

На правах рукописи



Коротких Андрей Сергеевич

**Динамика концентраций, определяемая
нелинейным уравнением
«реакция-диффузия» и его обобщениями**

01.01.01 — вещественный, комплексный и функциональный анализ

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук



008706491

4 АПР 2018

В О Р О Н Е Ж — 2018

Работа выполнена в Воронежском государственном университете

Научный руководитель:

Сапронов Юрий Иванович, доктор физико-математических наук,
профессор, Воронежский государственный университет

Официальные оппоненты:

Кадченко Сергей Иванович, доктор физико-математических наук,
профессор, Магнитогорский государственный технический университет им. Г. И. Носова, физико-математический факультет, кафедра прикладной математики и информатики, заведующий

Корнев Сергей Викторович, доктор физико-математических наук,
доцент, Воронежский государственный педагогический университет,
кафедра высшей математики, доцент

Ведущая организация: **Челябинский государственный университет**

Защита состоится 22 мая 2018 г. в 16.30 на заседании диссертационного совета Д 212.038.22 в Воронежском государственном университете по адресу: 394006, Воронеж, Университетская пл., 1, ауд. 335.

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке Воронежского государственного университета, а также на сайте
http://www.science.vsu.ru/dissertations/5680/Диссертация_Коротких_А.С..pdf.

• Автореферат разослан "19" марта 2018 г.

Ученый секретарь

Диссертационного Совета Д 212.038.22

доктор физико-математических наук,
профессор

Гликлик Юрий Евгеньевич



Актуальность темы. Тема диссертации находится на стыке двух направлений из списка «Основные научные направления ВГУ» (раздел «Наука» в портале ВГУ): 1. Аналитические, геометрические и численные методы исследования дифференциальных уравнений; 2. Теория функций и функциональный анализ.

Анализом бифуркационных эффектов начали заниматься еще в XIX веке, и к настоящему времени накопилось большое количество методик по их прогнозированию и «полезному использованию», появились многочисленные публикации и монографии. Однако потребность в развитии новых методов бифуркационного анализа, соответствующих новым запросам практики и современным достижениям вычислительных технологий, сохраняется до сих пор.

Сопровождающее бифуркацию изменение параметров внешнего воздействия (температуры, электромагнитного поля, механического сжатия и пр.) на сложную физическую систему (раствор, смесь, сплав и т.п.) в некоторых случаях приводит к потере устойчивости исходной фазы и, как следствие (как отклик системы), к ее переходу в новое состояние (с новыми структурными свойствами). Такой переход сопровождается спинодальным расслоением (распадом), выраженным в изменении локальных концентраций компонентов, в образовании сначала зернистой структуры, а затем кластеров и доменов новой фазы. Структурную перестройку физической среды часто объясняют на основе нелинейных диффузионных уравнений Кана-Хилларда и Свифта-Хойенберга. Близким, но более простым уравнением, также способным моделировать структурные перестройки, является широко известное уравнение «реакция-диффузия» с кубической нелинейностью

$$\dot{w} = \Delta(w) + \lambda w + w^3 - C, \quad w = w(x), \quad x \in U \subset \mathbb{R}^2,$$

рассмотренное при краевых условиях Неймана. Исследование посткритических структурных перестроек физических систем, моделируемых данным уравнением и его обобщениями, является весьма актуальной задачей, требующей для своего решения разнообразных методов современного математического анализа и новых вычислительных средств.

Степень разработанности темы. Бифуркационный анализ краевых и начально-краевых задач развивался в Воронежской математической школе, начиная с трудов М.А. Красносельского и его учеников — П.П. Забрейко, В.В. Стрыгина, Ю.Г. Борисовича, Ю.С. Колесова, Э.М.

Мухамадиева, Н.А. Бобылева и др.

Условия зарождения и развития пространственно однородных периодических режимов, описываемых начально-краевыми задачами для квазилинейных параболических уравнений изучались в ярославской школе динамических систем (в многочисленных трудах Ю.С. Колесова, А.С. Кащенко, С.Д. Глызина и других представителей этой школы). Для изучения условий зарождения периодических режимов и построения асимптотических представлений ветвей периодических решений были созданы специальные процедуры нормализации уравнений, посредством которых определялись основные динамические характеристики бифурцирующих колебательных режимов. Фактически были разработаны методы инвариантных интегральных подмногообразий и обобщенных нормальных форм, с помощью которых анализ исходного уравнения сводится к изучению конечномерных нелинейных систем обыкновенных дифференциальных уравнений специального вида. Развитие предложенных конструкций опиралось на более ранние идеи, изложенные в известных трудах Хартмана, Митропольского, Лыкова, Бибикова, Брюно, Хэссарда, Казаринова, Вэна, Гукенхеймера, Холмса и др. С помощью новых методов были получены новые результаты о существовании, устойчивости и асимптотических представлениях колебательных режимов в ситуациях с достаточно сложными вырождениями динамических систем.

В недавно опубликованной работе А.В. Казарникова и С.В. Ревиной¹ получены формулы асимптотических приближений к бифурцирующему из нуля периодическому решению обобщенной системы Релея с диффузией. Получение закритической ветви автоколебаний проведено на основе (невариационной) схемы Ляпунова-Шмидта, ранее предложенной В.И. Юдовичем.

Анализ многомодовых посткритических состояний включает, как известно, задачу вычисления значений собственных функций возмущенных самосопряженных операторов. В многочисленных трудах известных российских и зарубежных ученых созданы для решения этой задачи как общие, так и специальные методы. Важное место в арсенале таких средств занимает идея использования регуляризованных следов (В.А. Садовничий, В.В. Дубровский, С.И. Кадченко, С.Н. Какушкин и др.²). В боль-

¹ Возникновение автоколебаний в системе Релея с диффузией / А.В. Казарников, С.В. Ревина // Вестник Южно-Уральского государственного университета, 2016, т. 9, №2, с.16-28.

² Нахождение собственных значений и собственных функций методом регуляризованных следов / С.И. Кадченко, С.Н. Какушкин // Челябинск: Изд. ЮУрГУ, 2015. 246 с.

шом цикле работ А.Г. Баскакова и его учеников для аналогичных задач был разработан метод подобных операторов ^{3,4}. Эти разработки имеют хорошую перспективу применения в многомодовом посткритическом анализе.

Значительные результаты были достигнуты школой Ю.И. Сапронова, усилиями которой построены теоретические и конструктивные схемы анализа многомодовых и нелокальных бифуркаций. Были рассмотрены также важные примеры использования новых исследовательских схем в теории упругости, теории фазовых переходов и гидродинамике.

Известно, что один из базовых принципов исследования бифуркаций решений начально краевых задач для параболических и более общих уравнений основан на том, что уравнение

$$\frac{dv}{dt} + Av = f(t, v), \quad 0 \leq t \leq \alpha, \quad v(0) = v_0,$$

где $f(t, x)$ при каждом $t \in [0, \alpha]$ — нелинейный оператор (при условии, что оператор A порождает сильно непрерывную полугруппу $T(t)$), сводится к интегральному уравнению

$$v(t) = T(t)v_0 + \int_0^t T(t-s)f(s, v(s))ds$$

(метод Дюамеля).

В настоящей диссертации рассмотрен более простой подход, основанный на том, что рассмотренные бесконечномерные динамические системы являются градиентными. Это обстоятельство позволяет использовать прямой подход к построению траекторий спуска в точки минимума функционала энергии. Такой подход требует предварительного изучения бифуркаций стационарных точек функционала энергии в условиях многомодового вырождения (в порождающей точке минимума). Основы локального анализа в такой ситуации были заложены в работе М.А. Красносельского, Н.А. Бобылева, Э.М. Мухамадиева ⁵ и в работах Ю.И. Сапронова, Б.М. Даринского, С.Л. Царева (локальные и нелокальные

³Гармонический анализ линейных операторов / А. Г. Баскаков. – Воронеж: Изд. ВГУ, 1987. – 165 с.

⁴Метод подобных операторов в спектральном анализе несамосопряженного оператора Дирака с негладким потенциалом / А. Г. Баскаков, А. В. Дербушев, А. О. Щербаков // Известия РАН. Сер. матем. 2011. – Т. 75, №3. – С. 3–28.

⁵Красносельский М.А., Бобылев Н.А., Мухамадиев Э.М. Об одной схеме исследования вырожденных экстремалей функционалов классического вариационного исчисления / ДАН СССР. – 1978. – Т. 240, № 3. – С. 530–533.

бифуркационные задачи)^{6, 7, 8, 9, 10} и др.

В диссертации рассмотрены начально краевые задачи для уравнения «реакция-диффузия» с кубической нелинейностью, уравнения Кана-Хилларда, нелинейного обобщения уравнения Фусса-Винклера-Циммермана и для уравнения Свифта-Хойенберга — при обычных и обобщенных краевых условиях Дирихле и Неймана. Модельное уравнение «реакция-диффузия» с кубической нелинейностью используется, например, при изучении формирования раскраса шерсти животных¹¹, а более сложные уравнения Кана-Хилларда и Свифта-Хойенберга — при изучении посткритических фазовых переходов^{12, 13, 14, 15}.

Цель работы. Развитие и применение новых методов бифуркационного анализа актуальных нелинейных начально-краевых задач, соответствующих новым запросам практики и современным достижениям вычислительных технологий. В частности, развитие методов анализа многомодовых и нелокальных бифуркаций.

Методы исследования. В диссертации использованы методы функционального анализа, теории нелинейных фредгольмовых операторов, вариационного исчисления, теории особенностей гладких функций и фредгольмовых функционалов, теории приближенных вычислений.

Научная новизна. 1. В диссертационной работе изложена новая (авторская) версия нелокальной редуцирующей схемы Ляпунова-Шмидта (применительно к рассмотренным бесконечномерным динамическим системам).

⁶Конечномерные редукции в гладких экстремальных задачах / Ю.И. Сапронов // Успехи матем. наук. Т. 51, №1, 101-132 (1996).

⁷Бифуркации экстремалей фредгольмовых функционалов / Б.М. Даринский, Ю.И. Сапронов, С.Л. Царев // Современная математика. Фундаментальные направления. Том 12 (2004) - С. 3-140.

⁸Гнездилов А.В. Бифуркации критических торов для функционалов с 3-круговой симметрией / Функц. анализ, 2000. Т. 34, вып. 1. - С. 83-86.

⁹Костин Д.В. Об одной схеме анализа двухмодовых прогибов слабо неоднородной упругой балки / Доклады Академии наук. 2008, Т. 418, № 4, - С. 295-299

¹⁰Костин Д.В. Функциональный анализ и многомодовые прогибы упругих систем / Д.В. Костин, Ю.И. Сапронов. Воронеж: ИПЦ ВГУ, 2012, 207 с.

¹¹Марри Дж. Нелинейные дифференциальные уравнения в биологии. Лекции о моделях / М.: Мир. 1983. 399 с.

¹²Cahn J.W., Hilliard J.E. Free energy of a nonuniform system. I. Interfacial free energy / J. Chem. Phys. 1958. Vol. 28. - P. 258-267.

¹³Скрипов В.П., Скрипов А.В. Спинодальный распад (Фазовый переход с участием неустойчивых состояний) / УФН. Т.123, вып.2. 1979. - С.93-231.

¹⁴Swift J., Hohenberg P.S. Hydrodynamic fluctuations at the convective instability / Phys. Rev. 1977. V. A15. - P.319-328.

¹⁵Кулагин Н.Е., Лерман Л.М., Шамова Т.Г. Фронты, бегущие волны и их устойчивость в обобщенном уравнении Свифта-Хойенберга / ЖВМ, 2008, том 48, № 4, с. 693-712

2. Разработан и апробирован новый алгоритм построения приближений к нелокальным ключевым функциям.
3. Разработан и апробирован новый алгоритм построения приближений к ветвям нелокально бифурцирующих экстремалей.
4. Впервые построены траектории прямого спуска в точки минимума функционала энергии из случайно заданных начальных точек (для рассмотренных начально-краевых задач).
5. Впервые получена компьютерная графика, иллюстрирующая стабилизацию концентраций (в рамках предложенного алгоритма) в условиях многомерного вырождения.

Полученные общие результаты:

- исследованы бифуркации стационарных состояний и траектории спуска бесконечномерных динамических систем типа уравнение «реакция-диффузия» с кубической нелинейностью, уравнение Кана-Хилларда, обобщенное уравнение Фусса-Винклера-Циммермана и уравнению Свифта-Хойенберга (при обычных и обобщенных краевых условиях Дирихле и Неймана);
- предложена новая методика приближенного вычисления ветвей бифурцирующих решений (рассмотренных уравнений) при малых и конечных значениях закритического приращения параметра, созданная на основе вариационной версии процедуры Ляпунова-Шмидта и на использовании ритцевских аппроксимаций ключевой функции по заранее заданному набору собственных функций (мод бифуркаций) главной линейной части градиента функционала энергии;
- приведены оценки размера области функционального пространства состояний, на которой допускается нелокальная конечномерная редукция;
- в случае локальной редукции найдены главные части ключевых функций и вычислены асимптотические представления ветвей экстремалей по малому закритическому приращению (векторного) параметра;
- дано описание алгоритмов и программ соответствующих вычислений (в *Maple*);
- представлены графические изображения линий уровня ключевой функции и функций концентрации вещества, полученных в результате вычисления.

Полученные конкретные результаты. 1. Обоснование примени-

мости методов «фредгольмова анализа»¹⁶ в бифуркационном анализе рассмотренных бесконечномерных динамических систем.

2. Описание отдельных типовых многомодовых бифуркаций стационарных состояний в случаях рассмотренных уравнений — «реакция-диффузия» с кубической нелинейностью, Кана-Хилларда, обобщенного уравнения Фусса-Винклера-Циммермана и уравнения Свифта-Хойенберга (при обычных и обобщенных краевых условиях Дирихле и Неймана).

3. Построение и анализ трасс спуска уравнения «реакция-диффузия», редуцированного в подпространство функций с нулевым средним.

4. Теоремы о главных частях локальных ключевых функций.

5. Асимптотические представления ветвей бифурцирующих решений.

6. Создание и обоснование общего алгоритма вычисления нелокальных ветвей бифурцирующих экстремалей.

7. Создание и обоснование общего алгоритма построения трасс спуска в точки минимума функционалов энергии из случайно выбранных начальных точек общего положения.

8. Построение компьютерных графических иллюстраций.

Практическая и теоретическая значимость. Работа носит теоретический характер. Представленные в ней научные результаты могут быть использованы в анализе зарождений и развитии посткритических состояний сложных систем.

Апробация результатов диссертации. Результаты диссертации докладывались на ВЗМШ-14, ВЗМШ-15, ВЗМШ-16, ВЗМШ-17, ВВМШ-13, а также на семинаре по математическому моделированию (руководитель - проф. В.А. Костин), семинаре проф. Б.М. Даринского по фазовым переходам в кристаллах и семинаре по нелинейному стохастическому анализу (руководитель - проф. Ю.Е. Гликлх).

Публикации. Основные результаты диссертации опубликованы в работах [1–12]. Работы [2],[6],[10–12] опубликованы в журналах из перечня рецензируемых научных журналов и изданий, рекомендованных ВАК Минобрнауки РФ. Из совместных работ [1–5] в диссертацию вошли результаты, полученные диссертантом лично.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, 4 глав и 25 параграфов. Объем работы — 91 страницу. Библиогра-

¹⁶Нелинейные фредгольмовы отображения и теория Лере — Шаудера / Ю.Г. Борисович, В.Г. Звягин, Ю.И. Сапронов // Успехи матем. наук. — 1977. Т. 32, вып. 4. — С. 3-54.

фия содержит 102 наименования. Графических иллюстраций - 12.

Содержание диссертации.

В первой главе изложены основы анализа вариационных фредгольмовых уравнений, порожденных нелинейными начально-краевыми задачами. Дано краткое описание используемых разделов теории фредгольмовых уравнений, представлен краткий обзор примыкающих результатов других авторов. Описаны требования, обеспечивающие глобальную редуцируемость функционалов действия по схеме Ляпунова-Шмидта, представлена формула приближений к глобально заданной ключевой функции, служащая основой для создания алгоритмов вычисления нелинейных ритцевских аппроксимаций функционалов действия. Ключевая функция Ляпунова-Шмидта фредгольмова функционала $V(x)$, $x \in E$,

$$W(\xi) := \inf_{x: (x, e_j) = \xi_j} V(x), \quad \xi = (\xi_1, \dots, \xi_m)^T,$$

определена (нелокально) и является гладкой, если выполнено условие положительности (монотонности)

$$\left\langle \frac{\partial f}{\partial x}(x)h, h \right\rangle > 0 \quad \forall (x, h) \in E \times (E \setminus 0), \quad h \perp e_j, \quad j = 1, \dots, m$$

(на гильбертовом пространстве), либо условие собственности отображения $f := \text{grad } W : E \longrightarrow F$ (F — пространство значений градиента).

Ритцевской аппроксимацией функционала V , заданного на банаховом пространстве E , называется функция

$$W_R(\xi) = V \left(\sum_{i=1}^n \xi_i e_i \right), \quad \xi = (\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n)^T, \quad m < n,$$

где $\{e_1, e_2, \dots, e_n\}$ — некоторый линейно независимый набор функций из E (базис ритцевской аппроксимации). Экстремалам $\bar{\xi} = (\bar{\xi}_1, \dots, \bar{\xi}_n)$ функции W соответствуют точки $\bar{x} = \sum_{i=1}^n \bar{\xi}_i e_i$, называемые ритцевскими аппроксимациями экстремалей V . Ключевую функцию можно трактовать как нелинейный вариант ритцевской аппроксимации функционала V . В этой же главе описаны алгоритмы получения приближений к локальным и нелокальным ключевым функциям, используемые в последующих главах. Описаны также условия применимости математических утверждений и конструкций теории фредгольмовых уравнений. Показано, что в рассмотренных задачах имеется возможность использования прямого приближенного вычисления «связывающего» отображения

Φ (отображения, переводящего критические точки ключевой функции в критические точки функционала энергии) посредством кратчайшего (градиентного) спуска. Первичный алгоритм (его наиболее существенная часть) заключен в следующих соотношениях: $a_0 = u := K + \xi_1 e_1 + \xi_2 e_2 + \dots + \xi_m e_m$, $K = \text{const}$, $a_1 = a_0 - s_0 \nabla_0$, $\nabla_0 := \Pi(\text{grad } V(a_0))$, Π – ортопроектор на $N^\perp$, $N := \text{Lin}(e_1, \dots, e_m)$, а s_0 выбрано с условием минимизации на прямой $a = a_0 - s \nabla_0$ значения функционала V ,

$$a_{k+1} = a_k - s_k \nabla_k, \quad \nabla_k := \Pi(\text{grad } V(a_k)); \quad (1)$$

s_k также выбирается с целью минимизации на прямой $a = a_k - s \nabla_k$ значения V . В случае гладкого функционала, гладко зависящего от параметров, посредством «правильного» выбора направления сдвига и длины шага можно добиться равномерной C^r -сходимости по параметру к параметрическому семейству минимумов. Соответствующие оценки для норм невязок градиента и снижений значений функционала легко переносятся на параметрический случай (результат, ранее установленный в работе А.А. Лемешко¹⁷). Вычисление ключевой функции для уравнением «реакция-диффузия» (и его обобщений) можно также проводить на основе принципа сжатых отображений¹⁸). Для этого рассматривается уравнение

$$f(w) := \mathcal{A}w - \lambda w + g(w) = 0, \quad w \in E, \quad (2)$$

где $E = \left\{ w \in C^{2+\alpha}(\Omega) : \left. \frac{\partial w}{\partial n} \right|_{\partial\Omega} = 0, \iint_{\Omega} w(x_1, x_2) dx_1 dx_2 = 0 \right\}$, $\mathcal{A} = -\Delta$, $g(w) := w^3 + 3Cw^2$, оператор f действует из E в $F = C^{0+\alpha}(\Omega)$. Уравнение (2) разбивается в систему двух уравнений

$$\left. \begin{aligned} (\mathcal{A}_1 - \lambda I)(u) &= g_1(u+v), \\ (\mathcal{A}_2 - \lambda I)(v) &= g_2(u+v), \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

где $\mathcal{A}_1 := \mathcal{A}|_N$, $\mathcal{A}_2 := \mathcal{A}|_{N^\perp \cap E}$, $N := \text{Lin}\{e_{p,q}\}$, $p+q \leq n$, $w = u+v$, $u = \sum_{p+q \leq n} \xi_{p,q} e_{p,q}$, $v = \sum_{p+q \geq n+1} \xi_{p,q} e_{p,q}$, $g_1(u+v) := \mathcal{P}g(u+v)$, $g_2(u+v) := \mathcal{Q}g(u+v)$, $\mathcal{P}$ и $\mathcal{Q}$ – ортопроекторы на N и $N^\perp \cap F$. Здесь

$$e_0 = 1, \quad e_1 = \sqrt{2} \cos(\pi x_1), \quad e_2 = \sqrt{2} \cos(\pi x_2), \quad e_3 = 2 \cos(\pi x_1) \cos(\pi x_2),$$

¹⁷Лемешко А.А. О равномерной сходимости с производными галеркинских приближений к решениям уравнений с параметрами / Математические модели и операторные уравнения. Том 2. Воронеж: ВорГУ, 2003. - С. 94–103.

¹⁸Лемешко А.А. Об равномерной сходимости ньютоновских приближений к решениям уравнений с параметрами / Сборник трудов молодых ученых математического факультета ВГУ, Воронеж: ВГУ, 2003. - С.74-83.

$$e_4 = \sqrt{2} \cos(2\pi x_1), \quad e_5 = \sqrt{2} \cos(2\pi x_2), \quad e_6 = 2 \cos(2\pi x_1) \cos(\pi x_2), \\ e_7 = 2 \cos(\pi x_1) \cos(2\pi x_2), \quad e_8 = 2 \cos(2\pi x_1) \cos(2\pi x_2), \quad \dots$$

Из спектральных свойств главного оператора A линейной части исходного уравнения вытекает, что при достаточно большой (по размерности) редукции норма оператора $(\mathcal{A}_2 - \lambda I)^{-1} : N^\perp \cap F \longrightarrow N^\perp \cap E$ становится достаточно малой и поэтому оператор $K(v) := \mathcal{A}_2^{-1}(g_2(u + v, u + v))$ переводит некоторый шар $T_L := \{v : \|v\|_F \leq L\}$ в себя, являясь при этом сжимающим. То есть мы оказываемся в условиях, в которых приближенные решения второго уравнения системы (3) получаются в аналитической форме

$$v = \Phi(u), \quad (4)$$

с любой наперед заданной точностью, посредством итераций $v_n = K(v_{n-1})$. Подставив выражение (4) в первое уравнение системы (3), получим так называемое ключевое уравнение

$$\tau(u) := f_1(u + \Phi(u)) = 0 \quad (5)$$

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 «связывающей» формулой $w = u + \Phi(u)$. Рассмотренное уравнение является потенциальным с потенциалом (ключевой функцией) $W(u) := V(u + \Phi(u))$, $u \in N$. Поиск и анализ экстремалей функционала V можно осуществлять посредством поиска и анализа экстремалей ключевой функции W . В этой же главе приведены оценки для выделения области редуцируемости к двум ключевым переменным.

Во **второй главе** диссертации представлен алгоритм приближенно-го построения трасс спуска в точки минимума функционала энергии из произвольно заданной начальной точки (общего положения) для для 1-мерного уравнения «реакция-диффузия»

$$\dot{w} = -\text{grad } V(w) := w'' + \lambda w - w^3 - C, \quad (6)$$

где $w = w(x, t)$ — коцентрация изучаемого компонента, $x \in U = [0, 1]$, C — константа (подлежащая определению), $w \in E := C^2[0, 1] \cap \{w'(0) = w'(1) = 0\}$. $V(w) := \int_0^1 \left(\frac{|w'|^2}{2} - \lambda \frac{w^2}{2} + \frac{w^4}{4} + C w \right) dx$ — интеграл энергии

по области U . Предполагается, что выполнены граничное условие Неймана $w'(0, t) = w'(1, t) = 0$, и ограничение (на количество компонента в целом): $\int_0^1 w(x, t) dx = K = \text{const} > 0$. Из уравнения (6) и последнего условия следует, что

$$C = \lambda K - \int_0^1 w^3 dx, \quad (7)$$

то есть константа C определяется формулой (7), как только становится известной функция w . При исследовании нелокальных бифуркаций экстремалей сначала используется ритцевская аппроксимация функционала энергии

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

построенная по предварительно заданным начальным собственным функциям (модам) $e_k := \sqrt{2} \cos(\pi k x)$ оператора $\mathcal{A} := -\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ (при краевых условиях Неймана) в соответствующим образом подобранном функциональном пространстве состояний, к которой затем применяется редукция Пуанкаре (переход к ключевой функции от одной или двух ключевых переменных). В этой же главе приведен рисунок, иллюстрирующий выход на стабильную концентрацию.

В третьей главе осуществлен перенос развитой во второй главе теории на случай $m = 2$. Рассмотрено двумерное уравнение «реакция-диффузия» с кубической нелинейностью $\dot{w} = \Delta w + \lambda w - w^3 - C$, где $w = w(x, t)$ — концентрация изучаемого компонента, $x = x(x_1, x_2)$, $x \in U = [0, 1] \times [0, 1]$,

$$V(w) := \int_0^1 \int_0^1 \left(\frac{|\nabla w|^2}{2} - \lambda \frac{w^2}{2} + \frac{w^4}{4} + C w \right) dx_1 dx_2$$

— интеграл энергии по области U . Предполагается, что выполнено граничное условие Неймана $\frac{\partial w}{\partial n} \Big|_{\partial U} = 0$ и выполнено естественное ограничение на концентрацию вещества в целом: $\iint_{\Omega} w(x_1, x_2) dx_1 dx_2 = K > 0$. При построении вычислительных алгоритмов используется линейная 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).

В нелокальной задаче используется нелинейная ритцевская аппроксимация — нелокально продолженной ключевой функции Ляпунова-Шмидта от двух или трех ключевых переменных

$$W(\xi) := \inf_{\langle w, e_j \rangle = \xi_j} V(w) = W \left(\sum_{j=1}^m \xi_j e_j + \Phi(\xi_1, \dots, \xi_m) \right), \quad m = 2, 3.$$

При этом используется процедура кратчайшего спуска в точку минимума V по переменным $\xi_{m+1}, \dots, \xi_n$.

Первый шаг кратчайшего спуска — решение уравнения (относительно s) $\langle \text{grad} V(a_0 + s h_0), h \rangle = 0$, $h_0 = -\text{grad} V(a_0)$, $g = -\text{grad} V$, где a_0 — начальная (порождающая) точка. Второй шаг — повторение первого шага для новой порождающей точки $a_1 := a_0 + s_0 h_0$ и т.д.

Если $e_1, \dots, e_n$ — фиксированный базис ритцевской аппроксимации (базис Ритца), составленный из собственных функции оператора Лапласа (в порядке возрастания номеров собственных функций без пропусков отдельных функций), и e_1, e_2 — моды бифуркации (по которым допускается вырождение), то в качестве нулевого приближения к функции

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

рассматривается функция

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

Если $V_R(\xi) := V \left(\sum_{k=1}^n \xi_k e_k \right)$ — ритцевская аппроксимация функционала энергии (по базису Ритца), то первый шаг в процедуре аппроксимации ключевой функции $W(\hat{\xi})$ заключен в выборе «поправки» к W_0 , дающей приближение в виде

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

где

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

$$s_0 = \frac{\|g_0\|^2}{\langle G_0 g_0, g_0 \rangle}, \quad G_0 = \text{hess}_{\xi_3, \dots, \xi_n} V_R(a_0) \text{ — матрица Гессе (в нулевой порождающей точке } a_0) \text{ функции } V_R \text{ по переменным } \xi_3, \dots, \xi_n.$$

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

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

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 $\xi_3, \dots, \xi_n$, и при этом имеем

$$W_k(\hat{\xi}) := V_R(a_k(\hat{\xi})), \quad a_k(\hat{\xi}) = a_{k-1} - s_{k-1} g_{k-1},$$

Выбор функциональной величины $s_k = s_k(\hat{\xi})$ сдвига (вдоль антиградиента) приводит к большому росту информации, сопровождающей вычисления, и к существенному замедлению работы алгоритма. Это препятствие можно преодолеть, заменив функциональный множитель числовым множителем σ , служащим оценкой снизу функциональных множителей. 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

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

Вычисления, проводимые на основе изложенной схемы, позволяют визуализировать критические точки (с любой точностью). По связывающей формуле можно приближенно определить притягивающие стационарные точки исходного уравнения. Получение информации о точках минимума функционала энергии вблизи нуля опирается на следующие утверждения.

Теорема 3. *При малых значениях искомой концентрации и при малых $\delta := \lambda - \lambda_1$ главной частью ключевой функции, соответствующей функционалу V , является многочлен (4-ой степени)*

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

Из теоремы 3. вытекает утверждение об экстремальной концентрации.

Теорема 4. *Для функционала V вблизи нуля при малых искомым концентрациях имеется ветвь устойчивых функций концентраций вида*

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

где $\varepsilon = c \delta^{\frac{1}{2}}$ — малый параметр, $c = \sqrt{\frac{2}{5}}$.

В четвертой главе приведены результаты, обобщающие результаты 2 и 3 глав на случай уравнений Кана-Хилларда и Свифта-Хоенберга. Приведены результаты соответствующих вычислений, включая результат полиномиальной аппроксимации ключевой функции, графические изображения нелокальных ключевых функций и решений исходных краевых задач. Показано, что в случае уравнения Свифта-Хоенберга возникает 3-модовое вырождение. Вычислены соответствующие главные части локальных ключевых функций (от трех ключевых переменных), сформулированы и доказаны **теоремы** 8, 9, аналогичные теоремам 3, 4 главы 3. В этой же главе представлены программные коды, результаты вычислений и компьютерная графика.

Публикации автора по теме диссертации

- 1.Коротких А.С. Динамика относительной концентрации двухкомпонентного сплава вблизи равновесного состояния / А.С. Коротких, Ю.И. Сапронов // Современные методы теории краевых задач: материалы Воронежской весенней математической школы «Понтрягинские чтения - XXIV». - Воронеж: ВГУ, 2013. - С. 110-111.
2. Сапронов Ю.И. Моделирование течений жидкости посредством редуцированных уравнений / Ю.И. Сапронов, А.П. Карпова, В.В. Конев, А.С. Коротких // Вестник ВГУ. Серия : Физика. Математика. 2014, №2. С. 167-188.
3. Сапронов Ю.И. Об упрощенном алгоритме математического моделирования течений жидкости в диффузоре / Ю.И. Сапронов , В.В. Конев, А.С. Коротких // Материалы международной конференции ВЗМШ С.Г. Крейна – 2014 / Воронеж, 26-31 янв. 2014 г. Воронеж : ИПЦ «Научная книга», 2014. – С. 295-301.
4. Коротких А.С. К моделированию кластерной перестройки посредством нелинейного уравнения диффузии / А.С. Коротких, Д.В. Костин, Ю.И. Сапронов Ю.И. // Современные методы теории функций и смежные проблемы. Материалы международной конференции ВЗМШ – 2015 / Воронеж, 27 января - 6 февраля. – Воронеж : Издательский дом ВГУ, 2015. – С. 63-66.
5. Сапронов Ю.И. К динамике концентраций, определяемых двумерным уравнением диффузии с кубической нелинейностью / Ю.И. Сапронов, А.С. Коротких, Д.В. Костин, // Материалы международной конференции ВЗМШ С.Г. Крейна – 2016 / Воронеж, 25-31 янв. 2016 г. Воронеж : ИПЦ «Научная книга», 2016. – С. 295-300.

6. Коротких А.С. Стабильные концентрации, определяемые одномерным уравнением диффузии с кубической нелинейностью / А.С. Коротких // Вестник ВГУ. Серия: Физика. Математика. 2016, №3. С. 156-161.
7. Коротких А.С. Бифуркации стационарных решений уравнения «реакция-диффузия» и трассы спуска в стабильные состояния / А.С. Коротких // Препринт НИИМ ВГУ. №48. Октябрь, 2016. – 20 с.
8. Коротких А.С. 3-модовая бифуркация стационарных решений уравнения Свифта-Хоенберга / А.С. Коротких // Вестник факультета прикладной математики, информатики и механики. Вып. 13. Воронеж : Издательский дом ВГУ, 2016. – С. 112-121
9. Коротких А.С. 3-модовая бифуркация стационарных решений уравнения Свифта-Хоенберга / А.С. Коротких // Материалы международной конференции ВЗМШ – 2017 / Воронеж, 27 января - 1 февраля. Воронеж: Издательский дом ВГУ, 2017. – С.120-122.
10. Коротких А.С. Стационарные точки уравнения «реакция-диффузия» и переход в стабильные состояния / А.С. Коротких // Вестн. Юж.-Урал. гос. ун-та. Сер.: Мат. моделирование и программирование. Челябинск. 2017. Т 10, №1. – 13. С.125-137.
11. Коротких А.С. Бифуркации стационарных решений уравнения «реакция-диффузия» и переход концентраций в стабильное состояние / А.С. Коротких // Вестник ВГУ. Серия: Физика. Математика. 2017, №1. С. 115-127.
12. Свидетельство о регистрации программ для ЭВМ / Коротких А.С. // Зарегистрировано в Реестре программ для ЭВМ. №2017660700 25.09.2017.
Работы [2],[6],[10 – 12] опубликованы в журналах из перечня рецензируемых научных журналов и изданий, рекомендованных ВАК Минобрнауки РФ.

Подписано в печать 14.03.2018. Формат 60×84/16

Усл. печ. л. 0,93. Тираж 100 экз. Заказ 4055

Отпечатано с готового оригинал-макета
в типографии издательства «ИСТОКИ»
394026 г. Воронеж, ул. Солнечная, 33