УДК 532.783

© 1997 г. Э.Л. Аэро, С.А. Вакуленко

КИНЕТИКА НЕЛИНЕЙНЫХ ОРИЕНТАЦИОННЫХ ДЕФОРМАЦИЙ В НЕМАТИЧЕСКИХ ЖИДКИХ КРИСТАЛЛАХ В ОДНОРОДНОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Изучается нелинейное кинетическое уравнение, описывающее эволюцию ориентационной структуры нематических жидких кристаллов. Описываются равновесные структуры, исследуется их устойчивость и поведение решений на больших временах. Описывается супермедленная эволюция (например, в магнитном поле большой напряженности) нерегулярной структуры к регулярной устойчивой структуре.

1. Постановка задачи. В продолжение исследований сильно нелинейных уравнений теории упругости нематических жидких кристаллов (НЖК) [1–3] будем рассматривать нелинейную эволюцию в магнитном поле деформированной ориентационной структуры, содержащей к тому же большое число π-стенок, кинков с сохраняющимся суммарным топологическим зарядом. Ориентационная структура НЖК становится особенно неустойчивой в областях больших размеров, а также в слабых магнитных полях.

Уравнения теории упругости НЖК выражают баланс моментов, связанных с поворотом локального вектора анизотропии (директора) $\mathbf{l}(x, y, z)$ под действием внешнего магнитного поля $\mathbf{H}$ и соседних участков среды. Уравнения равновесия впервые были получены из вариационного принципа [4–6]

$$\delta F = 0, \quad \mathbf{l}^2 = 1$$

$$F = \frac{1}{2}\int_v \left[K_1(\operatorname{div}\mathbf{l})^2 + K_2(\mathbf{l}\operatorname{rot}\mathbf{l})^2 + K_3|\mathbf{l}\times\operatorname{rot}\mathbf{l}|^2 - \chi_{ik}H_iH_k\right]dv \tag{1.1}$$

Здесь F – упругая энергия Озеена–Франка. Варьируется величина F по градиентам локального вектора $\nabla\mathbf{l}$ при условии неизменности длины последнего. Коэффициенты K_1, K_2, K_3 характеризуют поперечный изгиб (K_1), продольный изгиб (K_3) и кручение (K_2) векторных линий поля $\mathbf{l}(x, y, z)$. Диамагнитный тензор $\chi_{ik} = \chi_\perp\delta_{ik} + (\chi_\parallel - \chi_\perp)l_il_k$ имеет две компоненты – продольную ($\chi_\parallel$) и поперечную ($\chi_\perp$) восприимчивости НЖК.

Будем рассматривать случай изгиба ориентационной структуры, когда двумерные векторы $\mathbf{l}$ и $\mathbf{H}$ лежат в одной плоскости (x, y) во все моменты времени t. Тогда $\mathbf{l}\operatorname{rot}\mathbf{l} = 0$ и кручение структуры не возникает. Рассматривая неравновесный случай, в уравнение баланса моментов обычно добавляют ответственный за вращательное трение член, пропорциональный скорости поворота директора $\dot{\mathbf{l}}$. Тогда оно принимает вид

$$\mathbf{l}\times\left[K_1\operatorname{grad}\operatorname{div}\mathbf{l} - K_3\operatorname{rot}\operatorname{rot}\mathbf{l} + \chi_a\mathbf{H}(\mathbf{l}\mathbf{H})\right] = \gamma\,\mathbf{l}\times\dot{\mathbf{l}}, \quad \chi_a = \chi_\parallel - \chi_\perp \tag{1.2}$$

Вариационная форма кинетического уравнения будет рассмотрена в разд. 4. Здесь χ_a – диамагнитная анизотропия, γ – вращательная вязкость. Строго говоря, опущен инерционный член $\sim \ddot{\mathbf{l}}$, связанный с молекулярными моментами инерции, а также гидродинамический член $\sim \operatorname{rot}\mathbf{v}$, ничтожный при больших размерах области S.

Уравнение (1.2) сильно нелинейное, что затрудняет его общий анализ. В одномерном случае $\mathbf{l} = \mathbf{l}(y, t)$ при постоянном магнитном поле оно может быть представлено в виде уравнения относительно одной скалярной функции α – угла взаимной ориентации векторов $\mathbf{l}$ и $\mathbf{H}$. Тогда имеем

$$2\gamma\dot{\alpha} = 2K_1\alpha''_{yy} - \chi_a H^2 \sin 2\alpha - 2\Delta K[(a'_y)^2 \sin 2\alpha - \alpha''_{yy}\sin^2\alpha] \tag{1.3}$$

$$\alpha = \arccos(\mathbf{lH})H^{-1}, \quad H = \mathrm{const}, \quad \Delta K = K_3 - K_1$$

В таком виде эволюционное уравнение может быть проанализировано. В линеаризованной форме оно исследовалось ранее [1].

Уточним задачу. В случае бесконечно протяженной области будем рассматривать только периодические по y решения с периодом h. Если область S – плоскопараллельный слой $0 \leqslant y \leqslant h$, то уравнение (1.3) соответствует случаю, когда поле ортогонально его границам. На его границах зададим ориентацию вектора $\mathbf{l}$ так, чтобы он был ортогонален вектору магнитного поля $\mathbf{H}$:

$$\alpha(0, t) = \pi/2, \quad \alpha(h, t) = \pi/2 \pm N\pi, \quad N = 0, 1, 2, \ldots \tag{1.4}$$

2. Равновесные стабильные и метастабильные ориентационные структуры (поля). Начнем с описания равновесных структур. Для равновесных состояний ($\dot{\alpha} = 0$) эволюционное уравнение (1.3) переходит в уравнение, описывающее статические ориентационные деформации структуры НЖК, возникающие под действием стенок и магнитного поля

$$\begin{gathered}(1 - p\sin^2\alpha)\alpha''_{yy} - [p(\alpha'_y)^2 + m^2]\sin\alpha\cos\alpha = 0 \\ p = 1 - K_1/K_3, \quad m^2 = H^2\chi_a K_3^{-1}\end{gathered} \tag{2.1}$$

Известен первый интеграл этого уравнения

$$\alpha'_y = \pm\left(\frac{m^2\sin^2\alpha - C}{1 - p\sin^2\alpha}\right)^{1/2} \tag{2.2}$$

(C – постоянная интегрирования). Уравнение (2.2) имеет два семейства решений. При $C > 0$ решения описывают состояния без предварительной деформации – в отсутствие магнитного поля имеем $\alpha = \mathrm{const}$. Случай $C < 0$ предусматривает наличие неоднородного поля и при $H \to 0$, т.е. за счет граничных условий, неодинаковой ориентации на границах. В первом случае деформации начинаются с нуля лишь в результате бифуркации при достижении некоторого порога.

Ясно, что в первом случае, который сейчас рассмотрим, на границах $y = 0$, $y = h$ должны быть заданы одинаковые значения угла α или дополнительного угла $\beta = \pi/2 - \alpha$:

$$\alpha(0) = \alpha(h) = \pi/2 \ \text{ или } \ \beta(0) = \beta(h) = 0 \tag{2.3}$$

Решение уравнения (2.2) выражается через эллиптический интеграл третьего рода:

$$\begin{gathered}h - y = m^{-1}\sqrt{(1-p)(1-n)}\,\Pi(n, k, \chi), \quad n = k^2 p \\ k^{-2} = 1 + (1-p)\,\mathrm{tg}^2\,\alpha_m, \quad \sin\alpha_m = C/m^2, \quad \alpha_m = \min\alpha\end{gathered} \tag{2.4}$$

$$\sin\chi = \frac{1}{k\sqrt{1-p}}\frac{\cos\alpha}{\sqrt{1 + (K_3/K_1)p\cos^2\alpha}} = \frac{k^{-1}(1-p)^{-1/2}\sin\beta}{\sqrt{1 + (K_3/K_1)p\sin^2\beta}}$$

Параметр k, связанный с постоянной интегрирования, характеризует "амплитуду" деформации α_m, причем α_m – минимальный угол (между векторами **H** и **l**), достигаемый в середине слоя $y = h/2$, соответствующий наибольшей деформации. Величина и связанная с ним "амплитуда" деформации α_m находится из дисперсионного уравнения

$$hm / \sqrt{1-p} = 2\sqrt{1-n}\Pi(n,k), \quad \Pi(n,k) = \Pi(n,k,\pi/2) \tag{2.5}$$

Оно вытекает из граничного условия (2.3) при $y = 0$.

В этом уравнении k входит как единственная произвольная постоянная интегрирования. Параметры m и p выражаются лишь через характеристики среды, магнитное поле H и толщину слоя h.

Существенно, что уравнение (2.5) имеет решение не при всех k. В силу свойств полного эллиптического интеграла третьего рода $\Pi(n, k)$ имеем $\Pi(n, 0) = \pi/2$, $\Pi(n, k) \geqslant \geqslant \Pi(n, 0)$. Используя это неравенство в (2.5) и учитывая, что $n = 0$ при $k = 0$, получим вначале неравенство

$$hm \geqslant \pi\sqrt{1-p}, \quad m^2 = H^2\chi_a K_3^{-1}$$

После элементарных преобразований, учитывая, что χ_a, K_3 и p – положительные величины, запишем

$$Hh \geqslant \mu_c, \quad \mu_c = \pi\sqrt{K_3^{-1}\chi_a(1-p)} \tag{2.6}$$

Это неравенство означает, что нетривиальное решение имеет место (возникают деформации), если произведение Hh достигает и превосходит порог μ_c.

Уравнение (2.5) соответствует частному случаю, когда в промежутке $0 \leqslant y \leqslant h$ максимальное значение угла β достигается один раз – в середине слоя. Очевидно, граничные условия (2.3) будут удовлетворены, если при нулевых значениях на концах значение достигается внутри промежутка целое число раз, т.е. промежутку $0 \leqslant \chi \leqslant \leqslant \pi/2$ соответствует отрезок h/N, где $N = 1, 2, 3...$ Условию (2.5) соответствует $N = 1$. В общем виде оно записывается так:

$$hm = \left(2N\sqrt{1-n}\sqrt{1-p}\right)\Pi(n,k) \tag{2.7}$$

При фиксированных m и p получим серию монотонно возрастающих кривых $\Pi(n, k) = N\pi/2$ (для разных значений N). Дисперсионное уравнение (2.5) определяет N значений k_N, которым соответствует N решений уравнения (2.2), удовлетворяющих нулевым граничным условиям (2.3).

Для оценки градиентных свойств этих решений исходим из выражения для первого интеграла (2.2), в котором нужно учесть представление постоянной C через α_m согласно (2.5). Наибольшее значение угловой градиент (по абсолютной величине) принимает на концах отрезков $y_N = 0$, h/N, где $\alpha = \pi/2$. Из (2.2) получим

$$\max(\alpha'_y)^2 = \frac{N^2m^2\cos^2\alpha_m}{h^2(1-p)} = \frac{N^2m^2}{h^2(k_N^{-2}-p)} = \frac{N^2m^2k_N^2}{(1-n)h^2} \tag{2.8}$$

Ясно, что большим значениям чисел k_N соответствуют большие значения градиентов. Видно, что k_N – убывающая последовательность. Наибольшее значение k_1 находится из уравнения (2.5), и оно тем больше, чем больше произведение Hh по сравнению с порогом μ_c. Поэтому спектр чисел k_N занимает полосу от 0 до k_1.

Явная зависимость $\alpha(y)$ или $\beta(y)$ может быть выявлена для предельных значений параметров k и $n = k^2p$. При малых k и p, принимая $n \simeq 0$, получим

$$h - y = \frac{\sqrt{1-p}}{m}\Pi(0,k,\chi) = \frac{\sqrt{1-p}}{m}F(k,\chi) \tag{2.9}$$

где F – эллиптический интеграл второго рода, для которого есть формула обращения

$$\sin\chi = \mathrm{sn}\left[\frac{m}{\sqrt{1-p}}(h-y),\ k\right] \tag{2.10}$$

С помощью формул (2.4) можно перейти, положив в них $n = 0$, к углу α, или β, что дает окончательное соотношение

$$\frac{\cos\alpha}{\sqrt{1+(K_3/K_1)p\cos^2\alpha}} = k\sqrt{1-p}\,\mathrm{sn}\left[\frac{m}{\sqrt{1-p}}(h-y),\ k\right] \tag{2.11}$$

При $p = 0$ (когда $n = 0$ независимо от k) эта формула, а также и (22.10), становятся точными при любых k. При $k = 1$ синус эллиптический переходит в тангенс гиперболический, и приходим к регулярной системе кинков (π-стенок), сосредоточенных около точек с координатами $y_l = 0$, h/N, $2h/N$,... . Имеем

$$\beta_s = 2\,\mathrm{arctg}\left[\frac{m}{\sqrt{1-p}}(y-y_l)\right] - \pi + s\pi, \quad s = \pm 1 \tag{2.12}$$

Профиль кинка в общем случае определяется формулой

$$\beta = B_s(\xi), \quad \xi = m(y-y_l)/\sqrt{1-p} \tag{2.13}$$

Для построения асимптотических решений, описывающих взаимодействие кинков, потребуются следующие формулы:

$$B_s(\xi) = s\pi - s\rho(p)e^{-\xi} + O(e^{-2\xi}), \quad \xi \to +\infty \tag{2.14}$$

$$\rho(p) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{1-\sqrt{p}}{1+\sqrt{p}}\right)^{1/4} \exp\left[2\sqrt{p}\,\mathrm{arctg}\left(\frac{1-\sqrt{p}}{1+\sqrt{p}}\right)^{1/2} - \frac{\pi}{4}\right]$$

описывающие асимптотические свойства кинка. Здесь s – топологический заряд.

3. Устойчивость равновесных решений. Исследуем кинетическое уравнение (1.3), линеаризованное вблизи равновесных решений α_n (n – номер решения).

Пусть $\alpha = \alpha_n + \psi$, ψ – малая величина. Тогда (1.3) запишется в виде

$$\gamma_1\psi_t = A_n\psi, \quad \gamma_1 = \gamma/K_1 \tag{3.1}$$

$$A_n\psi = \psi''_{yy}(1-p\sin^2\alpha_n) - 2\psi'_y p(\alpha_n)'_y \sin\alpha_n\cos\alpha_n -$$

$$-\psi\left\{2p\sin\alpha_n\cos\alpha_n(a_n)''_{yy} + [p(\alpha_n)'^2_y + m^2]\cos 2\alpha_n\right\}$$

Следующий результат (ранее известный для $p = 0$) важен для применения теории регулярных аттракторов [7] в рассматриваемой задаче. Поскольку аттрактор описывает поведение решений кинетического уравнения при $t \to +\infty$, это позволяет описать физически реализующиеся предельные режимы на больших временах.

Лемма. Для условий Дирихле для "почти всех" (за исключением счетного множества) значений параметра m все равновесные решения $\alpha_n(y)$ – гиперболические, т.е. оператор A_n имеет пустое ядро.

Для периодических условий ядро A_n состоит только из функции $(\alpha_n)'_y$.

Замечание. Это означает, что равновесные решения почти всегда дают невырожденные экстремумы энергии системы, т.е. невырожденные максимумы, минимумы или седловые точки.

Доказательство. Следуем известной схеме [8]. Для случая Дирихле прямой подстановкой проверяем, что функция

$$2m^2\partial\alpha_n(y,m^2)/\partial(m^2)-y(\alpha_n)'_y=\psi \tag{3.2}$$

удовлетворяет равенствам $A_n\psi\equiv 0$, $\psi(0)=0$. Но из (2.2) видно, что для "почти всех" m не выполнено второе условие $\psi(h)=0$, что и требовалось доказать. Для периодических условий утверждение известно [9].

Предложение. Для случая граничных условий Дирихле (1.4) все нетривиальные непостоянные решения, для которых $(\alpha_n)'_y$ имеет более одного корня, неустойчивы, т.е. существует собственное значение $q>0$ для задачи $A_n\psi=q\psi$ и соответственно экспоненциально растущие по времени решения $\psi(y,t)$ (3.1).

Доказательство проводится по известной схеме ([9], с. 138, 139).

4. Некоторые общие свойства кинетического уравнения и релаксация неравновесной структуры. Для систем ограниченного размера h при "не слишком больших" нелинейностях $m^2\sin 2\beta$ описание поведения решений уравнения (1.3) непосредственно следует из теорем об аттракторах градиентноподобных динамических систем [7–11]. В самом деле, уравнение (1.3) при граничных условиях (1.5) или (2.4) может быть представлено в функциональном виде

$$\delta D/\delta\beta'_t=-\delta L/\delta\beta \tag{4.1}$$

где функционалы "диссипации" D и "энергии" L имеют вид (перешли от угла α к углу β)

$$D=\frac{\gamma_1}{2}\int_0^h(\beta'_t)^2dy,\quad L=\int_0^h\left[\frac{1}{2}(1-p\cos^2\beta)(\beta'_y)^2+m^2\sin^2\beta\right]dy \tag{4.2}$$

Из (4.1) следует, что L – функционал Ляпунова, не возрастающий вдоль траекторий динамической системы:

$$D=-\partial L/\partial t \tag{4.3}$$

Кроме того, $L\geqslant 0$.

Эти свойства и доказанная выше лемма позволяют применить общую теорию [7–11].

Все траектории динамической системы стекаются к равновесиям, причем для "почти всех" (см. [9]) начальных данных $\beta(y,0)$ соответствующая траектория $\beta(y,t)$ при $t\to+\infty$ приближается к некоторому устойчивому равновесию.

Это устойчивое равновесие единственно для случая условий Дирихле (1.4) с $N\neq 0$. Для (2.3), если магнитное поле ниже порога, это – тривиальное решение $\beta\equiv 0$, $\alpha=\pi/2$. Если поле выше порога, то это полуволна – нетривиальное решение (2.2) с $C>0$ и наименьшим периодом.

Имеются ровно две такие полуволны, соответствующие различным знакам перед корнем в (2.2). Если же рассматриваем условие (1.4) с $N\neq 0$, то равновесным будет некоторое монотонное решение с $C<0$.

Для периодических граничных условий "почти все" траектории стекаются с экспоненциальной скоростью к тривиальным равновесиям $\beta_n\equiv n\pi$ ($n=0,\pm1,\pm2,\ldots$). Время релаксации для этого процесса приближения к равновесию можно оценить, используя соотношение (4.3). Предположим, решение β притягивается к равновесию β_n. Выделим малые окрестности V_n равновесных решений β_n, такие, что в V_n уравнение (1.3) можно линеаризовать. Тогда внутри V_n имеем (см. разд. 3)

$$\gamma_1\psi'_t=A_n\psi,\quad \psi=\beta-\beta_n,\quad \beta_n+\psi(t_0)\in V_n$$

$$\|\psi\|^2=\int_0^h\psi^2dy,\quad \|\psi(t)\|\leqslant\|\psi(t_0)\|\exp[-\lambda_n\gamma_1^{-1}(t-t_0)],\quad t\geqslant t_0$$

Здесь λ_n – наименьшее положительное собственное значение A_n.

Итак, время релаксации внутри V_n пропорционально $\lambda_n \gamma_1^{-1}$. Момент же t_0 попадания внутрь V_n можно оценить из соотношения (4.3):

$$\int_0^{t_0} D[\beta(s)]ds = L[\beta(0)] - L[\beta(t_0)] \leqslant L_0 = L[\beta(0)]$$

Поскольку вне V_n имеем $D \geqslant \delta > 0$, это дает

$$t_0 \leqslant L_0 \delta^{-1} = L[\beta(0)] \ (\min D[\beta])^{-1}, \quad \beta \in V_n, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$$

Согласно этому способу оценки времени релаксации при ограниченных h, m^{-1} решение для начальных данных "общего положения" за ограниченное время t_0, (β_0, m, h) попадает в малую окрестность V_n некоторого равновесия (все они описаны в разд. 2).

Этот анализ однако недостаточен, когда безразмерный параметр $\varepsilon = (mh)^{-1}$ мал. Тогда возникают долгоживущие структуры, составленные из кинков, которые релаксируют в конечном счете к равновесным решениям, как описано выше. При этом время релаксации становится экспоненциально большим, $\ln \tau = O(mh)$. Таким образом, в случае малого параметра атрракторный анализ (1.3) должен быть дополнен, поскольку численными методами подчас трудно обнаружить медленную эволюцию. Однако возможен асимптотический анализ, проводимый ниже в разд. 5, 6, которые описывают как возникновение кинковой структуры из некоторых естественных начальных состояний, так и ее медленную эволюцию.

Получим ниже формулу для времени релаксации $\tau = \tau(m, p, h)$, которая дает явную зависимость его от параметров задачи. При этом оказывается, что неустойчивые равновесные решения (1.3) с большим числом экстремумов (т.е. с периодом $d \ll h$ при большом h) распадаются значительно быстрее, чем решения с малым их числом, когда $d = O(h)$, и что последние соответствуют частному случаю нерегулярных кинковых структур. Аналогичная картина получается при $h \sim 1$, но при больших характерных масштабах m^{-1}, поскольку преобразование пространственного масштаба переводит эти ситуации друг в друга.

5. Теория роста дефектов (формирование "стенок"). Рассмотрим процесс локализации пространственных градиентов с образованием кинков, возникающих из плавных ориентационных полей после включения большого магнитного поля ($Hh \gg \mu_c$). Последние могут быть результатом тепловых флуктуаций в начально малом поле при большой толщине слоя, когда ориентационная структура неустойчива. В поле большой напряженности H роль тепловых флуктуаций может быть достаточно малой и эволюцию ориентационного поля можно описать уравнением равновесия (1.3).

Покажем, что при некоторых ограничениях на начальные данные процесс возникновения кинковой структуры может быть аналитически описан и соответствующее время релаксации найдено.

Под процессом роста будем понимать увеличение пространственного градиента в центре кинка, т.е. рост локальной закрученности структуры. Для (1.3) формально-асимптотическая теория – такая же, как и для более простых уравнений, ранее изученных. Поэтому сформулируем просто основные результаты [12, 13].

Процесс может быть описан для "плавных" начальных данных:

$$\beta(y, 0) = \psi(Y), \quad Y = \delta y, \quad \delta \ll 1 \tag{5.1}$$

Те же результаты получаются и для данных $\beta(y, 0)$ вида $\psi(Y) + \delta_1 \psi_1(y)$, $\|\psi_1\| < C$, δ_1 – малая величина.

Пишем асимптотическое разложение по δ

$$\beta = \beta_0(Y, t) + \delta^2 \beta_1(Y, t) + \ldots \tag{5.2}$$

где главный член удовлетворяет уравнению

$$\gamma_1 \partial\beta_0/\partial t = -m^2 \sin 2\beta_0, \quad \beta_0|_{t=0} = \psi(Y)$$

а поправки β_0, β_1 определяются из линейных уравнений [13]. Имеем

$$\mathrm{tg}\beta_0 = [\mathrm{tg}\psi(Y)]\exp(-2\gamma_1^{-1} m^2 t)$$

Разложение (5.2) корректно на временах порядка $\tau_1 = t \sim \gamma_1^{-1}\ln(\delta^{-1})$ и это же время необходимо для роста дефекта. Разложение (5.2) может быть обосновано с помощью теорем сравнения [14].

В частности, это приводит к следующим выводам.

1°. Если начальная конфигурация закрученности $\psi(Y) = \beta(y, 0)$ из (4.1) лежит в одном из открытых интервалов $I_n = [(n - {}^1\!/_2)\pi, (n + {}^1\!/_2)\pi]$ для целого n, то кинков (дефектов) не возникает: если $\psi(Y) \in I_n$ для всех Y, то $\lim\beta(y, t) = n\pi$, $t \to +\infty$.

2°. Если свойство 1° не выполнено, то кривая $\beta = \psi(Y)$ по крайней мере дважды пересечет одну из прямых $\beta = (n - {}^1\!/_2)\pi$ для некоторых n. Время роста имеет порядок $\gamma_1^{-1}\ln(\delta^{-1})$ и кинки растут в точках y_i, где $\psi(\delta y_i) = (n - {}^1\!/_2)\pi$ для некоторого n.

Из этих соображений следует, что структуры, изученные ниже в разделе 6, могут возникнуть из плавных начальных данных. Вообще говоря, для данных ψ общего вида возникает непериодическая (случайная) последовательность дефектов.

6. Взаимодействие кинков и антикинков. Супермедленная релаксация неравновесных неупорядоченных структур к равновесным. Как показывают вычисления из раздела 5, из первоначально плавной структуры возникает структура с резкими границами; они могут быть описаны с помощью кинковых профилей $B_s\,(y - y_i)$ (см. разд. 2). При этом заряд $s = \pm 1$ зависит от знака производной $\partial\beta/\partial y(y, 0)|_{y=y_i}$ начального данного (при $s = -1$ будем называть решение B_s антикинком). Дальнейшая эволюция структуры протекает, вообще говоря, значительно медленнее, чем ее возникновение из первоначального неупорядоченного состояния $\beta(y, 0)$, и может быть описана с помощью теории взаимодействия кинков.

Первоначально такая теория была разработана Л.А. Островским с сотрудниками для бездиссипативных сред[1]. Физический механизм возникновения силы взаимодействия солитонов (кинков) связан с их взаимодействием за счет экспоненциально спадающих "хвостов" (см. формулу (2.14)).

Теория взаимодействия кинков ($s = 1$) и антикинков ($s = -1$) в диссипативной среде также разрабатывалась [12, 15, 16]. Имеется строгая теория [15–16] для случая уравнений типа Гинзбурга–Ландау

$$u'_t = u''_{xx} + a^2(u - u^3) \tag{6.1}$$

В этом случае при больших размерах h возникают долгоживущие структуры, состоящие из кинк-антикинк цепей, где за каждым кинком ($s = 1$) следует антикинк ($s = -1$), и они разделены "большими" расстояниями d_i. Малым параметром в теории фактически является величина $\lambda = \exp(-cad)$, поскольку силы взаимодействия здесь экспоненциально малы и являются силами притяжения.

Теория корректна, пока $\lambda \ll 1$, т.е. пока кинки не сближаются. Из вычислительных экспериментов, а также из других соображений [17] известно, что если кинк и антикинк сблизятся, то они "аннигилируют" и возникнет (в случае (6.1)) локально почти постоянный участок, где $u \approx 1$ или $u \approx -1$.

Главное отличие задачи (1.3) от ранее изученных уравнений типа (6.1) в том, что

---

[1] *Горшков К.А., Островский Л.А.* Взаимодействие солитонов в неинтегрируемых системах. Прямой метод возмущений. Препринт № 47. Горький: Ин-т прикл. физики АН СССР. 1981.

здесь возможно взаимодействие кинков одинакового заряда, когда ближайшим соседом кинка будет снова кинк. Это связано с тем, что нелинейность периодична по β, что приводит к тому, что за ступенькой "вверх" от 0 до π может следовать снова ступенька "вверх" от π до 2π.

Такие ситуации не были рассмотрены. Ниже предлагается простой формально-асимптотический метод, позволяющий описать взаимодействие кинков с любой последовательностью топологических зарядов. Отметим, что существующий метод [16] применим только к регулярной последовательности разноименных зарядов.

Рассмотрим сначала для простоты случай периодических граничных условий.

Пусть имеется $N = 2n$ кинков и антикинков с координатами $q_1(t),\dots q_N(t)$. Предположим, что в начальный момент $d = \min|q_i - q_{i+1}| \gg 1$. Малым параметром в описанной ниже асимптотике является величина $\lambda = \exp(-md/\sqrt{1-p})$, и возникающая система уравнений корректна, пока $\lambda \ll 1$. Положим формально, учитывая периодичность, что $q_{N+1} = q_1$, $q_N = q_0$.

Введем вспомогательную срезающую функцию $\theta(y) \in C^\infty$, носитель $\theta(y)$ совпадает с $(-1, 1)$, $0 \leqslant \theta \leqslant 1$ и θ монотонно растет. Введем окрестности V_i, W_i:

$$V_i(c) = \{y\colon\ |y - r_i| \leqslant c\},\quad W_{i+1} = (r_i + c, r_{i+1} - c),\quad r_i = (q_i + q_{i+1})/2 \tag{6.2}$$

где c – некоторая постоянная. Введем теперь анзатц

$$\beta = \varphi_0[\mathbf{q}(t), y] + \varphi_1[\mathbf{q}(t), y] + \dots,\quad \mathbf{q} = (q_1, q_2,\dots q_N)$$

$$\varphi_0(\mathbf{q}, y) = \begin{cases} B_i[a(y - q_i)], & y \in W_i \\ B_i[a(y - q_i)](1 - \theta_i) + B_{i+1}[a(y - q_{i+1})]\theta_i, & y \in V_i \end{cases} \tag{6.3}$$

$$B_i(\xi) = B_{s_i}(\xi) + n_i\pi,\quad a = m(1 - p)^{-1/2}$$

где поправка φ_1 имеет порядок λ. Целые числа n_i определяют асимптотику кинка при $\xi \to \infty$, числа $s_i = \pm 1$ – это топологические заряды. Хотя анзатц (6.3) зависит от выбора срезающей функции θ и постоянной c, однако, как увидим ниже, результирующие уравнения для $q_i(t)$ не зависят от выбора функции θ и постоянной c при $d \to \infty$.

Подставляя анзатц (6.3) в (1.3), имеем для поправки φ_1 линейное уравнение

$$A(q)\varphi_1 = R(\varphi_0, y, \dot{q}, q) \tag{6.4}$$

Выражение R будет описано ниже; A – линейный оператор типа Шредингера с переменными коэффициентами. Эти коэффициенты существенно меняются только в ограниченных окрестностях q_i, которые разделены большими интервалами, где $A \approx (1 - p)d^2/dy^2 - m^2$.

Итак, имеем N разделенных "большими" расстояниями локальных потенциальных ям. Спектр таких операторов известен [16]. С помощью простых оценок можно показать [16], что имеется N малых собственных значений порядка λ и меньше, а остальные собственные значения отрицательны и отделены от нуля. При этом соответствующие N малым значениям собственные функции – линейные комбинации функций $B_i'(y)$, сосредоточенных в окрестностях q_i. Следовательно, чтобы обеспечить малость ($O(\lambda)$) поправки φ_1, достаточно, чтобы выполнялось условие

$$\langle R, B_i'\rangle = \int_0^h R(q, \dot{q}, y)B_i'[a(y - q_i)]dy = 0 \tag{6.5}$$

для каждого i. Производная B_i' здесь и ниже берется по аргументу $\xi = a(y - q_i)$. Эти уравнения и дают систему уравнений движения кинков.

Чтобы упростить выражение для R и записать его в явном виде, представим R в виде $R = S + Q$. Вклад S сосредоточен около координат q_i в областях W_i и экспоненциально затухает при удалении от q_i. С точностью до членов $O(\lambda)$ имеем

$$S = a\gamma_1 \sum_{j=1}^{N} B'_j \frac{dq_j}{dt} \tag{6.6}$$

Напротив, вклад Q отличен от нуля только в окрестностях V_i. Имеем

$$Q = \sum_{j=1}^{N} Q_j + O(\lambda), \quad \operatorname{supp} Q_j = V_j \tag{6.7}$$

$$Q_j = \rho(p)(1-p)\{s_j(Q_j'' - 2aQ_j')\exp[a(q_j - y)] +$$
$$+ s_{j+1}(Q_j'' + 2aQ_j')\exp[a(y - q_{j+1})] \tag{6.8}$$

Функция $\rho = \rho(p)$ была определена в (2.14).

Упростим теперь условия (6.5) и получим явную систему для $q_i(t)$. Вычислим сначала $\langle s,\ B_i'\rangle$. Вклад всех членов в (6.6) кроме члена $i = j$, имеет порядок λ и меньше. Итак, имеем (интеграл вычисляется по известной схеме [12])

$$\langle S,\ B_i'\rangle = \gamma_1 \frac{dq_i}{dt}\left[\int_{-\infty}^{\infty} (B'(\xi))^2 d\xi + O(\lambda)\right] = \gamma_1 \frac{dq_i}{dt}[p^{-1/2} \arcsin\sqrt{p} + O(\lambda)] \tag{6.9}$$

При вычислении $\langle Q,\ B_i'\rangle$ в (6.5) существенны только члены $j = i - 1$ и $j = i$. Физически это означает, что каждый кинк взаимодействует только с соседними кинками.

Учитывая, что носитель Q_j лежит в области V_j, можно заменить функцию B_i' ее асимптотикой (экспоненциальным хвостом). Тогда имеем из (6.6), (6.7)

$$B_i' \simeq s_j \rho(p)\exp[\mp a(y - q_i)]$$

где знак минус соответствует области V_i, а знак плюс – области V_{i-1}.

Путем интегрирования по частям, учитывая свойства $\chi(y)$, имеем

$$J_j = \int_{V_j} Q_j B_j' dy = \pm 2a\rho^2(p)(1-p)s_i s_j \exp[-a|q_i - q_j|], \quad j = i, i-1$$

где знак плюс берется для $j = i$, минус – для $j = i - 1$.

Окончательно имеем (записанную с точностью до исчезающих при $\lambda \to 0$ поправок) систему уравнений

$$\gamma_1 C(p) dq_i / dt = 2a\rho^2(1-p)s_i[s_{i+1}\exp(a(q_i - q_{i+1})) - s_{i-1}\exp(a(q_{i-1} - q_i))] \tag{6.10}$$

Каждое из этих уравнений напоминает классическое уравнение цепочки Тоды с тем отличием, что слева стоит первая производная. Для кинк-антикинк цепочек, когда всегда $s_i = -s_{i+1}$, оно превращается в известные уравнения, полученные ранее [16].

Уравнения (6.10) носят диссипативный характер, что немедленно следует из возможности их записи в виде, аналогичном (4.1) ($\overline{D}$ – диссипация, $\overline{L}$ – энергия):

$$\partial\overline{D} / \partial\dot{q}_i = -\partial\overline{L} / \partial q_i \tag{6.11}$$

$$\overline{D} = \frac{\gamma_1 C(p)}{2} \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{dq_i}{dt}\right)^2, \quad \overline{L} = \rho^2 a(1-p)\sum_{i=1}^{N} s_i s_{i+1}\exp[a(q_i - q_{i+1})]$$

(напомним, что $s_{N+1} = s_1$, $q_{N+1} = q_1$).

На траекториях (6.10) энергия $\overline{L}$ убывает. Отсюда следует, что кинки одинакового заряда стремятся удалиться друг от друга, а разного – сблизиться. Таким образом, имеется аналогия с обычными зарядами. Формулы (6.10), (6.11), дающие асимптотическую энергию системы кинков и их эволюцию, корректны, пока $d = \min|q_i - q_{i+1}| \gg 1$.

Анализ уравнений (6.10) аналогичен проведенному ранее для других случаев [16]. Для периодических граничных условий суммарный заряд системы кинков равен нулю. Система (6.10) может иметь равновесные состояния, состоящие из цепочки кинков различных зарядов. Как и в случае (6.1), все они не устойчивы. Распад этих неустойчивых структур происходит следующим образом. В случае "общего положения" всегда найдутся два кинка разных зарядов (знаков), ближайшие друг к другу. Поскольку сила взаимодействия экспоненциальна, одна из экспонент в (6.10) намного больше, чем все остальные. Тем самым кинки сближаются за время порядка $\exp(a\bar{d})$, где $\bar{d}$ – их взаимное начальное расстояние.

Это очень медленный процесс. Как только $\bar{d}$ становится величиной порядка единицы, процесс столкновения кинков убыстряется, и его можно моделировать на компьютере (при этом ясно, что остальные кинки не влияют на это столкновение).

Известно [17], что результатом будет аннигиляция двух кинков и возникновение новой системы дефектов с полным нулевым зарядом, но меньшим числом кинков. Так продолжается до тех пор, пока за время порядка $\exp(a\bar{d})$ все кинки не аннигилируют и не возникнет бездефектное состояние (для случая периодических условий). Видно, что этот вывод согласуется с общей теорией, изложенной в разд. 4.

Данный подход можно обобщить на условия Дирихле (2.3).

Формально-асимптотический подход, описанный здесь, применим и в случае условий (1.4). Чтобы удовлетворить этим условиям, достаточно ввести два пограничных слоя с помощью двух кинков $B_s[a(y - y_0)]$, $B_{s1}[a(y - y_1)]$, причем y_0, y_1 выбираются так, чтобы удовлетворить граничным условиям

$$B_{s0}(-ay_0) = \psi_0, \quad B_{s1}[a(h - y_1)] = \psi_1$$

(напомним, что перешли к углу β, $\psi_0 = \beta(0)$, $\psi_1 = \beta(h)$).

В результате возникает цепочка кинков, где два крайних кинка закреплены. Здесь уместно ввести нецелый заряд дефекта. Именно, для "внутренних" кинков полагаем $s = \pm 1$, как выше, а для граничных определяем s с помощью соотношений

$$s0 = (\psi_0 - n_0\pi)/\pi, \quad s1 = (n_1\pi - \psi_1)/\pi$$

Тогда заряд сохраняется в процессе перестроек структуры. Эти перестройки состоят в том, что в результате столкновений кинков разного заряда очень медленно (экспоненциально медленно) возникает структура из наименьшего числа кинков, имеющая тот же полный заряд, что и начальная конфигурация.

Важным отличием от случая периодических условий является возможность устойчивых структур из кинков (двух пограничных кинков в случае (2.3)).

Для случая условий (1.4) возникает "лесенка" кинков одного заряда. Напомним, что согласно разд. 6 после начального периода роста кинков возникают N_0 кинков, где N_0 – число пересечений между $\beta = \psi(Y)$ и прямыми $\beta = (n - 1/2)\pi$. Если это число больше чем N из (1.4), то после первоначального роста начинается экспоненциально долгая перестройка структуры, ведущая к структуре из наименьшего числа кинков, обеспечивающих полный заряд N ($N = 0$ для условий (2.3)).

7. Заключение. Итак, описана эволюция первоначально слабо неоднородной структуры к устойчивой равновесной структуре для нелинейного кинетического уравнения (1.3). Эта эволюция происходит в два этапа. Первый, сравнительно быстрый этап сопровождается ростом локальных градиентов и заканчивается образованием, вообще говоря, нерегулярной структуры из кинков (описываемой анзатцем из разд. 6, формулы (6.3)).

Время релаксации, соответствующее этому этапу, описывается формулой

$\tau_1 \sim c\gamma_1^{-1} \ln(m \min_i |\beta'_y(y_i, 0)|)$

Кинки и антикинки могут образоваться в точках y_i, где кривая $\beta = \beta(y, 0)$, дающая начальные данные, пересекает прямые $\beta = (n - 1/2)\pi$, $n = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$.

Далее все зависит от значения параметра $\varepsilon_d = (md)^{-1}$, где $d = \min_i |q_i - q_{i+1}|$. Если этот параметр мал (напряженность поля H велика или d велико) и точки пересечения y_i имеются, дальнейшая эволюция протекает экспоненциально долго, поскольку равновесное состояние связано с очень высоким энергетическим уровнем. В этом случае упомянутая супермедленная эволюция сводится к сближению кинков разного заряда s и их взаимной аннигиляции до тех пор, пока не возникает устойчивая регулярная структура.

Эта структура здесь представляет собой либо два пограничных кинка плюс тривиальное решение (см. (2.3)), либо лесенку из кинков, либо просто тривиальное решение. Отметим, что численные методы могут быть неэффективны при малых ε_d в связи с огромной величиной τ_2 (можно не заметить этой супермедленной эволюции в численном эксперименте).

Отметим аналогию с электромагнетизмом – суммарный топологический заряд при описанной эволюции сохраняется.

Соответствующее время релаксации τ_2 задается формулой $\ln\tau_2 = O(m\bar{d})$, где $\bar{d}$ – характерное расстояние между кинками.

Если ε_d не мало (напряженность поля H близка к порогу), то второй стадии практически нет и, согласно разд. 4, сразу же сравнительно быстро образуется устойчивая равновесная структура (описанная в разд. 2–3). В этом случае эффективны обычные численные методы.

Подобный анализ может быть сделан и в двумерном случае, что крайне важно, поскольку тогда простых обозримых формул для равновесных решений нет.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (96-01-01150).

ЛИТЕРАТУРА

1. *Аэро Э.Л., Булыгин А.Н.* Линейная механика жидкокристаллических сред // Физика твердого тела. 1971. Т. 13. № 6. С. 1701–1714.
2. *Аэро Э.Л.* Магнитооптические эффекты в нематических жидких кристаллах и переходы Фредерикса в неоднородных полях // Оптика и спектроскопия. 1988. Т. 65. Вып. 2. С. 342–348.
3. *Аэро Э.Л., Захаров А.В.* Упругие деформации жидких кристаллов, их устойчивость и применение в технике // Итоги науки и техники. Сер. Комплексные и специальные разделы механики. М.: ВИНИТИ, 1988. Т. 3. С. 163–237.
4. *Аэро Э.Л.* Плоские граничные задачи для уравнения синус-Гельмгольца в теории упругости жидких кристаллов в неоднородных магнитных полях // ПММ. 1996. Т. 60. Вып. 1. С. 79–87.
5. *Булыгин А.Н., Шалтыко Л.Г.* Упругие деформации нематических жидкокристаллических сред // Кристаллография. 1983. Т. 28. № 2. С. 405–408.
6. Справочник по специальным функциям с формулами, графиками и математическими таблицами / Под ред. М. Абрамовиц, И. Стиган. М.: Наука, 1979. 830 с.
7. *Babin A.V., Vishik M.I.* Regular attractors of semigroups and evolution equations // J. Math. pure et appl. 1983. V. 62. Fasc 4. P. 441–491.
8. *Henry D.* Some infinite-dimensional Morse-Smale systems defined by parabolic differential equations // J. Different. Equat. 1985. V. 59. № 2. P. 165–205.
9. *Хенри Д.* Геометрическая теория полулинейных параболических уравнений. М.: Мир, 1985. 376 с.
10. *Ладыженская О.А.* О нахождении минимальных глобальных аттракторов для уравнения Навье–Стокса и других уравнений с частными производными // Успехи мат. наук. 1987. Т. 42. № 6. С. 25–60.

11. *Чуешов И.Д.* Глобальные аттракторы в нелинейных уравнениях математической физики // Успехи мат. наук. 1993. Т. 48. № 3. С. 135–162.
12. *Молотков И.А., Вакуленко С.А.* Сосредоточенные нелинейные волны. Л.: Изд-во ЛГУ, 1988. 240 с.
13. *Rubinstein J., Sternberg P., Keller J.B.* Fast reaction slow diffusion and curve shortening // SIAM Journal Appl. Math. 1989. V. 49. № 1. P. 116–133.
14. *Smoller J.A.* Shock waves and reaction-diffusion equations New-York: Springer, 1983. 581 p.
15. *Nishiura Y., Fujii H.* SLEP method to the stability of singular perturbed solutions with multiple internal transition layers in reaction – diffusion systems // Dynamics of Infinite Dimensional Systems: NATO ASI V. F37 / Eds S.N. Show, J.K. Hale. Berlin: Springer, 1987. P. 211–230.
16. *Fusco G.* A geometric approach to the dynamic of $u_t = \varepsilon^2 u_{xx} + f(u)$ for small ε // Lecture Notes in Physics. V. 359: Problems Involving Change of Type. Berlin; Heidelberg: Springer, 1990. P. 53–73.
17. *Fife P., Mc Leod J.B.* The approach of solutions of nonlinear diffusion equations to travelling front solutions // Arch. Rat. Mech. Analysis. 1977. V. 65. № 4. P. 335–361.

Санкт-Петербург

Поступила в редакцию
23.VIII.1995