^2}{4} + \frac{\gamma}{2} |\nabla U|^2 \right) dx_1 dx_2$$

— интеграл энергии, U — область, занятая сплавом, t — время. Описание равновесных состояний сводится к построению таких решений w уравнения (CH), для которых выполнено расширенное граничное условие Неймана

$$\frac{\partial w}{\partial n} \Big|_{\partial U} = \frac{\partial \Delta(w)}{\partial n} \Big|_{\partial U} = 0,$$

где ∂U — граница области U , n — векторное поле нормалей к границе. Первоочередной интерес представляют стационарные состояния — решения $w = w(x)$ стационарного уравнения Кана-Хилларда

$$\mathcal{D} \Delta(w^3 - w - \gamma \Delta(w)) = 0. \quad (SKH)$$

Очевидно, что в состав решений уравнения (sKH) входят решения стационарного уравнения «реакция-диффузия» с кубической нелинейностью

$$\gamma \Delta(w) + w - w^3 = C - \text{const} \quad (RD)$$

или, что одно и то же, экстремали (критические точки) функционала

$$\bar{V}(w) := V(w) - C[w],$$

где $[w] := \iint_U w dx_1 dx_2$ — среднее значение w .

Поиск экстремалей $V(w)$ можно осуществлять посредством редукции Ляпунова-Шмидта к конечномерной задаче $\operatorname{grad} W(\xi) = 0$, $\xi \in \mathbb{R}^n$, где

$$W(\xi) := \inf_{\langle w, e_j \rangle = \xi_j} \bar{V}(w)$$

— ключевая функция [7]-[8], построенная по начальным собственным функциям (модам) e_j оператора Лапласа на области U (при заданных краевых условиях Пуассона) в соответствующим образом подобранном функциональном пространстве состояний.

С нестационарным уравнением Кана-Хилларда тесно связано динамическое уравнение «реакция-диффузия» с кубической нелинейностью

$$\dot{w} = \gamma \Delta(w) + w - w^3 - C.$$

Данная статья посвящена описанию бифурцирующих ветвей устойчивых (притягивающих) стационарных решений этого уравнения и построению приближенных траекторий спуска в

притягивающие стационарные точки. Показана также связь технологий построения решений для уравнения «реакция-диффузия» и для уравнения Кана-Хилларда, рассмотренного при расширенном краевом условии Неймана.

1. ВАРИАЦИОННЫЙ ПОДХОД К УРАВНЕНИЮ КАНА-ХИЛЛАРДА

Вначале обратимся к функциональным пространствам $\widehat{\mathcal{H}}_0, \widehat{\mathcal{H}}_1, \dots, \widehat{\mathcal{H}}_5$, где $\mathcal{H}_0 = L^2(\Omega)$, $\widehat{\mathcal{H}}_k$ — замыкание по норме $\|w\|_k$ ($k = 1, 2, \dots, 5$) множества тригонометрических полиномов вида $\sum_{p+q=1}^m \xi_{p,q} e_{p,q}$, $p, q \geq 0$, $e_{p,q}(x_1, x_2)$ — собственная функция оператора Δ (при краевом условии Неймана $\frac{\partial w}{\partial n} \Big|_{\partial U} = 0$):

$$e_{p,0}(x_1, x_2) = \sqrt{2} \cos(p\pi x_1), \quad e_{0,q}(x_1, x_2) = \sqrt{2} \cos(q\pi x_2),$$

$$e_{p,q}(x_1, x_2) = 2 \cos(p\pi x_1) \cos(q\pi x_2), \quad pq \neq 0.$$

Собственная функция $e_{p,q}$ отвечает собственному значению $\lambda_{p,q} = -\pi^2(p^2 + q^2)$, совокупность функций $\{e_{p,q}\}$ является ортонормированной системой векторов в $L_2(\Omega)$ [7]. Норма $\|w\|_k$ определена следующими соотношениями:

$$\|w\|_1^2 := - \iint_{\Omega} w \Delta(W) dx_1 dx_2 = \iint_{\Omega} |\nabla(w)|^2 dx_1 dx_2,$$

$$\|w\|_2^2 := \iint_{\Omega} w \Delta^2(W) dx_1 dx_2 = \iint_{\Omega} (\Delta(w))^2 dx_1 dx_2,$$

$$\|w\|_3^2 := - \iint_{\Omega} w \Delta^3(W) dx_1 dx_2 = \iint_{\Omega} |\nabla(\Delta(w))|^2 dx_1 dx_2,$$

$$\|w\|_4^2 := \iint_{\Omega} w \Delta^4(W) dx_1 dx_2 = \iint_{\Omega} (\Delta^2(w))^2 dx_1 dx_2,$$

$$\|w\|_5^2 := - \iint_{\Omega} w \Delta^5(W) dx_1 dx_2 = \iint_{\Omega} |\nabla(\Delta^2(w))|^2 dx_1 dx_2.$$

Для каждого $k \in \{2, \dots, 5\}$ линейный оператор $\mathcal{A} := -\Delta : \widehat{\mathcal{H}}_k \mapsto \widehat{\mathcal{H}}_{k-2}$ является изоморфизмом. При этом оператор \mathcal{A} положительный и диагонализируемый:

$$\mathcal{A} : \sum_{p,q} \xi_{p,q} e_{p,q} \mapsto \sum_{p,q} |\lambda_{p,q}| \xi_{p,q} e_{p,q}, \quad p, q \geq 0, \quad p + q \geq 1.$$

Пусть \mathcal{B} — положительный и симметричный оператор, для которого $\mathcal{B}^2 = \mathcal{A}$ (то есть \mathcal{B} — положительный квадратный корень из \mathcal{A}). Оператор \mathcal{B} изоморфно действует из $\widehat{\mathcal{H}}_k$ на $\widehat{\mathcal{H}}_{k-1}$, $\forall k \geq 1$:

$$\mathcal{B} : \sum_{p,q} \xi_{p,q} e_{p,q} \mapsto \sum_{p,q} \sqrt{|\lambda_{p,q}|} \xi_{p,q} e_{p,q} = \pi \sum_{p,q} \sqrt{p^2 + q^2} \xi_{p,q} e_{p,q}, \quad p + q \geq 1.$$

Из этого соотношения следует, что

$$\|w\|_k = \|\mathcal{B}(w)\|_{k-1}^2 \quad \forall k.$$

Уравнение Кана-Хилларда допускает представление в «операторном» виде

$$\dot{w} = -\mathcal{B}^2 \text{grad } V(w), \quad w \in \widehat{\mathcal{H}}_4.$$

и, следовательно, оно линейно эквивалентно уравнению

$$\dot{w} = -\mathcal{B} \text{grad } V(\mathcal{B} w), \quad w \in \widehat{\mathcal{H}}_5, \quad (GKH)$$

у которого правая часть — антиградиент функционала $V(\mathcal{B} w)$. Таким образом, исследование решений уравнения Кана-Хилларда сводится к исследованию решений градиентного уравнения (GKH) в $\widehat{\mathcal{H}}_5$. Оно естественно продолжается (вместе с функционалом $V(\mathcal{B} w)$) на пространство $\widehat{\mathcal{H}}_4$.

Последнее замечание позволяет утверждать, что для исследования траекторий динамической системы Кана-Хилларда можно привлекать вариационный подход и, в частности, использовать метод прямого спуска [7], [12]. В следующем разделе мы более подробно рассмотрим этот подход применительно к родственной динамической системе «реакция-диффузия».

2. ЛОКАЛЬНЫЙ АНАЛИЗ БИФУРЦИРУЮЩИХ СТАЦИОНАРНЫХ РЕШЕНИЙ УРАВНЕНИЯ «РЕАКЦИЯ-ДИФФУЗИЯ»

Рассмотрим уравнение диффузии с кубической нелинейностью, записанное в форме

$$\dot{w} = -\text{grad } (V(w) - C[w]) = \Delta w + \lambda w - w^3 - C, \quad (1)$$

где $w = w(x, t)$ — концентрация изучаемого компонента, $x = x(x_1, x_2)$, $x \in U = [0, 1] \times [0, 1] \subset \mathbb{R}^2$,

$$V(w) := \iint_{\Omega} \left(\frac{|\nabla w|^2}{2} - \lambda \frac{w^2}{2} + \frac{w^4}{4} \right) dx_1 dx_2$$

— интеграл энергии по области $U = [0, 1] \times [0, 1] \subset \mathbb{R}^2$. Будем предполагать, что выполнено граничное условие Неймана $\left. \frac{\partial w}{\partial n} \right|_{\partial U} = 0$ и выполнено естественное ограничение на концентрацию вещества в целом:

$$[w] := \iint_{\Omega} w(x_1, x_2) dx_1 dx_2 = K > 0. \quad (K)$$

При исследовании локальных бифуркаций экстремалей часто используется (см. [8]–[10]) локальная ритцевская аппроксимация функционала

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

построенная по начальным собственным функциям (модам) e_j оператора Лапласа на области U (при заданных краевых условиях, в соответствующим образом подобранном функциональном пространстве состояний):

$$\begin{aligned} e_0 &= 1, \quad e_1 = \sqrt{2} \cos(\pi x_1), \quad e_2 = \sqrt{2} \cos(\pi x_2), \quad e_3 = 2 \cos(\pi x_1) \cos(\pi x_2), \\ e_4 &= \sqrt{2} \cos(2\pi x_1), \quad e_5 = \sqrt{2} \cos(2\pi x_2), \quad e_6 = 2 \cos(2\pi x_1) \cos(\pi x_2), \\ e_7 &= 2 \cos(\pi x_1) \cos(2\pi x_2), \quad e_8 = 2 \cos(2\pi x_1) \cos(2\pi x_2), \quad \dots \end{aligned}$$

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 использования нелинейной ритцевской аппроксимации, например, в виде

нелокально продолженной ключевой функции. Дальнейший анализ можно осуществить переходом к конечномерной задаче

$$\text{grad } W(\xi) = 0, \quad \xi \in \mathbb{R}^n,$$

где

$$W(\xi) := \inf_{\langle w, e_j \rangle = \xi_j} \bar{V}(w)$$

— нелокально продолженная ключевая функция Ляпунова-Шмидта.

Запишем искомую функцию концентрации w в виде

$$w = K + \tilde{w}, \quad \iint_{\Omega} \tilde{w} dx_1 dx_2 = 0. \quad (2)$$

Сужение функционала V на подпространство функций с фиксированным средним (равным K) осуществляется подстановкой (2), в результате которой получаем $\tilde{V}(\tilde{w}) := V(K + \tilde{w})$ на $\hat{\mathcal{H}}_2$:

$$\tilde{V}(\tilde{w}) = \iint_{\Omega} \left(\frac{|\nabla \tilde{w}|^2}{2} - \tilde{\lambda} \frac{\tilde{w}^2}{2} + \frac{\tilde{w}^4}{4} + K \tilde{w}^3 \right) dx_1 dx_2, \quad \tilde{\lambda} = \lambda - \frac{3}{2} K^2, \quad (3)$$

и, соответственно,

$$-\text{grad}(\tilde{V})(\tilde{w}) = \Delta \tilde{w} + \tilde{\lambda} \tilde{w} - \tilde{w}^3 - 3K \tilde{w}^2 - \alpha, \quad (4)$$

$\alpha = \iint_{\Omega} (\tilde{w}^3 + 3K \tilde{w}^2) dx_1 dx_2$ (в тройке пространств $\hat{\mathcal{H}}_2 \subseteq \hat{\mathcal{H}}_0 \subseteq \hat{\mathcal{H}}_0$, см. [8]-[9]). Для отыскания критического значения параметра λ рассмотрим линеаризованное уравнение (в точке $\tilde{w} = 0$) $\Delta \tilde{w} + \tilde{\lambda} \tilde{w} = 0$. Минимальным критическим значением параметра $\tilde{\lambda}$ является число π^2 (соответственно $\lambda_* = \pi^2 + \delta$). Модами бифуркации при таком значении λ являются функции

$$e_1 = \sqrt{2} \cos(\pi x_1), \quad e_2 = \sqrt{2} \cos(\pi x_2).$$

Теорема 1.. При малых значениях концентрации и при малых $\delta := \lambda - \lambda_*$ главной частью ключевой функции, соответствующей функционалу (3), является многочлен (4-ой степени)

$$U(\xi_1, \xi_2) = -\frac{\delta}{2}(\xi_1^2 + \xi_2^2) + \frac{3}{8}(\xi_1^4 + \xi_2^4) + \frac{1}{2}\xi_1^2 \xi_2^2.$$

Доказательство вытекает из определяющего ключевую функцию соотношения

$$W_{\delta}(\xi_1, \xi_2) := \inf_{\langle \tilde{w}, e_1 \rangle = \xi_1, \langle \tilde{w}, e_2 \rangle = \xi_2} \tilde{V}(\tilde{w}),$$

и из того, что

$$\begin{aligned} W_{\delta}(\xi_1, \xi_2) &= \tilde{V}(\xi_1 e_1 + \xi_2 e_2) + o(|\xi_1|^2 + |\xi_2|^2)^2 = \\ &= -\frac{\delta}{2}(\xi_1^2 + \xi_2^2) + \frac{a}{4}(\xi_1^4 + \xi_2^4) + \frac{b}{2}\xi_1^2 \xi_2^2 + o(|\xi_1|^2 + |\xi_2|^2)^2 \end{aligned} \quad (5)$$

(см. [8]-[9]). Здесь учтено, что $\iint_{\Omega} \tilde{w}^3 dx_1 dx_2 = 0$, если $\tilde{w} = \xi_1 e_1 + \xi_2 e_2$. Несложные вычисления показывают, что

$$\begin{aligned} a &= \iint_{\Omega} e_1^4 dx_2 dx_1 = \iint_{\Omega} e_2^4 dx_2 dx_1 = \frac{3}{2}, \\ b &= \iint_{\Omega} e_1^2 e_2^2 dx_1 dx_2 = \left(\int_0^1 e_1^2 dx_1 \right) \left(\int_0^1 e_2^2 dx_2 \right) = 1. \end{aligned}$$

Такой вид главной части ключевой функции связан, во-первых, с ее симметрией относительно преобразования $(\xi_1, \xi_2) \rightarrow (\xi_2, \xi_1)$ и, во-вторых, с тем, что кубическая часть в тейлоровском разложении функционала V обнуляется на $\xi_1 e_1 + \xi_2 e_2$. Из теоремы 1. вытекает следующее утверждение.

Теорема 2.. *Для функционала (3) вблизи нуля при малых концентрациях имеется ветвь устойчивых функций концентраций вида*

$$\tilde{w} = K + \varepsilon(e_1 + e_2) + o(\varepsilon),$$

где $\varepsilon = \text{const } \delta^{\frac{1}{2}}$ — малый параметр.

Таким образом удалось получить первое асимптотическое слагаемое за критической ветви бифурцирующих экстремалей — по информации о главной части ключевой функции.

3. НЕЛОКАЛЬНАЯ РЕДУКЦИЯ ЛЯПУНОВА-ШМИДТА С ПРИМЕНЕНИЕМ ПРИНЦИПА СЖАТЫХ ОТОБРАЖЕНИЙ

При «конечных» значениях δ возникает необходимость применения других вычислительных средств, например, принципа сжатых отображений, нелинейного метода Галеркина-Ритца и пр. [10]-[15].

Для осуществления нелокальной редукции Ляпунова-Шмидта запишем соответствующее уравнение $\text{grad } \bar{V}(w) = 0$ в виде операторного уравнения

$$f(w) := \mathcal{A}w - \lambda w - g(w) = 0, \quad w \in E, \tag{10}$$

где

$$E = \left\{ w \in \hat{\mathcal{H}}_2(\Omega) : \frac{\partial w}{\partial n} \Big|_{\partial\Omega} = 0, \quad \iint_{\Omega} w(x_1, x_2) dx_1 dx_2 = 0 \right\}.$$

$$\mathcal{A} = -\Delta, \quad g(w) := -(w^3 + 3K w^2).$$

Оператор f действует из E в $F = \hat{\mathcal{H}}_0(\Omega)$. Линейный оператор \mathcal{A} является положительным и диагонализируемым:

$$\sum_{p,q=1}^{\infty} \xi_{p,q} e_{p,q} \mapsto \sum_{p,q=1}^{\infty} \lambda_{p,q} \xi_{p,q} e_{p,q},$$

здесь $e_{p,q}(x,y)$ — собственная функция оператора \mathcal{A} .

Запишем, далее, рассмотренную краевую задачу в виде операторного уравнения

$$f(w) := \mathcal{A}w - \lambda w - g(w) + c = 0, \quad w \in \hat{\mathcal{H}}_2$$

и перепишем его в виде (продолжив уравнение на $\hat{\mathcal{H}}_1$)

$$w = \mathcal{A}^{-1}(g(w) + \lambda w - c), \quad w \in \hat{\mathcal{H}}_1. \tag{11}$$

Используя процедуру ортогонального разложения пространства в сумму подпространств, разобьем уравнение (11) в систему двух уравнений

$$\left. \begin{aligned} u - \mathcal{A}_1^{-1}(g_1(w) + \lambda u - a) &= 0, \\ v - \mathcal{A}_2^{-1}(g_2(w) + \lambda v - b) &= 0, \end{aligned} \right\} \tag{12}$$

где $\mathcal{A}_1 := \mathcal{A}|_N$, $\mathcal{A}_2 := \mathcal{A}|_{N^\perp \cap E}$, $N := \text{Lin}(e_1, e_2)$. Второе уравнение системы (12) рассматривается в подпространстве $N^\perp \cap \widehat{\mathcal{H}}_1$. Из спектральных свойств оператора \mathcal{A} вытекает, что норма оператора $\mathcal{A}_2^{-1} : N^\perp \cap \widehat{\mathcal{H}}_1 \rightarrow N^\perp \cap \widehat{\mathcal{H}}_1$ существенно меньше единицы и поэтому оператор

$$S(v) := \mathcal{A}_2^{-1}(g_2(u + v, u + v) + \lambda v - b)$$

переводит некоторый шар $\|v\|_{\widetilde{H}^0} \leq L$ (в $N^\perp \cap \widehat{\mathcal{H}}_1$) в себя, являясь при этом сжимающим. Это означает, что решения второго уравнения системы (12) можно получать в аналитической форме

$$v = \Phi(u), \tag{13}$$

с любой наперед заданной точностью, посредством итераций $v_n = S(v_{n-1})$. Подставив выражение (13) в первое уравнение системы (12), получим ключевое уравнение

$$\tau(u) := f_1(u + \Phi(u)) = 0 \tag{14}$$

на конечномерном пространстве N . Все аналитические и топологические свойства исходного уравнения и его решений наследуются ключевым уравнением и его решениями. Связь между решениями исходного и ключевого уравнений осуществляется формулой

$$w = u + \Phi(u).$$

Уравнение (14) также является потенциальным с потенциалом в виде ключевой функции

$$W(u) := V(u + \Phi(u)), \quad u \in N.$$

Поиск и анализ экстремалей функционала V можно осуществить непосредственно изучив экстремали ключевой функции W . Вычисление функции W и анализ ее критических точек осуществляется по известным технологиям в [8],[9].

4. ОБЛАСТЬ РЕДУЦИРУЕМОСТИ СТАЦИОНАРНОГО УРАВНЕНИЯ

Посредством оценки размера образа отображения S и его константы Липшица можно точно указать область, на которой допускается конечномерная редукция уравнения (11). Предварительно заметим, что имеют место следующие неравенства:

$$\|\mathcal{A}_2^{-1}(v)\|_1 \leq \frac{1}{2\pi^2} \|v\|_1, \quad \forall v \in N^\perp \cap \widetilde{H}_1(\Omega), \quad \|w\|_{C^0(\Omega)} < \sqrt{2}\|w\|_1, \quad \forall w \in \widetilde{H}_1, \tag{15}$$

$$\|w^3\|_1 = 3 \left(\iint_{\Omega} |w^2 \nabla w|^2 dx_1 dx_2 \right)^{\frac{1}{2}} \leq 3 \|w\|_{C^0(\Omega)}^2 \|w\|_1 \leq 6 \|w\|_1^3. \tag{16}$$

$$\|w^2\|_1 = 2 \left(\iint_{\Omega} |w \nabla w|^2 dx_1 dx_2 \right)^{\frac{1}{2}} \leq 2 \|w\|_{C^0(\Omega)} \|w\|_1 \leq 2\sqrt{2} \|w\|_1^2. \tag{17}$$

Пусть $w \in T_L = \{w \in \widetilde{H}_1(\Omega) : \|w\|_1 \leq L\}$. Из оценок (15)-(16) получаем

$$\|S(v)\|_1 = \|\mathcal{A}_2^{-1}(\lambda v + g_2(w) - b)\|_1 \leq \frac{1}{2\pi^2} \left(\lambda L + 6L^3 + 2\sqrt{2}KL^2 + \beta \right), \tag{18}$$

где $\beta = \|b\|_1$. Следовательно, если $\|S(v)\|_1 \leq L$, то оператор S переводит шар T_L в себя. Последнее утверждение справедливо в случае выполнения соотношения

$$\frac{1}{2\pi^2} \left(\lambda L + 6L^3 + 2\sqrt{2}KL^2 + \beta \right) \leq L$$

или

$$L^3 - pL^2 + qL + r \leq 0, \tag{19}$$

где $p = \frac{\sqrt{2}}{3}K$, $q = \frac{2\pi^2 - \lambda}{6}$, $r = \frac{\beta}{6}$. Для обеспечения свойства сжимаемости оператора $S : T_L \rightarrow T_L$ обратимся к оценке нормы разности значений S в произвольной паре точек v_1, v_2 :

$$\begin{aligned} & \|S(v_2) - S(v_1)\|_1 = \\ & \|\mathcal{A}_2^{-1}(\lambda(v_2 - v_1) + ((u + v_2)^3 - (u + v_1)^3) + 3K((u + v_2)^2 - (u + v_1)^2))\|_1 \leq \\ & \leq \frac{1}{2\pi^2}(\lambda + 3L(2K + L))\|v_2 - v_1\|_1. \end{aligned}$$

Получаем то, что для обеспечения свойства сжимаемости S достаточно потребовать выполнения условия

$$\gamma := \frac{1}{2\pi^2}(\lambda + 3L(2K + L)) < 1,$$

или, что одно и то же, условия

$$\lambda + 3L(2K + L) < 2\pi^2. \tag{20}$$

Таким образом, установлено следующее утверждение.

Теорема 3.. При выполнении условий (19)-(20) и при $\|u\|_1 \leq L$ оператор

$$S(v) := \mathcal{A}_2^{-1}(\lambda v - (u + v)^3 - 3K(u + v)^2 - b)$$

переводит шар $T_L = \{v \in \tilde{H}_1(\Omega) : \|v\|_1 \leq L\}$ в себя и является сжимающим отображением $T_L \rightarrow T_L$.

Замечание. Константа γ позволяет оценить скорость сходимости итераций $v_{m+1}(u) = S(v_m(u))$:

$$\|v_{m+1}(u) - \Phi(u)\|_1 \leq \gamma^m \frac{\mathcal{D}}{1 - \gamma}, \quad \mathcal{D} = \|v_1(u) - v_0(u)\|_1.$$

5. ПОСТРОЕНИЕ КЛЮЧЕВОЙ ФУНКЦИИ МЕТОДОМ ГРАДИЕНТНОГО СПУСКА

При построении нелокальной ключевой функции можно также воспользоваться прямой процедурой кратчайшего спуска (см. [7],[11]) в точку минимума V . Первым шагом этой процедуры является выбор величины сдвига вдоль градиента из начальной (порождающей) точки, с целью уменьшения значения функционала энергии.

Пусть e_1, \dots, e_n — фиксированный базис ритцевской аппроксимации (базис Ритца), составленный из собственных функции оператора Лапласа (в порядке возрастания номеров собственных функций без пропусков отдельных функций), и пусть e_1, e_2 — основные моды, по которым допускается вырождение. Пусть при этом $V_R(\xi) := V\left(\sum_{k=1}^n \xi_k e_k\right)$ — ритцевская аппроксимация функционала энергии (по базису Ритца).

В качестве нулевого приближения к функции

$$W(\hat{\xi}) := \inf_{\langle w, e_j \rangle = \xi_j, j=1,2} \overline{V}_R(w), \quad \hat{\xi} = (\xi_1, \xi_2),$$

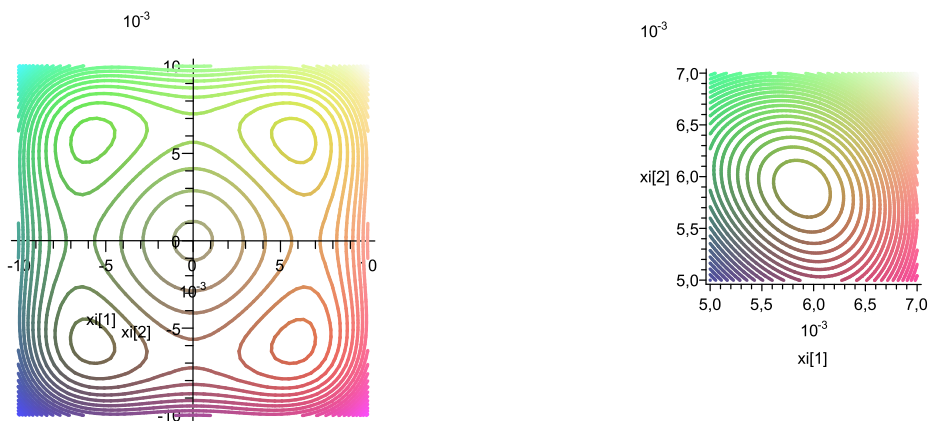


Рис. 1. Линии уровня ключевой функции и локализация ее точки минимума при $K = 0.5$, $\lambda = \pi^2 + 0.4$

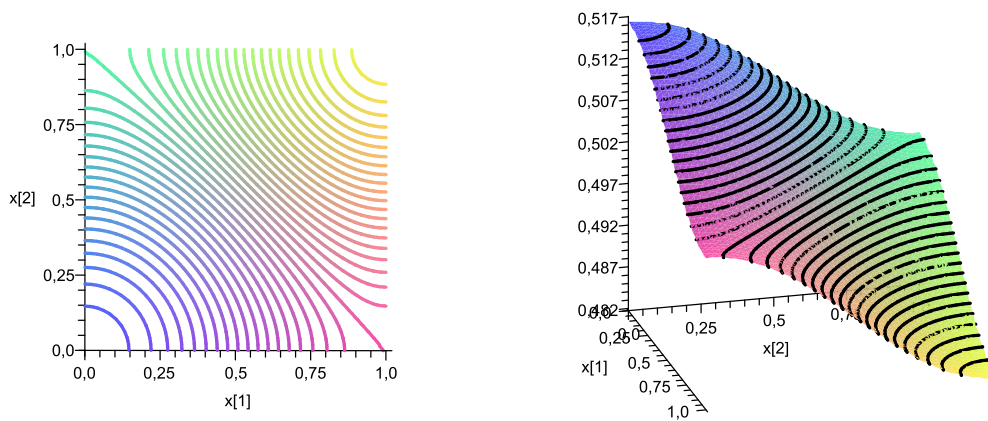


Рис. 2. Линии уровня и 3D-график функции концентрации при $K = 0.5$, $\lambda = \pi^2 + 0.4$.

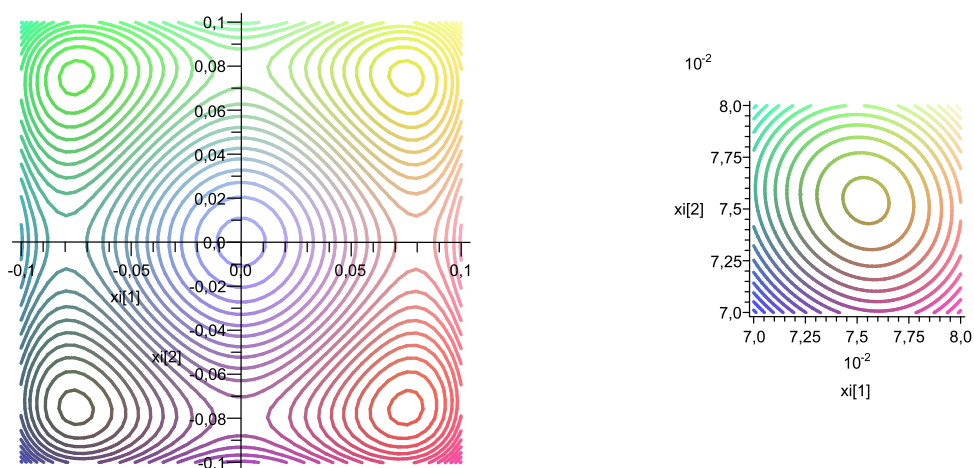


Рис. 3. Линии уровня ключевой функции и локализация ее точки минимума при $K = 0.5$, $\lambda = 15$.

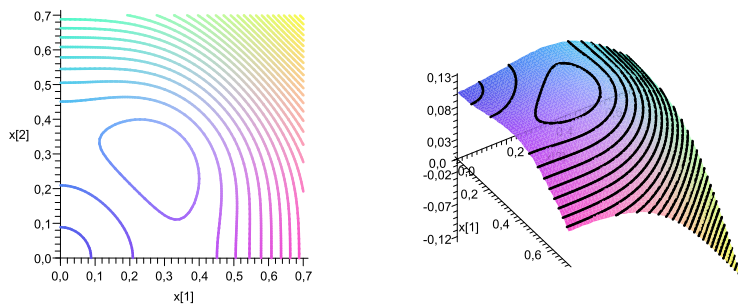


Рис. 4. Линии уровня и 3D-график функции концентрации при $K = 0.5$, $\lambda = 15$

рассматривается функция

$$W_0(\hat{\xi}) := V(\xi_1 e_1 + \xi_2 e_2)$$

(ритцевская аппроксимация по модам e_1, e_2).

Первый шаг заключен в выборе «поправки» к W_0 , дающей первое приближение к $W(\hat{\xi})$ в виде

$$W_1(\hat{\xi}) := V_R(a(\hat{\xi})),$$

где

$$a(\hat{\xi}) = a_0 - s_0 g_0, \quad a_0 = (\xi_1, \xi_2, 0, \dots, 0), \quad g_0 := \text{grad}_{\xi_3, \dots, \xi_n} V_R(a_0),$$

$$s_0 = \frac{\|g_0\|^2}{\langle G_0 g_0, g_0 \rangle},$$

где $G_0 = \text{hess}_{\xi_3, \dots, \xi_n} V_R(a_0)$ — матрица Гессе (в нулевой порождающей точке a_0) функции V_R по переменным ξ_3, \dots, ξ_n (см. [12], [13]).

Второй шаг — повторение первого шага для новой порождающей точки a_1 и т.д. На шаге с номером k делается выбор функциональной величины сдвига $s_k = s_k(\hat{\xi})$ вдоль антиградиента посредством формулы

$$s_k = \frac{\|g_k\|^2}{\langle G_k g_k, g_k \rangle}, \tag{21}$$

где $G_k = \text{hess}_{\xi_3, \dots, \xi_n} V_R(a_k)$ — матрица Гессе (в точке a_k) функции V_R по переменным ξ_3, \dots, ξ_n .

К сожалению, выбор функциональной величины $s_k = s_k(\hat{\xi})$ сдвига (вдоль антиградиента) в виде (21) приводит к повышенному росту информационного потока, сопровождающего вычисления, и, как следствие, к существенному замедлению работы алгоритма и к быстрому достижению предела возможностей вычислительных устройств. Это препятствие можно преодолеть, заменив функциональный множитель (21) числовым множителем σ , служащим универсальной оценкой снизу всех функциональных множителей вида (21). Подбор такого ограничителя снизу можно осуществить, используя следующие легко проверяемые неравенства (для произвольной симметричной матрицы $G = (g_{j,k})$):

$$\|G\|_1 \leq \|G\|_2 \leq \|G\|_3,$$

где

$$\|G\|_1 := \max\{\mu : \mu \in \text{spec}(G)\}, \quad \|G\|_2 := \sqrt{\text{tr}(G^T G)}, \quad \|G\|_3 := \sum_{j,k} |g_{j,k}|.$$

Ниже изображены границы кластеров концентрации при соответствующих коэффициентах Фурье функции концентрации a_k (полученные выделением нулевых линий уровня соответствующих промежуточных и финальной функций).

Вычисления, проводимые на основании изложенных выше теоретических положений, дают возможность визуализировать критические точки (вычислить сколь угодно точно координаты, определить их характер и расположение). А также с любой наперед заданной точностью локализовать притягивающие точки: сначала вычислить точки минимума ключевой функции, а затем по связывающей формуле определить притягивающие точки уравнения ДР. Прямая графическая локализация позволяет сколь угодно точно определить координаты точек минимума для ключевой функции.

В пределах заданного уровня точности получаем координатное изображение (0.093, 0.093) для точки минимума, лежащей на биссектрисе координатного угла. Этой точке соответствует стабильная концентрация.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. 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.
2. Cahn, J. W. On spinodal decomposition / J. W. Cahn // Acta Metall. — 1961. — V. 9. — P. 795–801.
3. Скрипов, В. П. Спинодальный распад (Фазовый переход с участием неустойчивых состояний) / В. П. Скрипов, А. В. Скрипов // УФН. — 1979. — Т. 123, вып. 2. — С. 193–231.
4. Cahn J. W. The Cahn-Hilliard equation with a concentration dependent mobility: motion by minus the Laplacian of the mean curvature / J. W. Cahn, C. M. Elliott, A. Novick-Cohen // Eur. J. Appl. Math. — 1996. — V. 7. — P. 287–301.
5. Инфельд Э. Нелинейные волны, солитоны и хаос / Э. Инфельд, Дж. Роуланс. — М. : ФИЗМАТЛИТ, 2006. — 480 с.
6. 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.
7. Михлин, С. Г. Вариационные методы в математической физике / С. Г. Михлин. — М. : Наука, 1970. — 512 с.
8. Даринский, Б. М. Бифуркации экстремалей фредгольмовых функционалов / Б. М. Даринский, Ю. И. Сапронов, С. Л. Царев // Современная математика. Фундаментальные направления. — 2004. — Т. 12. — С. 3–140.
9. Костин, Д. В. Функциональный анализ и многомодовые прогибы упругих систем : учебное пособие / Д. В. Костин, Ю. И. Сапронов. — Воронеж : Издательско-полиграфический центр Воронежского государственного университета, 2012. — 207 с.
10. Мари Дж. Нелинейные дифференциальные уравнения в биологии. Лекции о моделях / Дж. Мари. — М. : Мир, 1983. — 397 с.
11. Красносельский, М. А. Итерационный процесс с минимальными невязками / М. А. Красносельский, С. Г. Крейн // Матем. сб-к. — 1952. — Т. 31 (73), вып. 2. — С. 315–334.
12. Лемешко, А. А. О равномерной сходимости с производными галеркинских приближений к решениям уравнений с параметрами / А. А. Лемешко // Математические модели и операторные уравнения. — 2003. — Т. 2. — С. 94–103.
13. Лемешко, А. А. О равномерной сходимости ньютоновских приближений к решениям уравнений с параметрами / А. А. Лемешко // Сборник трудов молодых ученых математического факультета ВГУ. — 2003. — С. 74–83.
14. Костина, Т. И. Нелокальное вычисление ключевых функций в задаче о периодических решениях вариационных уравнений / Т. И. Костина // Вестн. Воронеж. гос. ун-та. Сер. Физика, математика. — 2011. — № 1. — С. 181–186.
15. Сапронов, Ю. И. Моделирование диффузорных течений жидкости посредством редуцированных уравнений / Ю. И. Сапронов // Вестник ЮУрГУ. Сер: Математическое моде-

лирование и программирование. — 2014. — Т. 7, № 2. — С. 74–86.

16. 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.

REFERENCES

1. 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.
2. Cahn J.W. On spinodal decomposition. *Acta Metall.*, 1961, vol. 9, pp. 795–801.
3. Skripov V.P., Scripov A.V. Spinodal decay (Phase transfer with non-stable conditions.). [Skripov V.P., Skripov A.V. Spinodal'nyj raspad (Fazovyj perexod s uchastiem neustojchivyx sostoyanij)]. *Uspehi fizicheskix nauk — Physics-Uspekhi*, 1979, vol. 123, iss. 2, pp. 193–231.
4. Cahn J.W., Elliott C.M., Novick-Cohen A. The Cahn-Hilliard equation with a concentration dependent mobility: motion by minus the Laplacian of the mean curvature. *Eur. J. Appl. Math.*, 1996, vol. 7, pp. 287–301.
5. Infeld E., Roulands J. Nonlinear waves, solitons and chaos. [Infel'd E., Roulands Dzh. Nelinejnye volny, solitony i kaos]. Moscow: Phys. Math. Lit., 2006, 480 p.
6. Obuhov A.V., Obuhov A.A., Lebedev V.G., Novikova T.A. Variational approach to numerical simulation of the spinodal decomposition. [Obuhov A.V., Obuhov A.A., Lebedev V.G., Novikova T.A. Chislennoe modelirovanie spinodal'nogo raspada na osnove variacionnogo podxoda]. *Vestnik Udmurtskogo universiteta. Ser.: Fizika. Ximiya — Bulletin of Udmurt university. Ser.: Phys. Chem*, 2011, vol. 31, iss. 1, pp. 31–40.
7. Mixlin S.G. Variational methods in mathematical physics. [Mixlin S.G. Variacionnye metody v matematicheskoj fizike]. Moscow : Nauka, 1970, 512 p.
8. Darinskii B.M., Saponov Y.I., Tsarev S.L. Bifurcations of extremals Fredholm functional. [Darinskij B.M., Saponov Yu.I., Carev S.L. Bifurkacii e'kstremalej fredgol'movyx funkcionalov]. *Sovremennaya matematika. Fundamental'nye napravleniya — Contemporary Mathematics. Fundamental Directions*, 2004, vol. 12, pp. 3–140.
9. Kostin D.V., Saponov Y.I. Functional analysis and multi- Deflections of Elastic Systems: Tutorial. [Kostin D.V., Saponov Yu.I., Funkcional'nyj analiz i mnogomodovye progiby uprugix sistem: uchebnoe posobie]. Voronezh: Publishing and printing center of Voronezh State University, 2012, 207 p.
10. Mary J. Non-linear differential equations in biology. Lectures about the models. [Mari Dzh. Nelinejnye differencial'nye uravneniya v biologii. Lekcii o modelyax]. Moscow: Mir, 1983, 397 p.
11. Krasnoselky M.A., Krein S.G. The iterative process minimal residuals. [Krasnosel'kij M.A., Krejn S.G. Iteracionnyj process s minimal'nymi nevyazkami]. *Matematicheskij sbornik*.
12. Lemeshko A.A. Uniform convergence with derivatives Galerkin approximations to the solutions of equations with parameters. [Lemeshko A.A. O ravnomernoj sxodimosti s proizvodnymi galerkinskix priblizhenij k resheniyam uravnenij s parametrami]. *Matematicheskie modeli i operatornye uravneniya — Mathematical models and operator equations*, 2003, vol. 2, pp. 94–103.
13. Lemeshko A.A. Uniform convergence of Newton's approximations to solutions of equations with parameters. [Lemeshko A.A. O ravnomernoj sxodimosti n'yutonovskix priblizhenij k resheniyam uravnenij s parametrami]. *Sbornik trudov molodyx uchenyx matematicheskogo fakul'teta VGU — Proceedings of young scientists mathematical faculty of VSU*, 2003, pp. 74–83.
14. Kostina T.I. Nonlocal calculation of key functions in the problem of Periodic solutions of variational equations. [Kostina T.I. Nelokal'noe vychislenie klyuchevyx funkcij v zadache o periodicheskix resheniyax variacionnyx uravnenij]. *Vestnik Voronezhskogo gosudarstvennogo universiteta. Seriya: Fizika. Matematika — Proceedings of Voronezh State University. Series: Physics. Mathematics*, 2011, no. 1, pp. 181–186.

15. Saprionov Y.I. Simulation of fluid flows diffuser by the reduced equations. [Saprionov Yu.I. Modelirovanie diffuzornyx techenij zhidkosti posredstvom reducirovannykh uravnenij]. *Vestnik YuUrGU. Ser: Matematicheskoe modelirovanie i programmirovaniye — Bulletin of South Ural State University. Ser: Mathematical modeling and programming*, 2014, vol. 7, no. 2, pp. 74–86.

16. 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’nykh operatorov s vyrozhdeniem]. *Vestnik Voronezhskogo gosudarstvennogo universiteta. Seriya: Fizika. Matematika — Proceedings of Voronezh State University. Series: Physics. Mathematics*, 2015, no. 2, pp. 63–75.

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

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