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

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 "   " марта 2018 г.

Ученый секретарь
Диссертационного Совета Д 212.038.22
доктор физико–математических наук,
профессор Гликлих 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 специальнык процедуры нормализации уравненений, посредством которых определялись основные динамические характеристики бифурцирующих колебательных режимов. Фактически были разрабатаны 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. Ревиной [1] получены формулы асимптотических приближений к бифурцирующему из нуля периодическому решению обобщенной системы Релея с диффузией. Получние 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 Рэлея 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

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

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

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

[4]Метод 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.

[5]Красносельский 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 животных [11], 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).

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

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

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

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

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

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

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

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

[14]Swift J., Hohenberg P.S. Hydrodynamic fluctuations at the convective instability / Phys. Rev. 1977. V. Al5. - P.319-328.

[15]Кулагин Н.Е., Лерман Л.М., Шмакова 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 энергиию 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, обобщенного уравнение Фусса-Винклера-Циммермана и уравнениу 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 минмума 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 развитий 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. Гликлих).

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-

[16] Нелинейные 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 $V(x)$, $x \in E$,

$$W(\xi) := \inf_{x:\langle x,e_j\rangle=\xi_j} V(x), \qquad \xi = (\xi_1, \ldots, \xi_m)^\top,$$

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

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

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

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

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

где $\{e_1, e_2, ..., e_n\}$ — некоторый линейно независимый набор функций из E (базис ритцевской аппроксимации). Экстремалям $\bar{\xi} = (\bar{\xi_1}, ..., \bar{\xi_n})$ 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: $a_0 = u := K + \xi_1 e_1 + \xi_2 e_2 + \dots + \xi_m e_m, \quad K - \mathrm{const}\,,\ a_1 = a_0 - s_0 \nabla_0, \quad \nabla_0 := \Pi\,(\mathrm{grad\ V(a_0)})$, Π — ортопроектор на $N^{\perp}$, $N := Lin(e_1, \dots, e_m)$, а s_0 выбрано с условием минимизации на прямой $a = a_0 - s\nabla_0$ значения функционала V ,

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

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. Лемешко [17]). Вычисление ключевой функции для уравнением «реакция-диффузия» (и его обобщений) можно также проводить на основе принципа сжатых отображений [18]). Для этого рассматривается уравнение

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

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

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

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

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

[17]Лемешко 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.

[18]Лемешко 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.

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

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 $T_L := \{v : \; \|v\|_F \le L\}$ в себя, являясь при этом сжимающим. То есть мы оказываемся в условиях, в которых приближенные решения второго уравнения системы (3) получаются в аналитической форме

$$v = \Phi(u)\,, \tag{4}$$

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

$$\tau(u) := f_1(u + \Phi(u)) = 0 \tag{5}$$

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) $W(u) := V(u + \Phi(u))\,, \quad u \in N$. Поиск и анализ экстремалей функционала V можно осуществлять посредством поиска и анализа экстремалей ключевой функции W. В этой же главе привены оценки для выделения области редуцируемости к двум ключевым переменным.

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

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

где $w = w(x,t)$ — коцентрация изучаемого компонента, $x \in U = [0,1]$, C — константа (подлежащая определению), $w \in E := C^2[0,1] \cap \{w'(0) = w'(1) = 0\}$. $V(w) := \int\limits_0^1 \left(\frac{|w'|^2}{2} - \lambda\frac{w^2}{2} + \frac{w^4}{4} + C\,w\right) dx$ — 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): $\int\limits_0^1 w(x,t)\,dx = K = \mathrm{const} > \ 0$. Из уравнения (6) и последнего условия следует, что

$$C = \lambda\, K - \int\limits_0^1 w^3\, dx\,, \tag{7}$$

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

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

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 $w = w(x,t)$ — коцентрация изучаемого компонента, $x = x(x_1, x_2)$, $x \in U = [0,1] \times [0,1]$,

$$V(w) := \int\limits_0^1 \int\limits_0^1 \left(\frac{|\nabla w|^2}{2} - \lambda \frac{w^2}{2} + \frac{w^4}{4} + C\, w \right) dx_1 dx_2$$

— 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: $\iint\limits_{\Omega} w(x_1, x_2) dx_1 dx_2 \ = K > 0$. При построении вычислительных алгоритмов используется линейная ритцевская аппроксимация функционала

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

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

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

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

Первый шаг кратчайшего спуска — решение уравнения (относительно s) $\langle \mathrm{grad} V(a_0 + s h_0), h\rangle = 0$, $h_0 = -\mathrm{grad} V(a_0)$, $g = -\mathrm{grad} V$, 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 $e_1, \ldots, e_n$ — 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

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

рассматривается функция

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

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

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

где

$$a(\widehat{\xi})) = a_0 - s_o\, g_0\,, \quad a_0 = (\xi_1, \xi_2, 0, \ldots, 0)\,, \quad g_0 := \mathrm{grad}_{\xi_3, \ldots, \xi_n} V_R(a_0)\,,$$

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

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

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

где $G_k = \mathrm{hess}_{\xi_3,\dots,\xi_n} V_R(a_k)$ — матрица Гессе (в точке a_k) функции V_R по переменным $\xi_3,\dots,\xi_n$, и при этом имеем

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

Выбор функциональной величины $s_k = s_k(\widehat{\xi})$ 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 $G = (g_{j,k})$):

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

где

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

Вычисления, проведимые 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 искомых концентрациях имеется ветвь устойчивых функций концентраций вида*

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

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.