

Осциллирующие решения системы уравнений Аллена—Кана/Кана—Хилларда: модель спиноподального распада

© И.Б. Краснюк

Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина Национальной академии наук Украины,
83114 Донецк, Украина

E-mail: kras@kinetic.ac.donetsk.ua

(Поступила в Редакцию в окончательном виде 10 марта 2006 г.)

Рассмотрена краевая задача для системы уравнений Кана/Новик-Коэн, представляющая собой квазиконтинуальную модель соответствующей решеточной модели для сплава Fe—Al. Такая задача описывает процессы фазового расслоения (спиноподального распада) и упорядочения атомов на подрешетках одновременно. Показано, что возможны три сценария эволюции системы: 1) на фоне неупорядоченного состояния $v = 0$ при больших временах $t \rightarrow \infty$ развиваются пространственно неоднородные распределения концентрации u относительно некоторого постоянного распределения $u = u_m$, зависящего от средней массы m ; 2) на фоне постоянной концентрации $u = u_m$ развиваются при $t \rightarrow \infty$ пространственно неоднородные распределения параметра порядка; 3) при определенном наборе параметров (например, безразмерной температуре $\theta = T/T_c$), где T_c — критическая температура) возможно одновременное развитие сценариев 1 и 2. Полученные результаты сравниваются с численным и реальным экспериментами на примере тонкой квазидвумерной пленки, состоящей из бинарной смеси, с так называемыми несимметричными граничными условиями „смачивания“ в постоянном магнитном поле.

PACS: 68.10.Gv, 68.15.+e, 75.60.Gh, 82.40.Bj, 79.60.Ht

В настоящей работе рассматривается начально-краевая задача для системы уравнений Кана—Хилларда и Аллена—Кана [1]. Существуют условия, накладываемые на свободную энергию Гинзбурга—Ландау, когда ее решения при $t \rightarrow \infty$ сходятся к соответствующим решениям стационарных уравнений [2]. Другими словами, краевая задача имеет глобальный минимальный аттрактор, который состоит из осциллирующих притягивающих решений.

Как устроены такие стационарные решения? Ответ известен для уравнения Аллена—Кана

$$u_t = \epsilon^2 u_{xx} - F_{vv}(u, 0)v \quad (1)$$

с граничными условиями Дирихле

$$v(0, t) = 0, \quad v(L, t) = 0, \quad t > 0, \quad (2)$$

где v — параметр порядка, а u — постоянная (по предположению) концентрация, $\epsilon > 0$ — малый параметр, $F(u, v)$ — свободная энергия системы.

Действительно, спектр линейного оператора $Au = -v''$ состоит из простых собственных значений $\lambda_n = \epsilon^2(\pi^2/L^2)n^2$, $n = 1, 2, 3, \dots$, с собственными функциями $v_n(x) = (2/L)^{1/2} \sin(\epsilon n \pi x/L)$. В результате для спектральной задачи [3]

$$-\epsilon^2 v_n'' + F_{vv}(u, 0)v_n = \lambda_n^D v_n$$

собственные значения должны удовлетворять соотношению

$$\lambda_n^D - F_{vv}(u, 0) = \epsilon^2 \left(\frac{\pi}{L}\right)^2 n^2.$$

Оператор A обладает свойством положительной определенности $(Av, v) \geq 0$, где (\cdot, \cdot) — скалярное произведение в L_2 -пространстве квадратично-интегрируемых

функций. Тогда нетрудно показать, что неравенство

$$\lambda_n^D > F_{vv}(u, 0), \quad 0 < u < 1, \quad (3)$$

является необходимым и достаточным условием существования нетривиальных решений спектральной задачи. Условие (3) при $F_{vv}(u, 0) > 0$ совпадает с классическим условием несмешивания бинарной смеси, если в качестве параметра порядка выбрать концентрацию. При этом энтропийные члены доминируют и делают смешивание невыгодным [4].

Краевая задача (1), (2) называется задачей Чэфи—Инфанте [5,6], и для нее известно, что если выполняется неравенство

$$\epsilon^2 \left(\frac{\pi}{L}\right)^2 n^2 < -F_{vv}(u, 0) < \epsilon^2 \left(\frac{\pi}{L}\right)^2 (n+1)^2, \quad (4)$$

то существует ровно $2n+1$ стационарных решений: $v_0 = 0$ и v_k^+ ($k = 1, 2, 3, \dots, n$), причем функции v_k^+ обращаются в нуль на интервале $0 < x < L$ ровно $k-1$ раз. Неравенство (4) можно также записать в виде

$$n^2 < \lambda = -F_{vv}(u, 0) \left(\frac{L}{\pi\epsilon}\right)^2 < (n+1)^2.$$

Из последних неравенств следует условие $F_{vv}(u, 0) < 0$, т.е. при некотором $\alpha > \alpha_c$ (где α_c — постоянная Флори) на графике $F(u, 0, \alpha)$ появится область отрицательной кривизны, что в соответствии с классическим сценарием (см. [4], стр. 113) приводит к тому, что при $n=1$ система может расслаиваться на две фазы. При $0 < \lambda < 1$ решения глобально асимптотически устойчивы и спиноподального распада нет, несмотря на то что $F_{vv}(u, 0) < 0$. Если $\lambda > 1$, то нулевое решение

становится неустойчивым, однако возникают устойчивые стационарные решения v_1^+ , но функции v_0 и v_k^+ при $k > 1$ не обладают этим свойством [3].

Перенесем сформулированные результаты на уравнение Кана–Хилларда. В [7] показано, что для этого уравнения с граничными условиями Дирихле множество стационарных решений включает аттрактор задачи Чэфи–Инфанте. Для уравнения Кана–Хилларда с граничными условиями Дирихле масса не сохраняется. Если средняя масса сохраняется, то для уравнения Кана–Хилларда с граничными условиями Неймана аттрактор задачи топологически устроен аналогично стационарным решениям задачи Чэфи–Инфанте (см. [8], стр. 2381).

Тогда имеет место следующее утверждение [8]: существует стационарное решение уравнения Кана–Хилларда, которое обращается в нуль k раз на интервале $[0, L]$, со средней массой m , если существует монотонное стационарное решение уравнения Кана–Хилларда со средней массой m на интервале $[0, L/k]$ (это утверждение справедливо и для задачи Дирихле, и для задачи Неймана с той разницей, что в первом случае средняя масса не сохраняется).

Для аналогичной задачи Неймана собственные значения равны $\lambda_j = \epsilon^2(j-1)^2\pi^2/L^2$, а собственные функции $u_j = \cos(\sqrt{\lambda_j}x)$ [9]. Тогда спектр задачи Неймана для уравнения (1) состоит из собственных значений

$$\lambda_j \frac{\epsilon^2(j-1)^2\pi^2}{L^2} + F_{vv}(u, 0) > 0, \quad j = 1, 2, 3, \dots, \quad (5)$$

которые всегда должны быть положительными в силу требования нетривиальной разрешимости задачи (см. [3], стр. 24). При $j = 1$ из неравенства (5) следует классическое условие несмешивания (устойчивости) $F_{vv}(u, 0) > 0$ или отсутствия спинодального распада.

Аналогично, если мы рассматриваем задачу Дирихле (2) для уравнения Кана–Хилларда, спектр задачи состоит из собственных значений [3]

$$\lambda_n^D = F_{uu}(u_m, v) + \epsilon^2 \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2.$$

Здесь параметр порядка $-1/2 < v < 1/2$ предполагается постоянным, а u_m — некоторое стационарное решение уравнения Кана–Хилларда.

Условие

$$\epsilon^2 \left(\frac{\pi}{L}\right)^2 n^2 < -F_{uu}(u_m, v) < \epsilon^2 \left(\frac{\pi}{L}\right)^2 (n+1)^2, \quad n = 1, 2, \dots, \quad (6)$$

возникает из возможности редукции задачи Кана–Хилларда с краевыми условиями Дирихле к задаче Аллена–Кана с условиями Дирихле [8,10], где параметр порядка $-1/2 < v < 1/2$ предполагается постоянным, а u_m — некоторое стационарное решение уравнения

Кана–Хилларда. В частности, неравенства (6) выполняются в точке $(u_m, v) = (1/2, 0)$, принадлежащей кривой спинодального распада.

Свободная энергия системы представима в виде [1]

$$F(u, v) = f_1(u, \theta, \alpha) + f_2(v, \theta, \beta), \quad (7)$$

где α — параметр Флори, а β — коэффициент связи по параметру порядка. Тогда система уравнений имеет семейство стационарных решений $(u, v) = (u_m, 0)$, где средняя масса m играет роль параметра; $u_m = u_m(\alpha, \beta, \theta)$. В каждой из таких точек система Кана–Хилларда и Аллена–Кана расщепляется на два независимых уравнения. Это связано с выбором свободной энергии в „разделяющихся“ переменных (7).

Следовательно, мы можем отдельно рассмотреть краевую задачу для уравнения Кана–Хилларда и доказать, что для заданной функции $F(u, v)$ она имеет глобальный аттрактор. Это означает, что при $t \rightarrow \infty$ нестационарные решения, попадающие в область притяжения аттрактора, сходятся к решениям стационарных уравнений с краевыми условиями Дирихле или Неймана. Доказательство сводится к тривиальной проверке для $F(u, v)$, где роль „параметра“, условий существования минимального аттрактора [11] для уравнения Кана–Хилларда с краевыми условиями Неймана. Наконец, в [12], приведено доказательство существования максимального аттрактора для системы связанных уравнений типа Кана–Коэн.

Мы интегрируем краевую задачу для уравнения Кана–Хилларда и показываем, как устроено многопараметрическое множество решений, т.е. аттрактор задачи (при этом ограничиваемся одним параметром — средней сохраняющейся массой m). Спектр краевой задачи для уравнения Кана–Хилларда имеет вид [9]

$$\lambda_{j,m}^H = \sigma(L_s^2) = \{\epsilon^2(j-1)^2 - F_{uu}(u_m, 0)\}, \quad j = 1, 2, \dots,$$

где $u_m = u_m(\theta, \alpha)$, $-1/2 < v < 1/2$ (ср. с (5)). Из этого соотношения легко получить критерий существования осциллирующих решений с j критическими точками, аналогичный критерию (6). Отличие состоит лишь в том, что теперь „параметром“ является постоянное достаточно малое решение уравнения Аллена–Кана, а колебания решений следует рассматривать для уравнения Кана–Хилларда относительно постоянного решения $u = u_m$. Условие разрешимости задачи (существования нетривиальных решений) является выполнение неравенства $\lambda_{j,m}^H > 0$.

Отметим, что существование глобального аттрактора для уравнений Кана–Хилларда с граничными условиями Неймана (и Дирихле) известно [8–12]. Существование аттрактора для уравнения Аллена–Кана с граничными условиями Дирихле рассматривалось в монографии [3]. В [2] для системы Аллена–Кана и Кана–Хилларда с постоянным коэффициентом подвижности и свободной энергией — полиномом четвертой степени — доказаны теоремы существования и единственности, гладкости

решений, а также существование так называемых инерционных множеств, включающих аттрактор задачи.

Представляют интерес аналитические критерии существования предельных решений ($t \rightarrow \infty$) для системы Кана–Хилларда и Аллена–Кана. Мы устанавливаем такой критерий при специальном выборе начальных условий из области притяжения аттрактора, которая состоит из достаточно малой окрестности притягивающей стационарной точки $(u, v) = (1/2, 0)$, определяющей начальную стадию спиноподобного распада. Здесь точка $u_c = 1/2$ отвечает минимальному значению параметра α , достигаемому на спиноподобии, и соответствует симметричному случаю (см. [4], стр. 116).

В Приложении 1 мы доказываем, что краевая задача для уравнения Кана–Хилларда удовлетворяет интегральному соотношению

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|u\|^2 + \|\Delta u\|^2 = -(F_{uu}(u, v), u_x^2),$$

где $\|\cdot\|$ и (\cdot, \cdot) — норма и скалярное произведение в пространстве квадратично-интегрируемых функций L_2 . Из этого равенства вытекает необходимое условие существования глобального аттрактора краевой задачи Неймана

$$F_{uu}(u, v) > 0, \quad (u, v) \in O_h(u_m, 0), \quad (8)$$

где $O_h(u_m, 0)$ — достаточно малая h -окрестность стационарной точки $(u_m, 0)$. Для задачи Дирихле это неравенство не изменяется.

Из (8) следует, что для достаточно малых $\|v\| > 0$ концентрация $\|v(x, t)\|$ в норме пространства L_2 (а следовательно, и по норме гладких функций) при $t \rightarrow \infty$ стремится к постоянному решению. Неравенство (8) является критерием возможности редукции системы Аллена–Кана и Кана–Хилларда к одному уравнению Кана–Хилларда. Аналогичный критерий (здесь его не приводим) можно получить для обоснования строгого перехода от общей системы к одному уравнению Аллена–Кана. Если неравенство (8) не выполняется, возникают известные неустойчивости Крзановского (см. [1]).

В качестве приложения сформулированных результатов рассматривается краевая задача о распределении компоненты концентрации в пленке, состоящей из бинарной смеси, с несимметричными граничными условиями вида [13]

$$h + gu(0) + vu_y(0) = 0, \quad u_y(L) = 0. \quad (9)$$

В [14] рассматривались нестационарные симметричные граничные условия вида (9) (слева) на каждой из поверхностей пленки. Важность исследования при несимметричных граничных условиях мотивирована тем, что в эксперименте две поверхности пленки не являются эквивалентными (одна из поверхностей граничит с воздухом или вакуумом, а другая — с твердой подложкой).

В граничном условии (9) нормированное магнитное поле h действует на приповерхностные слои пленки. Параметр v определяется объемной корреляционной длиной, т.е. $v \propto 4\xi_b^3$. Параметр g зависит от взаимодействия с ближайшими соседями в приповерхностных слоях и дополнительно от отношения J_s/J , где J_s определяет силу парного взаимодействия в ближайших слоях, параллельных поверхности пленки, а J является аналогичной величиной во всем объеме пленки.

При $h = g = 0$ число колебаний концентрации по сечению пленки определяется условиями, аналогичными неравенствам (6). При $h \neq 0$ и $g \neq 0$ граничному условию (9) по аналогии со случаем $h = g = 0$ можно поставить в соответствие бифуркационный параметр $a = a(h, g, v)$, такой, что при всех

$$a_j < a < a_{j+1}, \quad j = 0, 1, 2, \dots, \quad (10)$$

распределение концентрации в тонкой пленке испытывает ровно j колебаний по ее сечению. В настоящей работе показано, что параметр g/v является бифуркационным в смысле определения (10). Отметим, что аналогичный (10) результат получен численно в [13] (см. рис. 2 в указанной работе); при этом рассчитано лишь несколько колебаний плотности по сечению пленки.

1. Постановка задачи

Рассмотрим систему уравнений Аллена–Кана и Кана–Хилларда [1]

$$u_t = [\omega_1 Q(u, v)(F_u(u, v) - \epsilon^2 u_{xx})]_x, \quad (11)$$

$$v_t = -\omega_2 Q(u, v)(F_v(u, v) - \epsilon^2 v_{xx}) \quad (12)$$

с граничными условиями

$$u_x = v_x = \omega_1 Q(u, v)(F_u(u, v) - \epsilon^2 u_{xx})_x = 0|_{x=0,1}, \quad t > 0, \quad (13)$$

и начальными условиями

$$u(x, 0) = u_0(x), \quad v(x, 0) = v_0(x), \quad 0 < x < 1, \quad (14)$$

где u — концентрация, v — параметр порядка.

Краевая задача (11)–(14) представляет собой модель системы, которая одновременно описывает процессы упорядочения и фазового расслоения в бинарных смесях. Система (11), (12) получена в квазиконтинуальном приближении из решеточной модели [15] и моделирует процессы расслоения с учетом упорядочения атомов на объемно центрированной решетке для бинарного сплава Fe–Al. Существование предельных (инерционных) множеств при $t \rightarrow \infty$ (стационарных решений системы (11), (12)) доказано в [2]. Такие решения являются неограниченно продолжимыми при всех $t > 0$ и принимают значения из области $0 < u + v < 1$ и $0 < u - v < 1$.

Свободная энергия системы определяется по формуле

$$\tilde{F} = \int_0^1 \left(F(u, v) + \frac{1}{2} \epsilon^2 \{ |u|^2 + |v|^2 \} \right) dx,$$

где

$$F(u, v) = \frac{\theta}{2} [G(u+v) + G(u-v)] + \alpha u(1-u) - \beta v^2, \quad \alpha, \beta > 0,$$

$$G(s) = s \ln s + (1-s) \ln(1-s), \quad \theta = T/T_c,$$

G — энтропия системы, а параметр ϵ пропорционален ширине антифазного слоя и, следовательно, величине поверхностной энергии системы, T_c — критическая температура фазового расслоения.

Функция F определена в квадрате

$$B = \{(u, v) \in R^2: 0 < u+v < 1, 0 < u-v < 1\},$$

а функция Q представляет собой коэффициент подвижности, который может быть задан соотношением $Q(u, v) = u(1-u)(1/4 - v^2)$. Такая форма удовлетворяет физическому требованию обращения в нуль коэффициента подвижности в упорядоченных фазах и является аналитически удобной при математическом моделировании [1]. Напомним, что u и v представляют собой сохраняющийся (концентрация) и несохраняющийся параметры порядка соответственно. Положим $\omega_1 = \omega_2 = 1$, а коэффициент подвижности будем считать постоянным в точке $(u, v) = (u_m, 0)$, которую определим далее. Роль постоянного коэффициента подвижности сводится к перенормировке времени в соответствующих уравнениях.

2. Исследование асимптотического поведения решений краевой задачи в окрестности неупорядоченной фазы

Краевая задача (11)–(14) допускает существование глобального аттрактора [2]. Это означает, что при $t \rightarrow \infty$ для специального класса начальных функций (попадающего в область притяжения аттрактора) решения краевой задачи сходятся к стационарным решениям. Следовательно, при $t \rightarrow \infty$ можно ограничиться исследованием стационарных решений системы (11), (12), удовлетворяющих граничным условиям (13).

Определим сначала стационарные точки системы (11), (12) как решения уравнений $F_u(u, v) = 0$ и $F_v(u, v) = 0$, где

$$F_u(u, v) = \frac{\theta}{2} [G'(u+v) + G'(u-v)] + \alpha(1-2u), \quad (15)$$

$$F_v(u, v) = \frac{\theta}{2} [G'(u+v) - G'(u-v)] - 2\beta v. \quad (16)$$

Тогда из (15), (16) следует, что $(u, v) = (1/2, 0)$ является решением системы.

Нам понадобятся также выражения для вторых производных

$$F_{uu}(1/2, 0) = 2(\theta - \alpha), \quad F_{vv}(1/2, 0) = -2\beta,$$

$$F_{uv}(1/2, 0) = 0, \quad F_{vu}(1/2, 0) = 0. \quad (17)$$

Покажем, что стационарное уравнение четвертого порядка (11) с граничными условиями (13) допускает редукцию к семейству уравнений второго порядка с граничными условиями Неймана. Действительно, уравнение (11) допускает редукцию к уравнению

$$Q(u, v)(F_u(u, v) - \epsilon^2 u_{xx})_x = C, \quad Q(u, v) \neq 0, \quad (18)$$

где C — постоянная. Поскольку мы рассматриваем достаточно гладкие решения, т.е. такие решения, которые удовлетворяют уравнению не только внутри области $0 < x < 1$, но и на ее границе, из краевых условий (13) следует, что в соотношении (18) следует положить $C = 0$ в силу требования гладкого согласования.

Интегрирование уравнения

$$(F_u(u, v) - \epsilon^2 u_{xx})_x = 0$$

в свою очередь приводит к уравнению

$$F_u(u, v) - \epsilon^2 u_{xx} = a, \quad (19)$$

где a — постоянная.

Из (19) следует, что система стационарных уравнений (11)–(13) допускает редукцию к системе уравнений второго порядка

$$\epsilon^2 u_{xx} - F_u(u, v) + a = 0, \quad (20)$$

$$\epsilon^2 v_{xx} - F_v(u, v) = 0 \quad (21)$$

с граничными условиями Неймана (13).

Выполним замену $y = x/\epsilon$, $L = 1/\epsilon$ и определим функции $u = u(\epsilon y)$ и $v = v(\epsilon y)$. Тогда уравнения (20), (21) можно записать в виде

$$u_{yy} - F_u(u, v) + a = 0, \quad (22)$$

$$v_{yy} - F_v(u, v) = 0 \quad (23)$$

с граничными условиями

$$u_y(0) = u_y(L) = 0, \quad v_y(0) = v_y(L) = 0. \quad (24)$$

Решения определим из системы уравнений $F_u(u, v) = a$ и $F_v(u, v) = 0$, где функции F_u и F_v заданы соотношениями (15) и (16). Второе уравнение имеет решение $(u, 0)$ при $0 < u < 1$, а решения первого уравнения $F_u(u, 0) = a$ определяются из соотношения

$$\ln \frac{u}{1-u} + \alpha(1-2u) = \frac{a}{\theta},$$

которое в окрестности точки $u = 1/2$ можно линеаризовать. В результате получим приближенную компоненту решения

$$u = \frac{a + 2\theta - \alpha}{4\theta - 2\alpha}$$

в неупорядоченной фазе $v = 0$ (отсюда при $\theta \rightarrow \infty$ получаем решение $u = 1/2$, а при $\theta \rightarrow 0$ — решение $u = 1/2 - a/2\alpha$). Система имеет постоянное решение вида $(u, v) = (u_a, 0)$, где $u_a = u(a, \theta, \alpha)$ при фиксированных θ и α . Заметим, что $(u_0, 0) = (1/2, 0)$ удовлетворяет соотношениям (17).

Пусть (u, v) есть решение системы (22), (23). Тогда интегрирование уравнения (22) с учетом граничных условий (24) приводит к определению

$$a = \frac{1}{L} \int_0^L F_u(u, v) ds.$$

Линеаризация системы (22)–(24) в точке $(u_a, 0)$ приводит к уравнениям

$$u_{yy} - F_{uu}(u_a, 0)u = 0, \quad u \rightarrow u - u_a, \quad (25)$$

$$v_{yy} - F_{vv}(u_a, 0)v = 0 \quad (26)$$

с граничными условиями Неймана (24).

Для решений уравнений (25), (26) можно рассматривать либо задачу Дирихле, либо задачу Неймана. Рассмотрим вначале задачу Дирихле. Несмотря на то что уравнения (25) и (26) независимы в линейном приближении, их (нелинейные) возмущения в окрестности решения $(u, v) = (0, 0)$ могут оказаться асимптотически неустойчивыми.

Для асимптотической устойчивости по параметру порядка достаточно выполнения неравенства [3]

$$0 < -F_{vv}(u_a, 0) < \left(\frac{\pi}{L}\right)^2. \quad (27)$$

В силу определения (16) неравенства (27) можно записать в виде

$$0 < \theta G''(u_a, 0) - 2\beta < \left(\frac{\pi}{L}\right)^2, \quad (28)$$

где $G''(u_a, 0) > 0$ в силу определения энтропии. Например, при $G''(u_0, 0) = 1/4$ неравенство (28) можно записать в виде

$$0 < 4\theta - 2\beta < \left(\frac{\pi}{L}\right)^2. \quad (29)$$

Неравенство (29) в высокотемпературном пределе $2\theta > \beta$ для достаточно тонких пленок всегда выполняется.

В области значений параметров, где выполняются неравенства (28), система (25), (26) допускает редукцию к одному уравнению (25) с граничными условиями Дирихле. На фоне асимптотически неупорядоченного

состояния $\|v(x, t)\| \rightarrow 0$ по норме L_2 при $t \rightarrow \infty$ равномерно по $0 < x < L$ могут развиваться колебания концентрации как функции пространственной переменной. Число колебаний концентрации определяется неравенствами [3]

$$\left(\frac{\pi}{L}\right)^2 n^2 < -F_{uu}(u_a, 0) < \left(\frac{\pi}{L}\right)^2 (n+1)^2, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (30)$$

Неравенства (30) в силу определения (15) можно записать в виде

$$\begin{aligned} \left(\frac{\pi}{L}\right)^2 n^2 < 2\alpha - \theta G''(u_a, 0) \\ < \left(\frac{\pi}{L}\right)^2 (n+1)^2, \quad n = 0, 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (31)$$

При $n = 0$ из (31) следует неравенство $2\alpha - 4\theta > 0$. Тогда из условия $4\theta - 2\beta > 0$ для параметра порядка и неравенства $2\alpha - 4\theta > 0$ для концентрации вытекает, что $2(\alpha - \beta) > 0$. Следовательно, при

$$2\beta < 2\alpha < 4\theta + \left(\frac{\pi}{L}\right)^2$$

на фоне асимптотически неупорядоченной фазы $v = 0$ возникает асимптотически постоянное распределение концентрации

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \|u(x, t)\| = u_a, \quad 0 < x < L,$$

где $\|\cdot\|$ — норма в пространстве L_2 (см. Приложение 1).

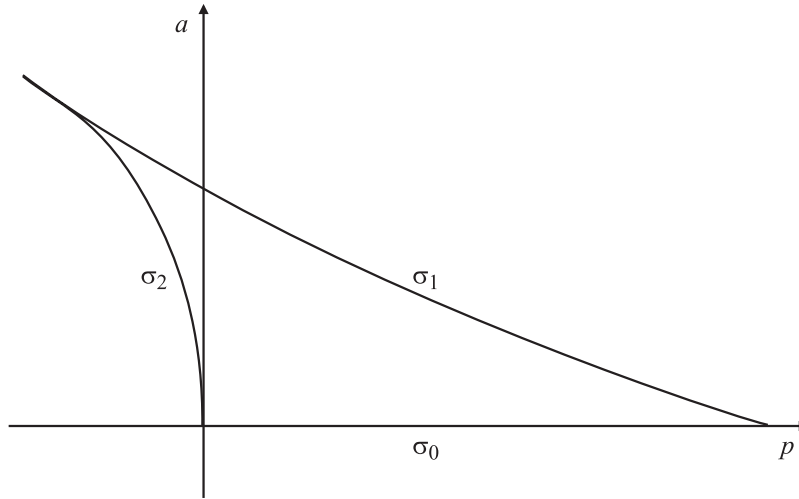
При $n = 1$ из (30) получаем неравенства

$$\left(\frac{\pi}{L}\right)^2 < -F_{uu}(u_a, 0) < 2 \left(\frac{\pi}{L}\right)^2. \quad (32)$$

Если неравенства (32) выполняются, то нулевое решение становится неустойчивым и возникает устойчивое пространственное неоднородное решение, обращающееся в нуль в точке $u = u_a$. Такое расслоение концентрации описывает начальную стадию спиноподобного распада, а само решение можно рассматривать как антифазную поверхность. При $n > 1$ распределения концентрации являются метастабильными и имеют n колебаний на интервале $0 < x < L$.

3. Структура аттрактора и бифуркационная диаграмма решений краевой задачи для уравнения Кана–Хилларда

Как отмечал еще Флори [4], свободная энергия $F(u) = \alpha u(1-u)$ хорошо „работает“ при низких концентрациях. Наиболее удобна для физических приложений форма свободной энергии $F(u) = a_1 u^2/2 + a_2 u^4/4 + \dots$, где a_1 и a_2 зависят от температуры.



Внутренность $\text{Int}(\sigma_2 U \sigma_1 U \sigma_0)$ области $U_{i=0}^2 \sigma_i$, определяющая множество осциллирующих решений в пространстве параметров (p, a) . В частности, $p = F[A, a]$, где F — свободная энергия системы; $A = u(0, t)$, $t > 0$, где u — концентрация; $a = a(m, u_y(0), u_y(L))$, где m — средняя масса. Для задачи Неймана при $m \sim 1/2$ имеем $a \sim 0$.

Тогда уравнение (25) можно записать в виде

$$u_{yy} - u^3 + \alpha u - a = 0, \quad u_y(0) = u_y(L) = 0. \quad (33)$$

Множество решений уравнения (33) можно параметризовать двумя параметрами $p, a \in \Sigma$ таким образом, что

$$p = \frac{1}{2} u_y^2 + F(u, a, \alpha),$$

$$F(u, a, \alpha) = \frac{u^4}{4} - \frac{u^2}{2} + \alpha u, \quad (34)$$

где p — некоторая постоянная. При $a \in I_a$ функция F имеет минимум $(u_a(\alpha), a)$ и два максимума в точках $(u_a^1(\alpha), a)$ и $(u_a^2(\alpha), a)$, где

$$a \in I_a = \left(-\frac{2}{3\sqrt{3}}, \frac{2}{3\sqrt{3}} \right)$$

есть интервал значений a , при которых краевая задача имеет нетривиальные решения.

Определим

$$p_{\min}(a) = F(u_a^-, a) < p_{\max}(a) = \min_{i \in \{1,2\}} F(u_a^i, a).$$

Тогда соотношения (34) допускают монотонные решения при всех $p \in (p_{\min}(a), p_{\max}(a))$.

Определим далее „допустимую область“

$$\Sigma = \left\{ (p, a) \mid a \in I_a, p \in (p_{\min}(a), p_{\max}(a)) \right\}.$$

Тогда для каждой точки $(p, a) \in \Sigma$ оказывается возможным определить „период“ (полупериод) $L = L(p, a)$ и среднюю массу

$$m(p, a) = \frac{1}{L} \int_0^L u(y; p, a) dy,$$

где функция $u(y; p, a)$ удовлетворяет соотношениям (34).

Геометрия области Σ известна [8]. В частности, допустимая область симметрична относительно оси p , поэтому в дальнейшем ограничимся случаем $a \geq 0$ и определим область $\Sigma^+ = \Sigma \{a \geq 0\}$. Граница области Σ^+ состоит из кривых, параметризованных переменной p . Аналитически эти кривые задаются формулами [8,10]

$$\sigma_0 = \left\{ (p, 0), 0 < p < \frac{1}{4} \right\}, \quad (35)$$

$$\sigma_1 = \left\{ (p, a_1(p)) \right.$$

$$\left. = \left(\sqrt{\frac{1}{27} - \frac{4p}{3} + \frac{1}{27} (12p+1)^{3/2}}, -\frac{1}{12} \leq p \leq \frac{1}{4} \right) \right\}, \quad (36)$$

а кривая σ_2 определяется аналогично (см. рисунок). Кривые σ_0 и σ_1 пересекаются в точке $(p, a) = (\frac{1}{4}, 0)$; кривые σ_0 и σ_2 пересекаются в точке $(p, a) = (-\frac{1}{12}, \frac{2}{3\sqrt{3}})$.

Множество

$$C_{L_0} = \{(p, a) \mid L(p, a) = L_0\}$$

определяет точки $(p, a) \in \Sigma^+$, такие, что для некоторого m , удовлетворяющего условию $L(p, a) = L_0$, существует решение системы (34).

Аналогично множество

$$C_{m_0} = \{(p, a) \mid m(p, a) = m_0\}$$

определяет точки $(p, a) \in \Sigma^+$, такие, что существует монотонное решение системы (34) при $m = m_0$. Очевидно, что если C_{L_0} и C_{m_0} непусто, то их пересечение отвечает некоторому решению уравнения (33) (но не обязательно с нулевым граничным условием Неймана!).

Если выполняются нулевые граничные условия Неймана, из (34) следует, что должны выполняться соотношения

$$p = G[u(0, t), a], \quad p = G[u(L, t), a],$$

откуда в свою очередь вытекают условия периодичности

$$u(0, t) = u(L, t), \quad t > 0. \quad (37)$$

Таким образом, множество Σ^+ не связано (кроме как соотношениями (34)) с конкретными граничными условиями. Это позволит в следующем разделе рассмотреть в качестве приложения к сформулированному результату геометрию пленки (состоящей из бинарной смеси) с так называемыми граничными условиями смачивания. При этом форма множества $\hat{\Sigma}^+$, зависящая от других параметров, топологически сохраняется (математически это утверждение имеет простое объяснение).

Линеаризация уравнения (33) в точке $u = u_a^-$ приводит к уравнению

$$u_{yy} + \left(\frac{L}{\pi}\right)^2 (1 - 3u_a^{-2})(u - u_a^-) = 0. \quad (38)$$

В уравнении (38) мы выполнили нормировку $y \rightarrow (\pi/L)y$.

Тогда применение результатов [8] приводит к следующему утверждению: при всех

$$\frac{n^2}{1 - 3u_a^{-2}} < \left(\frac{L}{\pi}\right)^2 < \frac{(n+1)^2}{1 - 3u_a^{-2}} \quad (39)$$

краевая задача (33) имеет единственное решение с n критическими точками на интервале $0 < y < \pi$.

Более общий результат (на основе нелинейного анализа) в простейшем варианте формулируется следующим образом [8]: для всех $0 < m < 1/\sqrt{3}$ и всех $n = 0, 1, \dots$ существуют две ветви стационарных решений для уравнения Кана–Хилларда с n внутренними критическими точками, которые являются бифуркациями из тривиального решения при

$$L(n) = \frac{(n+1)\pi}{2\sqrt{1-3m^2}}. \quad (39a)$$

Если положить $u_a^- = m = 1/2$, то формулы (39) и (39a) приводят к одному результату.

4. Приложение к геометрии тонкой пленки

При условии, что корреляционная длина ξ_b много больше постоянной решетки, для соответствующей квазиконтинуальной модели можно рассматривать статические граничные условия [13,14]

$$u_y(0, t) = -\frac{h}{v} - \frac{g}{v} u(0, t), \quad (40)$$

$$u_y(L, t) = \frac{h}{v} + \frac{g}{v} u(L, t), \quad t > 0. \quad (41)$$

Заметим, что соотношения (40), (41) должны удовлетворять следующим условиям:

$$p = \frac{1}{2} u_y^2(0, t) + G[u(0, t), a],$$

$$p = \frac{1}{2} u_y^2(L, t) + G[u(L, t), a].$$

Не слишком ограничивая общность изложения, потребуем дополнительно выполнения условия периодичности (37); это позволит в дальнейшем ограничиться лишь одним из условий смачивания (40), (41). В частности, достаточно рассмотреть соотношение

$$p = \frac{1}{2} u_y^2(0, t) + G[u(0, t), a].$$

Рассмотрим сначала область параметров $\{a = 0, 0 < p < 1/4\}$ и введем обозначение $u(0, t) = A$. Тогда из (35) следует, что при $0 < p < 1/4$ выполняются неравенства

$$0 < \frac{1}{2} u_y^2(0, t) + G[A, 0] < \frac{1}{4}. \quad (42)$$

Следовательно, в области, определяемой неравенством (42), возможно существование осциллирующих решений.

С учетом граничного условия смачивания (40) неравенства (42) можно записать в виде

$$0 < \frac{1}{2} \left(-\frac{h}{v} - \frac{g}{v} A\right)^2 - \frac{A^4}{4} + \frac{A^2}{2} < \frac{1}{4}.$$

При $A^4 \ll A^2$ и $h = 0$ из последних соотношений вытекают неравенства

$$0 < \frac{A^2}{2} \left(1 - \frac{g}{v}\right)^2 < \frac{1}{4}, \quad (43)$$

где $g/v < 0$ (в частности, допустимые параметры $g = -4$ и $v = 4$). Неравенства (43) определяют множество параметров g и v (при фиксированном A), которые допускают существование осциллирующих решений.

При $A \ll 1$ получаем соотношение

$$0 < \left(-\frac{h}{g}\right)^2 < \frac{1}{2}. \quad (44)$$

Из неравенств (44) следует, что сильные магнитные поля h подавляют возможность осцилляций. С другой стороны, большие силы пристеночного смачивания ($\propto g$) являются благоприятными для возникновения колебаний.

Интересно отметить, что из (44) вытекает, в частности, неравенство $h/g > -\sqrt{2}$, которое определяет так называемое смачивание первого порядка, когда возникают колебания плотности: так, в [13] получено неравенство $h/g > -2$, и, следовательно, рассматриваемый нами алгоритм согласуется с известными численными результатами. Аналогичную „линию раздела“, отделяющую область монотонных решений от области осциллирующих

решений, можно получить из неравенства (44): в [13] переход к осциллирующим решениям получен численно при $g/v > -2$.

Ограничимся случаем $h = 0$ и введем обозначение $\kappa = \frac{g}{v} A$. Тогда имеет место следующее соответствие:

$$\frac{1}{2} \kappa^2 = p - G(A, 0) \rightarrow \left\{ \sigma_0(p), 0 < p < \frac{1}{4} \right\},$$

$$\frac{1}{2} \kappa^2 = p - G(A, a_1(p)) \rightarrow \left\{ \sigma_1(p), -\frac{1}{12} < p < \frac{1}{4} \right\},$$

где $a_1(p)$ определена формулой (36).

Далее

$$\frac{1}{2} \kappa^2 = p - G(A, a_2(p)) \rightarrow \sigma_2(p), -\frac{1}{12} < p \leq \frac{1}{4},$$

где

$$a_2(p) = \sqrt{\frac{1}{27} - \frac{4p}{3} - \frac{1}{27} (12p + 1)^{3/2}}.$$

Таким образом, области $(p, a) \in \Sigma^+$ можно поставить в соответствие область $(\kappa, p) \in \tilde{\Sigma}^+$. Граница области $\tilde{\Sigma}^+$ определяется кривыми, которые заданы соотношениями

$$\tilde{\sigma}_0 = \left\{ (\kappa, 0), 0 < p < \frac{1}{4} \right\}, \quad \kappa = \sqrt{2\sigma_0(p)}.$$

Далее

$$\tilde{\sigma}_1 = \left\{ (\kappa, a_1(p)), -\frac{1}{12} < p < \frac{1}{4} \right\}, \quad \kappa = \sqrt{2\sigma_1(p)},$$

$$\tilde{\sigma}_2 = \left\{ (\kappa, a_2(p)), -\frac{1}{2} \leq p \leq 0 \right\}, \quad \kappa = \sqrt{2\sigma_2(p)}.$$

Следовательно, внутренности области Σ^+ в плоскости (p, a) можно поставить в соответствие внутренность области $\tilde{\Sigma}^+$ в плоскости параметров (κ, p) . Область $\tilde{\Sigma}^+$ определяет значения параметров смачивания, которые допускают осциллирующие решения.

Зная бифуркационную область параметров, из линеаризованного уравнения (38) можем определить среднюю массу по формуле

$$m = u_a^- - \left(\frac{\pi}{L} \right) (1 - 3u_a^{-2})^{-1} (u_y(0, t) - u_y(\pi, t)). \quad (45)$$

В силу краевых условий $m = m(g/v)$, а значит, при выполнении неравенства

$$n^2 \leq 4 \left(\frac{L}{\pi} \right)^2 (1 - 3m^2(g/v)) \leq (n+1)^2, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (46)$$

решение имеет n колебаний в области $0 < y < \pi$ для задачи Дирихле. Для задачи Неймана в неравенстве (46) следует положить $n = j - 1$, где $j = 1, 2, \dots$

5. Сравнение с численным экспериментом

Соотношение (46) качественно согласуется с численным экспериментом [13,14]. Так, применение формулы (45) к графическому результату из [13] (рис. 2) при $m = 1/2$ и $L = 30$ приводит к $n = 9$, что точно совпадает с численным результатом. При $L = 60$ получаем $n = 18$, что отвечает графику на рис. 2, с работы [13].

Из (45) и граничных условий (40), (41) следует, что

$$m = u_a^- - \left(\frac{\pi}{L} \right) (1 - 3u_a^{-2})^{-1} \left[-\frac{2h}{v} - \frac{g}{v} (A + B) \right], \quad (47)$$

где $A = u(0, t)$, $B = u(\pi, t)$, $g/v < 0$ и $hv > 0$.

Для качественного исследования достаточно ограничиться случаем $u_0 = 1/2$ и $A = B = 1$. Тогда равенство (47) можно записать в виде

$$m = \frac{1}{2} + 8 \left(\frac{\pi}{L} \right)^2 \left(\frac{h}{v} + \frac{g}{v} \right). \quad (48)$$

В частности, полагая $v = 4$, $g = -4$ и $h = 4$, из формулы (44) получаем $m = 1/2$, что отвечает ситуации из [13].

Из (48) следует также, что $m \propto h/v$. Тогда из (46) вытекает, что с увеличением амплитуды магнитного поля h число колебаний по сечению пленки уменьшается: магнитное поле подавляет возникновение осцилляций. Обратное, поскольку $g/v < 0$ и $g \propto J_s$ (где J_s — сила пристеночного смачивания), с увеличением силы смачивания (направленной ортогонально внешней поверхности пленки) средняя масса уменьшается и, следовательно, число колебаний плотности по сечению пленки увеличивается. При $L \rightarrow \infty$ масса $m \rightarrow 1/2$, что имеет очевидный физический смысл для неограниченных пленок.

В отсутствие магнитного поля ($h = 0$) из соотношения (44) при $g/v = -1$ следует, что $L > \pi/4$. Последнее неравенство имеет тривиальный физический смысл, поскольку величина L измеряется в единицах корреляционной длины ξ_b . Обратное, в отсутствие смачивания при $g = 0$ формула (44) имеет вид

$$m = \frac{1}{2} + 8 \left(\frac{\pi}{L} \right)^2 \quad (49)$$

при $h/v = 1$ (численный эксперимент [13]).

При $L = 30$ или 60 из (49) следует, что $m \sim 1/2$, и поэтому неравенства (42) можно записать в виде

$$n^2 < \left(\frac{L}{\pi} \right)^2 < (n+1)^2. \quad (50)$$

При $L = 30$, согласно рис. 2, а работы [13], должно быть $n = 8$. Неравенство (50) дает верхнюю оценку $n = 9$. Тем самым, соотношения (50) (а следовательно, и неравенства (46)) можно использовать для грубых инженерных оценок.

Таким образом, предлагаемый выше метод исследования позволяет аналитически определить множество параметров „смачивания“, допускающее существование осциллирующих распределений плотности по сечению пленки, которые численно определялись в [13,14].

Автор выражает благодарность А.Е. Шишкову и Р.М. Таранцу за плодотворные дискуссии.

Приложение 1. Асимптотическая устойчивость к возмущениям по параметру порядка

Докажем существование простого аттрактора для краевой задачи (11)–(14) при условии, что начальные функции $u_0(x)$ и $v_0(x)$ принадлежат достаточно малой окрестности точки $(1/2, 0)$.

Мы доказали, что линеаризованное уравнение Аллена–Кана

$$v_t = v_{yy} - F_{vv}(1/2, 0)v$$

с нулевыми граничными условиями Неймана имеет нулевое глобальное асимптотически устойчивое решение при выполнении неравенства [3]

$$0 < -F_{vv}(1/2, 0) < (\pi/L)^2. \quad (51)$$

Неравенство (51) в силу определения (17) можно записать в виде $0 < 2\beta < (\pi/L)^2$, и, следовательно, оно выполняется (по крайней мере, для тонких пленок).

Условие асимптотической устойчивости нулевого решения означает, что

$$\limsup_{t \rightarrow \infty} \|v(x, t)\|_{H^1} = 0 \quad (52)$$

равномерно по $0 < x < L$ почти везде по норме пространства $H^1 = W^{1,2}$, где $W^{1,2}$ — пространство Соболева, состоящее из всех квадратично-интегрируемых функций $f \in L^2$, обладающих интегрируемыми во второй степени обобщенными производными до первого порядка включительно.

Уравнение Кана–Хилларда можно записать в виде

$$u_t = Q(u, v)u_x + Q_v(u, v)v_x(F_u(u, v) - \epsilon^2 u_{xx})_x + Q(u, v)(F_u(u, v) - \epsilon^2 u_{xx})_{xx}. \quad (53)$$

Линеаризация уравнения (53) в точке $(u, v) = (1/2, 0)$ позволяет заметить, что коэффициент подвижности $Q(1/2, v) = 0$ для всех $-1 \leq v \leq 1$, а слагаемое

$$\|Q_v(1/2, v)v_x(F_u(1/2, v) - \epsilon^2 u_{xx})_x\|_{H^1} \leq M\|v_x\|_{H^1} \rightarrow 0$$

при $t \rightarrow \infty$ в силу утверждения (52); M — некоторая постоянная. Действительно, для всех $-1/2 < v < 1/2$ функции $Q(1/2, v)$ и $F_u(1/2, v)$ ограничены, а ограниченность нормы $\|u_{xxx}\|$ в пространстве H_1 доказана в [11].

Тогда уравнение (53) при достаточно больших $t > t_1$ можно заменить приближенным (в норме H^1) уравнением

$$u_t = Q(1/2, v)(F_u(1/2, v) - \epsilon^2 u_{xx})_{xx}. \quad (54)$$

Уравнение (54) в свою очередь при $t > t_2$ допускает приближение

$$u_t = Q(1/2, 0)(F_u(1/2, v) - \epsilon^2 u_{xx})_{xx} \quad (55)$$

при условии, что выполняется неравенство (51), из которого вытекает асимптотическая устойчивость нулевого решения краевой задачи Неймана для уравнения Аллена–Кана.

Выполним в уравнении (55) замену $t \rightarrow Q(1/2, 0)t$ и запишем его в виде

$$u_t = (F_u(1/2, v) - \epsilon^2 u_{xx})_{xx}. \quad (56)$$

Уравнение (56) при $v = 0$ допускает глобальный минимальный аттрактор, если выполняются следующие условия [11]:

$$f(u)u - F(u) \geq -c, \quad F(u) = \int_0^u f(s) ds, \quad (57)$$

$$F(u) \geq -c, \quad f'(u) \geq -c, \quad f(u)u \geq -c, \quad (58)$$

где $f(u) = F_u(u)$ и $c \geq 0$. Выполнение условий (57), (58) проверим в Приложении 2, поскольку цель данного Приложения состоит в доказательстве существования глобального тривиального аттрактора соответствующей краевой задачи для уравнения (56) при достаточно малых $\|v\|_{H^1} > 0$.

Если умножить обе части уравнения (51) скалярно в L^2 на $-\Delta$, в результате получим уравнение [11]

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|u\|^2 + \|\Delta u\|^2 = -(F_{uu}(u, v), u_x^2), \quad (59)$$

где $\|\cdot\|$ и (\cdot, \cdot) — норма и скалярное произведение в L^2 соответственно.

Из (59) следует, что $\|v\|^2 \rightarrow 0$ при $t \rightarrow \infty$, если и только если выполняется неравенство

$$-(F_{uu}(u, v), u_x^2) < 0.$$

Последнее неравенство, очевидно, выполняется, если

$$F_{uu}(u, v) > 0. \quad (60)$$

По определению

$$F_{uu}(u, v) = \frac{\theta}{2} [G''(u+v) + G''(u-v)] - 2\alpha,$$

где

$$G''(s) = \frac{1}{s(1-s)}. \quad (61)$$

При $v = 0$ неравенство (60) можно записать в виде $\theta G''(u) > 2\alpha$. В силу определения (61) из последнего неравенства при $u = 1/2$ вытекает неравенство $\alpha < 2\theta$. Мы показали, что неравенство (60) выполняется в точке $(u, v) = (1/2, 0)$. Тогда по непрерывности оно выполняется в достаточно малой окрестности этой точки. Итак, неравенство (60) показывает, что нулевое решение устойчиво в высокотемпературном режиме.

Приложение 2. Существование глобального аттрактора краевой задачи для уравнения Кана–Хилларда

Нетрудно проверить, что первое условие (58) сводится к решению квадратного неравенства и выполняется при любом $c > 0$. Второе условие (58) записывается в виде $f'(u) = 2\alpha \geq -c$ и выполняется при любом $c \geq 0$. Третье неравенство в (58) также сводится к решению квадратичного неравенства и выполняется при $c > \alpha/8$. Наконец, первое условие (57) сводится к решению неравенства $\alpha u^2 \geq \alpha/4 - c$, которое, очевидно, выполняется при любом $c > \alpha/4$.

Таким образом, выбирая $c > \alpha/4$, получаем доказательство существования аттрактора для системы уравнений Аллена–Кана и Кана–Хилларда при всех начальных функциях, принадлежащих некоторой достаточно малой окрестности точки $(u, v) = (1/2, 0)$.

Список литературы

- [1] R.D. Passo, L. Giacomelli, A. Novick-Cohen. Interfaces and free boundaries (1999). Vol. 1. P. 199.
- [2] D. Brochet, D. Hilhorst, A. Novick-Cohen. Appl. Math. Lett. **7**, 83 (1994).
- [3] О. Хенри. Геометрическая теория полулинейных параболических уравнений / Под ред. Ю.Л. Далецкого. Мир, М. (1985). С. 13.
- [4] П. де Жен. Идеи скейлинга в физике полимеров / Под ред. акад. И.М. Лифшица. Мир. М. (1982). С. 367.
- [5] N. Chafee. J. Diff. Eq. **15**, 522 (1974).
- [6] N. Chafee, E. Infante. J. Appl. Anal. **4**, 17 (1974).
- [7] C.M. Elliott, A.M. Stuart. J. Diff. Eq. **128**, 387 (1996).
- [8] M. Grinfeld, A. Novick-Cohen. Trans. Am. Math. Soc. **351**, 2375 (1999).
- [9] N.D. Alicacos, X. Chen, G. Fusco. Calc. Var. **11**, 233 (2000).
- [10] A. Novick-Cohen. Adv. Math. Sci. Appl. **8**, 965 (1998).
- [11] В.К. Калантаров. Краевые задачи математической физики и смежные вопросы теории функций. Сб. работ / Под ред. О.А. Ладыженской. Зап. науч. сем. ЛОМИ. Наука, Л. (1987). Т. 163. В. 19. С. 66.
- [12] W. Chen, S. Sheng. Nonl. Anal. **49**, 21 (2002).
- [13] S. Puri, K. Binder. Z. Phys. B **86**, 263 (1992).
- [14] I. Schmidt, K. Binder. Z. Phys. B **67**, 369 (1987).
- [15] J.W. Cahn, A. Novick-Cohen. J. Stat. Phys. **76**, 877 (1994).