

СТАЦИОНАРНЫЕ ТОЧКИ УРАВНЕНИЯ «РЕАКЦИЯ-ДИФФУЗИЯ» И ПЕРЕХОДЫ В СТАБИЛЬНЫЕ СОСТОЯНИЯ

A.C. Коротких

Рассмотрена бесконечномерная динамическая система, заданная уравнением «реакция-диффузия» с кубической нелинейностью при краевом условии Неймана и фиксированном значении средней величины. Изложена методика приближенного вычисления бифурсирующих решений при малых и конечных значениях закритического приращения параметра. Предложена также методика «трассировки» траекторий спуска из произвольного состояния (с произвольной концентрацией) в стабильное состояние (с концентрацией, реализующей минимум функционала энергии). Методика основана на вычислении сужения функционала энергии на линейную оболочку основных собственных функций (мод) оператора Лапласа и приближенном построении трассы спуска в виде последовательности точек, сопровождающих траекторию динамической системы. В случае малого закритического приращения бифуркационного параметра вычислены асимптотические представления бифурсирующих решений. В случае конечного закритического приращения бифуркационного параметра приведены примеры вычисления трассы спуска в точки минимума функционала энергии.

Ключевые слова: уравнение «реакция-диффузия»; гладкий функционал; экстремаль; бифуркация стационарных состояний; моды бифуркации; вариационный метод Ляпунова – Шмидта; траектории спуска в точки минимума.

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), при исследовании стабильных распределений концентраций вещества и т.п. часто используется градиентная динамическая система типа «реакция-диффузия» [1–3]

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

в которой $w = w(x, t)$ – относительная концентрация компоненты вещества, $x \in U \subset \mathbb{R}^2$,

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

– интеграл энергии, U – область, занятая веществом, t – время. Как правило, разыскиваются такие решения $w = w(x, t)$, для которых выполнено граничное условие Неймана

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

где ∂U – граница области U , n – векторное поле нормалей к границе.

Первоочередной интерес представляют стационарные состояния – решения $w = w(x)$ стационарного уравнения

$$\Delta w + \lambda w - w^3 - C, \quad C = \text{const}, \quad (2)$$

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

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

– ключевая функция, построенная по начальным собственным функциям (модам бифуркациями) $e_j, j = 1, \dots, m$ оператора Лапласа на области U (при заданных краевых условиях Пуассона) в соответствующим образом подобранном функциональном пространстве состояний [2, 3].

Обратимся к функциональным пространствам $\hat{\mathcal{H}}_0, \hat{\mathcal{H}}_1, \hat{\mathcal{H}}_2$, где $\mathcal{H}_0 = L^2(\Omega)$, $\hat{\mathcal{H}}_k$ – замыкание по норме $\|w\|_k$ ($k = 1, 2$) множества тригонометрических полиномов вида

$$\sum_{p+q=1}^m \xi_{p,q} e_{p,q}, \quad p, q \geq 0, \quad e_{p,q}(x_1, x_2) – собственная функция оператора Δ (при краевом$$

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 $L_2(\Omega)$. Для тригонометрического полинома w норма $\|w\|_k$ определена следующими соотношениями:

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

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

Линейный оператор $\mathcal{A} := -\Delta : \hat{\mathcal{H}}_2 \rightarrow \hat{\mathcal{H}}_0$ 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 B изоморфно действует из $\hat{\mathcal{H}}_2$ на $\hat{\mathcal{H}}_1$ и из $\hat{\mathcal{H}}_1$ на $\hat{\mathcal{H}}_0$:

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

Из этого соотношения следует, что $\|w\|_2 = \|\mathcal{B}(w)\|_1$. Так как уравнение «реакция–диффузия» допускает операторное представление

$$\dot{w} = -\operatorname{grad} \bar{V}(w), \quad w \in \hat{\mathcal{H}}_2,$$

то заменой $\tilde{w} = Bw$ оно сводится к эквивалентному, но неградиентному, уравнению

$$\frac{d\tilde{w}}{dt} = -\mathcal{B} \operatorname{grad} \bar{V}(\mathcal{B}^{-1} \tilde{w}), \quad \tilde{w} \in \hat{\mathcal{H}}_2. \quad (3)$$

Если рассмотреть градиент функционала $\tilde{V}(\tilde{w}) := \bar{V}(\mathcal{B}^{-1} \tilde{w})$ в тройке $\hat{\mathcal{H}}_1 \subseteq \hat{\mathcal{H}}_1 \subseteq \hat{\mathcal{H}}_0$ (см. определение градиента в [2, 3]), то можно рассмотреть градиентное уравнение

$$\frac{d\tilde{w}}{dt} = \mathcal{B}^{-1} \operatorname{grad} \bar{V}(\mathcal{B}^{-1} \tilde{w}), \quad \tilde{w} \in \hat{\mathcal{H}}_1. \quad (4)$$

Стационарные решения уравнений (1) и (4) совпадают. Формально, динамические уравнения (1) и (4) не эквивалентны, но эти уравнения являются в некотором смысле родственными. Во всяком случае, траектории решений уравнения (4) дают представление о динамике концентраций при переходе вещества в стабильное состояние (по модельному уравнению (1)). Математическое же преимущество исследования решений уравнения в форме (4) состоит в том, что правая часть (4) является нелинейным оператором класса Лере – Шаудера, то есть допускающим представление в виде «единица плюс вполне непрерывный»:

$$-\mathcal{B}^{-1} \operatorname{grad} \bar{V}(\mathcal{B}^{-1} \tilde{w}) = \tilde{w} + \mathcal{B}^{-1} g(\mathcal{B}^{-1} \tilde{w}) = \tilde{w} + \tilde{g}(\tilde{w}),$$

$$\tilde{g}(\tilde{w}) := \tilde{\lambda} \mathcal{A}^{-2} \tilde{w} - \mathcal{B}^{-1} (\mathcal{B}^{-1} \tilde{w})^3 - 3K \mathcal{B}^{-1} (\mathcal{B}^{-1} \tilde{w})^2 + \alpha,$$

$$\alpha = \iint_{\Omega} (\mathcal{B}^{-1} (\mathcal{B}^{-1} \tilde{w})^3 + 3K \mathcal{B}^{-1} (\mathcal{B}^{-1} \tilde{w})^2) dx_1 dx_2.$$

Для такого класса уравнений нетрудно провести обоснование применимости метода конечномерной редукции, основанного на комбинации двух редукций – ритцевской аппроксимации функционала энергии и редукции Пуанкаре – Ляпунова – Шмидта [2, 3].

Прямое обоснование применимости редукции Пуанкаре – Ляпунова – Шмидта к уравнению (1) или (3), по-видимому, можно провести, опираясь на формулу Дюамеля для нелинейных полугрупп (см., например, [4, с. 158]).

Заметим, что в недавней опубликованной работе А.В. Казарникова и С.В. Ревиной [5] получены формулы асимптотических приближений к бифурцирующему из нуля периодическому решению в системе Релея с диффузией, имеющей более общий вид, чем система (1) данной работы. Получение закритической ветви автоколебаний проведено в ней на основе (невариационной) схемы Ляпунова – Шмидта, ранее предложенной В.И. Юдовичем.

Представленный в данной статье подход допускает применение в задаче, рассмотренной в работе [5]. Более точное и эффективное приближение вычисления трассы спуска можно получить, используя подходы, разработанные Г.А. Свиридиюком и его учениками на основе теории полугрупп [6–8].

1. Локальный анализ бифурсирующих стационарных решений уравнения «реакция-диффузия»

Рассмотрим вновь уравнение диффузии с кубической нелинейностью, записанное в форме

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

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

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

– интеграл энергии по области $U = [0, 1] \times [0, 1] \subset \mathbb{R}^2$. Будем предполагать выполнение граничного условия Неймана $\frac{\partial w}{\partial n} \Big|_{\partial U} = 0$ и выполнение естественного ограничения на концентрацию вещества в целом (см., например, [1]):

$$[w] := \iint_{\Omega} w(x_1, x_2) dx_1 dx_2 = K > 0. \quad (5)$$

При исследовании локальных бифуркаций экстремалей часто используется локальная конечномерная ритцевская аппроксимация функционала энергии

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

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

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

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

$$e_7 = 2 \cos(\pi x_1) \cos(2\pi x_2), \quad e_8 = 2 \cos(2\pi x_1) \cos(2\pi x_2), \dots .$$

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

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

где

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

– нелокально продолженная ключевая функция Ляпунова – Шмидта.

Запишем исковую функцию концентрации w в виде

$$w = K + \tilde{w}, \quad \iint_{\Omega} \tilde{w} dx_1 dx_2 = 0. \quad (6)$$

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 $\hat{\mathcal{H}}_2$:

$$\tilde{V}(\tilde{w}) = \iint_{\Omega} \left(\frac{|\nabla \tilde{w}|^2}{2} - \tilde{\lambda} \frac{\tilde{w}^2}{2} + \frac{\tilde{w}^4}{4} + K \tilde{w}^3 \right) dx_1 dx_2, \quad \tilde{\lambda} = \lambda - \frac{3}{2} K^2, \quad (7)$$

и, соответственно,

$$-\text{grad } (\tilde{V})(\tilde{w}) = \Delta \tilde{w} + \tilde{\lambda} \tilde{w} - \tilde{w}^3 - 3K \tilde{w}^2 - \alpha, \quad (8)$$

$\alpha = \iint_{\Omega} (\tilde{w}^3 + 3K \tilde{w}^2) dx_1 dx_2$ (в тройке пространств $\hat{\mathcal{H}}_2 \subseteq \hat{\mathcal{H}}_0 \subseteq \hat{\mathcal{H}}_0$ [2–3]). 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 $\lambda = \lambda_* = \pi^2 + \delta$). 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. 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

$$\begin{aligned} W_\delta(\xi_1, \xi_2) &= \tilde{V}(\xi_1 e_1 + \xi_2 e_2) + o(|\xi_1|^2 + |\xi_2|^2)^2 = \\ &= -\frac{\delta}{2}(\xi_1^2 + \xi_2^2) + \frac{a}{4}(\xi_1^4 + \xi_2^4) + \frac{b}{2}\xi_1^2\xi_2^2 + o(|\xi_1|^2 + |\xi_2|^2)^2 \end{aligned} \quad (9)$$

(см. [9 – 10]). 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

$$a = \iint_{\Omega} e_1^4 dx_2 dx_1 = \iint_{\Omega} e_2^4 dx_2 dx_1 = \frac{3}{2},$$

$$b = \iint_{\Omega} e_1^2 e_2^2 dx_1 dx_2 = \left(\int_0^1 e_1^2 dx_1 \right) \left(\int_0^1 e_2^2 dx_2 \right) = 1.$$

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 $\varepsilon = c\delta^{\frac{1}{2}}$ – малый параметр при $c = \sqrt{\frac{2}{5}}$.

Таким образом, удалось получить первое асимптотическое слагаемое закритической ветви бифурцирующих экстремалей – по информации о главной части ключевой функции.

2. Построение нелокальной ключевой функции методом градиентного спуска

При построении нелокальной ключевой функции можно также воспользоваться прямой процедурой кратчайшего спуска (см. [10–13]) в точку минимума V при условии, что направление спуска зависит от параметра. 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 функций 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 $V_{Ritz}(\xi) := V\left(\sum_{k=1}^n \xi_k e_k\right)$ – ритцевская аппроксимация функционала энергии (по базису Ритца).

В качестве нулевого приближения к функции

$$W(\hat{\xi}) := \inf_{(w, e_j) = \xi_j, j=1,2} V_{Ritz}(w), \quad \hat{\xi} = (\xi_1, \xi_2),$$

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

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

где

$$a(\hat{\xi}) = a_0 - s_0 g_0, \quad a_0 = (\xi_1, \xi_2, 0, \dots, 0), \quad g_0 := \text{grad}_{\xi_3, \dots, \xi_n} V_{Ritz}(a_0), \quad s_0 = \frac{\|g_0\|^2}{\langle G_0 g_0, g_0 \rangle},$$

где $G_0 = \text{hess}_{\xi_3, \dots, \xi_n} V_{Ritz}(a_0)$ – матрица Гессе (в нулевой порождающей точке a_0) функции V_{Ritz} по переменным ξ_3, \dots, ξ_n .

Второй шаг – повторение первого шага для новой порождающей точки $a_1 = a_0 - s_0 g_0$, и т.д. На шаге с номером $k+1$ получаем

$$a_{k+1} = a_k - s_k g_k, \quad g_k := g(a_k).$$

Выбор функциональной величины сдвига $s_k = s_k(\hat{\xi})$ вдоль антиградиента делается посредством формулы

$$s_k = \frac{\|g_k\|^2}{\langle G_k g_k, g_k \rangle}, \quad (10)$$

где $G_k = \text{hess}_{\xi_3, \dots, \xi_n} V_{Ritz}(a_0)$ – матрица Гессе (в точке a_k) функции V_{Ritz} по переменным ξ_3, \dots, ξ_n .

К сожалению, выбор функциональной величины $s_k = s_k(\widehat{\xi})$ сдвига (вдоль антиградиента) в виде (6) 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 (6) числовым множителем σ , служащим универсальной оценкой снизу всех функциональных множителей вида (6). 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

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

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), и с любой наперед заданной точностью локализовать притягивающие точки: сначала вычислить точки минимума ключевой функции, а затем по связывающей формуле определить притягивающие точки уравнения (1). Прямая графическая локализация позволяет сколь угодно точно определить координаты точек минимума для ключевой функции (рис. 1 – 3).

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 (рис. 4).

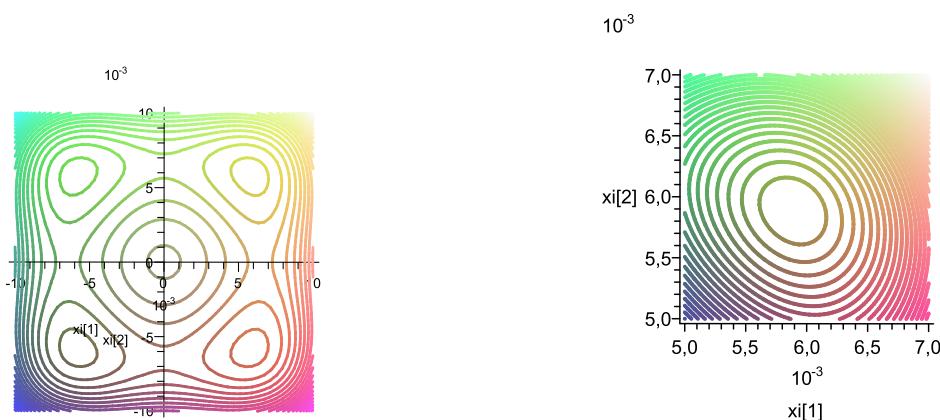


Рис. 1. Линии уровня ключевой функции и локализация ее точки минимума при $K = 0,5$, $\lambda = \pi^2 + 0,4$

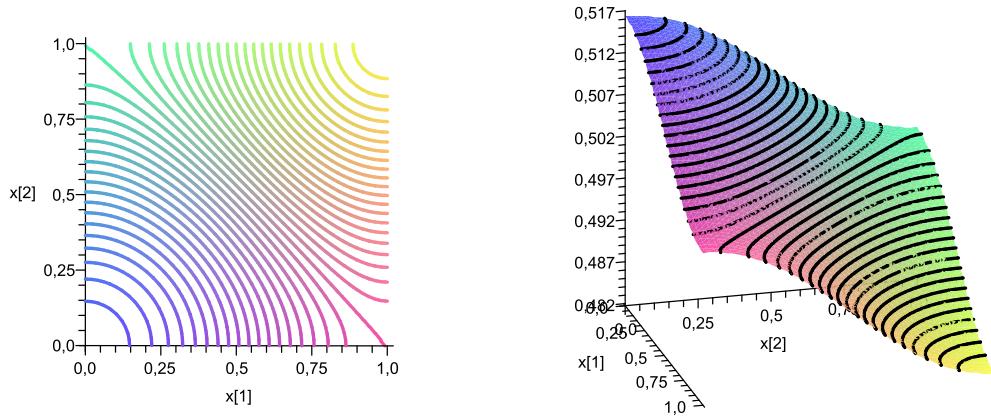


Рис. 2. Линии уровня и 3D-график функции концентрации при $K = 0,5$, $\lambda = \pi^2 + 0,4$

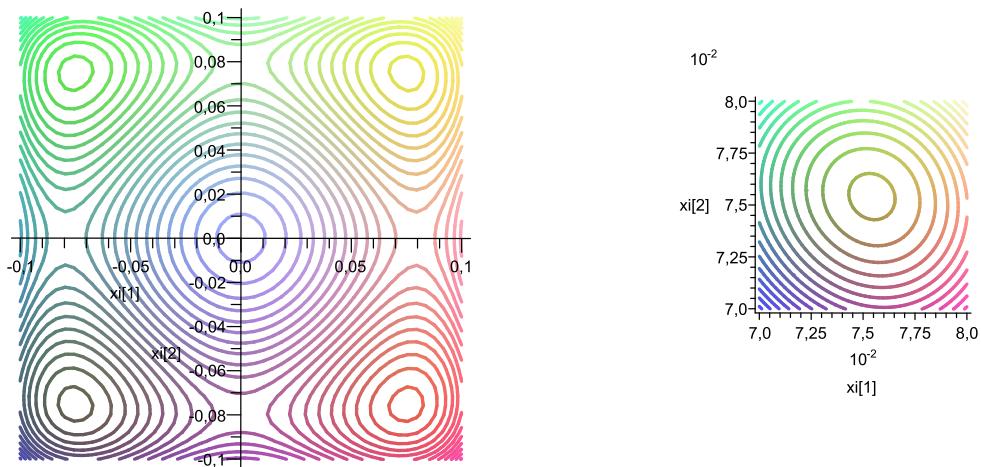


Рис. 3. Линии уровня ключевой функции и локализация ее точки минимума при $K = 0,5$, $\lambda = 15$

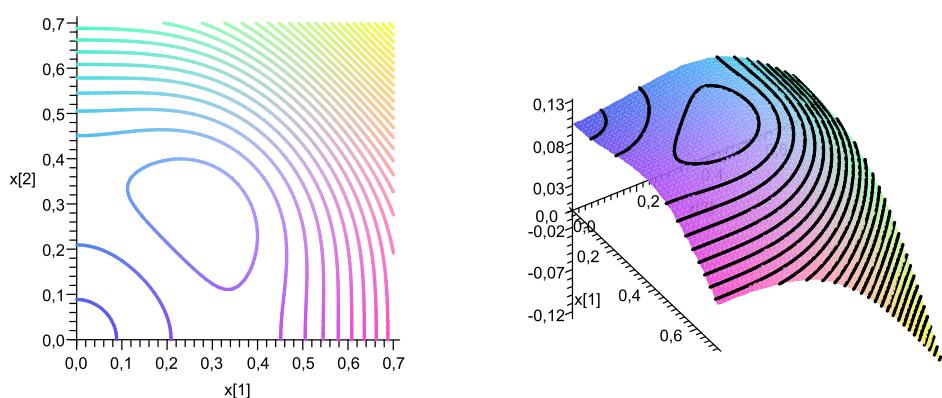


Рис. 4. Линии уровня и 3D-график функции концентрации при $K = 0,5$, $\lambda = 15$

3. Трассировка спуска из произвольного состояния в стабильное

Если w – начальная концентрация, находящаяся в общем положении, то выходящая из нее траектория динамической системы (1) стремится к концентрации, реализующей минимум функционала энергии. С помощью пошагового метода Коши – Пикара из теории обыкновенных дифференциальных уравнений и его варианта для градиентных уравнений (в виде градиентного спуска) можно наблюдать изменения функции концентрации посредством визуального изучения строения линий уровня функции концентрации в «контрольных» точках траектории спуска. Это позволяет получить представление о динамике изменения концентрации.

Итак, пусть задана основная начально-краевая задача

$$\dot{w} = \Delta w + \lambda w - w^3 - C = 0,$$

$w = w(x, t)$ – функция концентрации, $x = x(x_1, x_2)$, $x \in U = [0, 1] \times [0, 1] \subset \mathbb{R}^2$.

Рассмотрим собственные функции оператора $\mathcal{A} = -\Delta$:

$$\begin{aligned} e_0 &= 1, \quad e_1 = \sqrt{2} \cos(\pi x_1), \quad e_2 = \sqrt{2} \cos(\pi x_2), \quad e_3 = 2 \cos(\pi x_1) \cos(\pi x_2)), \\ e_4 &= \sqrt{2} \cos(2\pi x_1), \quad e_5 = \sqrt{2} \cos(2\pi x_2), \quad e_6 = 2 \cos(2\pi x_1) \cos(\pi x_2)), \\ e_7 &= 2 \cos(\pi x_1) \cos(2\pi x_2)), \quad e_8 = 2 \cos(2\pi x_1) \cos(\pi x_2)), \\ e_9 &= \sqrt{2} \cos(3\pi x_1), \quad e_{10} = \sqrt{2} \cos(3\pi x_2) \dots . \end{aligned}$$

и соответствующие собственные значения оператора \mathcal{A} :

$$\lambda_1 = \lambda_1 = \pi^2, \quad \lambda_3 = 2\pi^2, \quad \lambda_4 = \lambda_5 = 4\pi^2,$$

$$\lambda_6 = \lambda_7 = 5\pi^2, \quad \lambda_8 = 8\pi^2, \quad \lambda_9 = \lambda_{10} = 9\pi^2 \dots .$$

Функцию концентрации запишем в виде

$$w = K + \tilde{w}, \quad \iint_{\Omega} \tilde{w} dx_1 dx_2 = 0. \quad (11)$$

Основные итерационные формулы: a_0 – начальная концентрация. Для определенности положим $K = 0,5$,

$$a_0 = 0,5 + 0,3 \cos(3\pi x_1) + 0,4 \cos(3\pi x_2) + \cos(\pi x_1) + 2 \cos(\pi x_2).$$

Далее имеем

$$a_{n+1} = a_n - \sigma f_n, \quad f_n = f(a_n). \quad (12)$$

Для ритцевской аппроксимации функционала V имеем представление

$$V_{Ritz}(\xi) = V \left(K + \sum_{k=1}^{10} \xi_k e_k \right).$$

Суть первого шага процедуры градиентного спуска заключена в выборе сдвига вдоль антиградиента V_{Ritz} из начальной (порождающей) точки a_0 в точку, дающую уменьшение значения функционала энергии

$$w = a_0 - s f_0, \quad f_0 := f(a_0).$$

Второй шаг процедуры градиентного спуска является повторением первого шага в точке a_1 (с соответствующей модификацией). Третий шаг – повторение второго шага в точке $a_2 := a_1 - \sigma f_1$, $a_2 = a_1 - \sigma f_1$, $f_1 := f(a_1)$, и так далее.

После k -го шага получаем $a_{k+1} = a_k - \sigma f_k$, $f_k := f(a_k)$. Последовательность точек a_k , $k = 1, 2, \dots$ называется трассой прямого спуска. Процесс построения трассы называть трассировкой траектории спуска.

Рассмотрение линий уровня функций a_k дает представление о динамике концентраций (рис. 5).

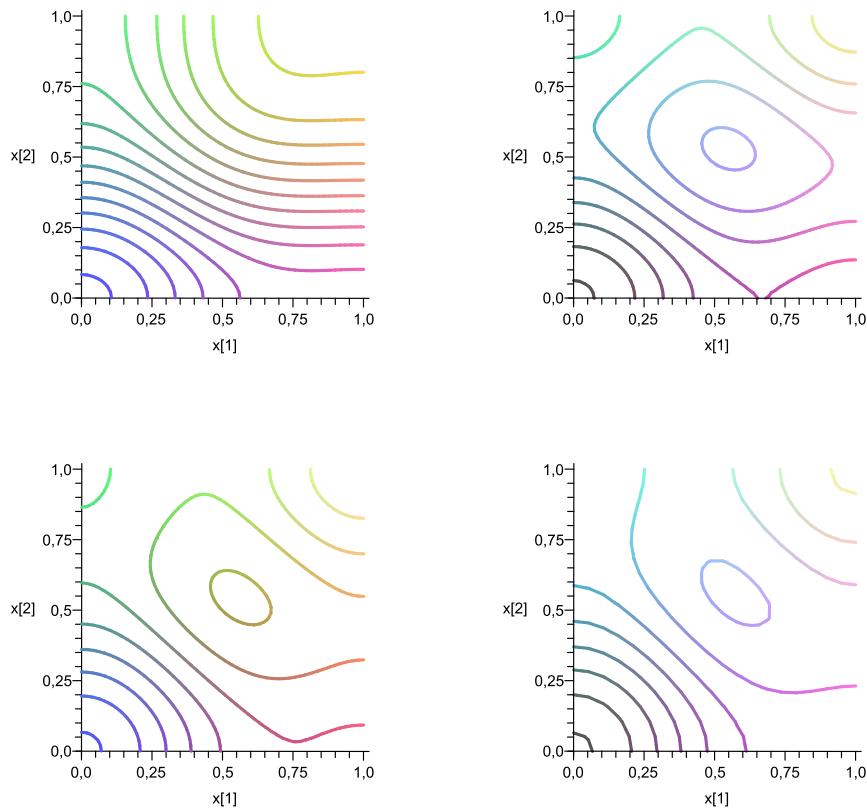


Рис. 5. Изменение линий уровня функции концентрации вдоль трассы спуска (из начальной точки $a_0 = 0,5 + e_1 + 2e_2 + 0,3e_3 + 0,4e_4$ до третьего шага a_3 , $K = 0,5$, $\lambda = 15$)

Литература

1. Михлин, С.Г. Вариационные методы в математической физике / С.Г. Михлин. – М.: Наука, 1970. – 512 с.

2. 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.
3. Марри, Дж. Нелинейные дифференциальные уравнения в биологии. Лекции о моделях / Дж. Марри. – М.: Мир, 1983. – 397 с.
4. Хэссард, Б. Теория и приложения бифуркации рождения цикла / Б. Хэссард, Н. Казаринов, И. Вэн. – М.: Мир, 1985. – 280 с.
5. Казарников, А.В. Возникновение автоколебаний в системе Рэлея с диффузией / А.В. Казарников, С.В. Ревина // Вестник ЮУрГУ. Серия: Математическое моделирование и программирование. – 2016. – Т. 9, № 2. – С. 16–28.
6. Свиридов, Г.А. Квазистационарные траектории полулинейных динамических уравнений типа Соболева / Г.А. Свиридов // Известия АН СССР. Серия: Математическая. – 1993. – Т. 57, № 3. – С. 192–207.
7. Свиридов, Г.А. О задаче Веригина для обобщенного фильтрационного уравнения Буссинеска / Г.А. Свиридов, С.А. Загребина // Известия вузов. Математика. – 2003. – № 7. – С. 54–58.
8. Загребина, С.А. О задаче Шоултера – Сидорова / С.А. Загребина // Известия вузов. Математика. – 2007. – № 3. – С. 22–28.
9. Костина, Т.И. Нелокальное вычисление ключевых функций в задаче о периодических решениях вариационных уравнений / Т.И. Костина // Вестник Воронежского государственного университета. Серия: Физика. Математика. – 2011. – № 1. – С. 181–186.
10. Сапронов, Ю.И. Моделирование диффузорных течений жидкости посредством редуцированных уравнений / Ю.И. Сапронов // Вестник ЮУрГУ. Серия: Математическое моделирование и программирование. – 2014. – Т. 7, № 2. – С. 74–86.
11. Красносельский, М.А. Итерационный процесс с минимальными невязками / М.А. Красносельский, С.Г. Крейн // Математический сборник. – 1952. – Т. 31 (73), № 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 Воронежского государственного университета. – 2003. – С. 74–83.
14. Ковалева, М.И. Огибающие кривые, точки возврата и бифуркационный анализ нелинейных задач // М.И. Ковалева, Т.И. Костина, Ю.И. Сапронов. – Воронеж: Военный учебно-научный центр Военно-воздушных сил «Военно-воздушная академия имени профессора Н.Е. Жуковского и Ю.А. Гагарина», 2015. – 242 с.

Андрей Сергеевич Коротких, аспирант, кафедра математического моделирования, Воронежский государственный университет (г. Воронеж, Российская Федерация), korotkikh.andrey@gmail.com.

Поступила в редакцию 20 сентября 2016 г.

STATIONARY POINTS OF THE "REACTION-DIFFUSION" EQUATION AND TRANSITIONS TO STABLE STATES

A.S. Korotkikh, Voronezh State University, Voronezh, Russian Federation,
korotkikh.andrey@gmail.com

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

Keywords: continuously differentiable functional; extremal; bifurcation; Lyapunov – Schmidt method.

References

1. Mikhlin S.G. *Variational Methods in Mathematical Physics*. Oxford, London, Edinburgh, N.Y., Paris, Frankfurt, Pergamon Press, 1964. 584 p. DOI: 10.1002/zamm.19650450439
2. Darinskii B.M., Sapronov Y.I., Tsarev S.L. Bifurcations of Extremals Fredholm Functional. *Journal of Mathematical Science*, 2007, vol. 145, issue 6, pp. 5311–5453. DOI: 10.1007/s10958-007-0356-2
3. Murray J.D. *Lectures on Nonlinear Differential-Equation. Models in Biology About the Models*. Oxford, Clarendon Press, 1977.
4. Hassard B.D., Kazarinoff N.D., Wan Y.-H. *Theory and Applications of Hopf Bifurcation*. Cambridge, Cambridge University Press, 1981. 320 p.
5. Kazarnikov A.V., Revina S.V. The Onset of Auto-Oscillations in Raileigh Systems with Diffusion. *Bulletin of South Ural State University. Series: Mathematical Modelling, Programming and Computer Software*, 2016, vol. 9, no. 2, pp. 16–28. (in Russian) DOI: 10.14529/mmp160202
6. Sviridyuk G.A. Quasistationary Trajectories of Semilinear Dynamical Equations of Sobolev Type. *Russian Academy of Sciences. Izvestiya Mathematics*, 1994, vol. 42, no. 3, pp. 601–614. (in Russian) DOI: 10.1070/IM1994v04n03ABEH001547
7. Sviridyuk G.A., Zagrebina S.A. On the Verigin Problem for the Generalized Boussinesq Filtration Equation. *Russian Mathematics (Izvestiya VUZ. Matematika)*, 2003, vol. 47, no. 7, pp. 55–59. (in Russian)
8. Zagrebina S.A. On the Showalter – Sidorov Problem. *Russian Mathematics (Izvestiya VUZ. Matematika)*, 2007, vol. 51, no. 3, pp. 19–24. (in Russian) DOI: 10.3103/S1066369X07030036
9. Kostina T.I. [Nonlocal Calculation of Key Functions in the Problem of Periodic Solutions of Variational Equations]. *Proceeding of Voronezh State University. Series: Physics. Mathematics*, 2011, no. 1, pp. 181–186. (in Russian)

10. Sapronov Yu.I. Modelling Liquid Flows in Diffusers by Reduced. *Bulletin of South Ural State University. Series: Mathematical Modelling, Programming and Computer Software*, 2014, vol. 7, no. 2, pp. 74–86. (in Russian) DOI: 10.14529/mmp140207
11. Krasnosel'skij M.A., Krejn S.G. [The Iterative Process Minimal Residuals]. *Sbornik: Mathematics*, 1952, vol. 31 (73), no. 2, pp. 315–334. (in Russian)
12. Lemeshko A.A. [Uniform Convergence with Derivatives Galerkin Approximations to the Solutions of Equations with Parameters]. *Matematicheskij modeli i operatornye uravnenija* [Mathematical Models and Operator Equations], 2003, vol. 2, pp. 94–103. (in Russian)
13. Lemeshko A.A. [Uniform Convergence of Newton's Approximations to Solutions of Equations with Parameters]. *Sbornik trudov molodyh uchenyh matematicheskogo fakul'teta Voronezhskogo gosudarstvennogo Universiteta* [Proceedings of Young Scientists Mathematical Faculty of Voronezh State University], 2003, pp. 74–83. (in Russian)
14. Kovaleva M.I., Kostina T.I., Sapronov Y.I. *Ogibayushchie krivye, tochki vozvrata i bifurkatsionnyy analiz nelineynykh zadach* [The Envelope Curve, the Point of Return and Bifurcation Analysis of Nonlinear Problems]. Voronezh, Military Training and Research Center of the Air Force "Air Force Academy named after Professor N.E. Zhukovsky and Y.A. Gagarin", 2015. 242 p.

Received September 20, 2016