УДК 539.22

И.Б. Краснюк, канд. физ.-мат. наук
Донецкий физико-технический ин-т им. А.А. Галкина НАН Украины
(Украина, 83114, Донецк, ул. Р. Люксембург, 72,
тел. (062) 3113766, e-mail: krasjukigr@rambler.ru)

Импульсные периодические структуры релаксационного и турбулентного типов в ограниченных диблок-сополимерных системах

Рассмотрено линейное гиперболическое уравнение для несохраняющегося параметра порядка в диблок-сополимерной цепи с нелинейными дифференциальными граничными условиями, которые моделируют процесс образования упорядоченной фазы на плоских стенках, ограничивающих бинарную смесь (расплав). Показано, что для идеальных полимерных систем в расплаве возникают (при специальном выборе начальных условий) асимптотически периодические кусочно-постоянные распределения параметра порядка с конечным или бесконечным множеством точек разрыва на периоде. Построена бифуркационная диаграмма начально-краевой задачи при специальном выборе граничных условий, допускающих редукцию задачи к логистическому (или квадратичному) разностному уравнению с непрерывным временем и квазипериодическими возмущениями.

Розглянуто лінійне гіперболічне рівняння для параметра порядку, що не зберігається, в диблок-сополімерному ланцюгу з нелінійними диференціальними крайовими умовами, які моделюють процес утворення упорядкованої фази на плоских стінках, обмежуючих бінарну суміш (розплав). Показано, що для ідеальних полімерних систем у розплаві виникають (при спеціальному виборі початкових умов) асимптотичні періодичні кусковосталі розподілення параметра порядку з кінцевою або нескінченною множиною точок розриву на періоді. Побудовано біфуркаційну діаграму початково-крайової задачі при спеціальному виборі початкових умов, згідно з якими можлива редукція задачі до логістичного (або квадратичного) різницевого рівняння з неперервним часом і квазіперіодичними збуреннями.

Ключевые слова: диблок-сополимеры, странный нехаотический аттрактор, разностное уравнение с квазипериодическими возмущениями, бифуркации удвоения периода на торе.

Исследуем диблок-сополимерные системы несохраняющегося параметра порядка, который представляет собой разность между плотностями диблок-сополимерных цепей типа A и B. Если параметр порядка равен нулю, то рассматривается симметричный полимер, расплав или неупорядоченная фаза диблок-сополимерных цепей. Если параметр порядка не равен нулю, то такое «нарушение симметрии» приводит к возникновению зародышей упорядоченной фазы в расплаве, т.е. при кристаллизации расплава в нем происходит формирование кристаллитов [1, 2].

Рассмотрим модельное уравнение, вытекающее из функционала энергии для диблок-сополимерных цепей [2] и гипотезы Фурье [3—5], которую будем использовать в так называемом τ-приближении [6]. Данное уравнение является уравнением гиперболического типа и моделирует распределения параметра порядка в диблок-сополимерных цепях. Ограничимся исследованием линеаризованой версии этого уравнения в окрестности точки $u\,(x,\,t)\equiv 0$, где u — параметр порядка. Такое состояние равновесия соответствует неупорядоченной фазе (расплаву). Примем нелинейные динамические граничные условия вида [2, 7, 8]

$$\frac{\partial u}{\partial t}(0,\,t)=F_0[u\,(0,\,t)],\quad \frac{\partial u}{\partial t}(0,t)=F_l\,[u\,(0,t)],\quad t>0, \tag{1}$$

где F_0 и F_l — заданные отображения.

Граничные условия (1) описывают процесс поверхностного проникновения зародышей через плоские стенки, ограничивающие бинарную смесь. Будем искать решение соответствующей начально-краевой задачи в виде двух простых бегущих волн:

$$u(x,t)=f\,(t+x\,/\,V)+g\,(t-x\,/\,V),\ 0<x<l\,,\ t>0, \tag{2}$$

где f и g — произвольные функции; $V>0$ — фазовая скорость бегущей волны. Покажем, что при специальном выборе граничных и начальных условий задача допускает редукцию (по Шарковскому [8]) к разностному уравнению с непрерывным временем:

$$f\,(\varsigma+x\,/\,V)=F_l^{-1}(F_0(f\,(\varsigma))+Y\,(\varsigma),\ -l\,/\,V<\varsigma<\infty, \tag{3}$$

где $\varsigma=t+x\,/\,V$. Аналогичное уравнение можно получить по переменной $\eta=t-x\,/\,V$ для функции g.

Рассмотрим отображение $\Phi:=F_l^{-1}\circ F_0$, где $(\circ)$ — суперпозиция соответствующих отображений. Предположим, что отображение отображает некоторый открытый ограниченный интервал в себя (необходимое, но не достаточное требование продолжаемости решений) и является гиперболическим. Это означает, что отображение имеет конечное множество неподвижных точек и его производные в этих точках по модулю не равны единице. Отсюда, в частности, вытекает структурная устойчивость отображения.

Пусть P^+, P^- суть множества притягивающих и отталкивающих неподвижных точек отображения. Неподвижная точка называется притягивающей, если производная отображения в этой точке по модулю меньше единицы. Для гиперболического отображения неподвижная точка является отталкивающей, если она не притягивающая.

Асимптотическое поведение решений неавтономного разностного уравнения (3) известно в двух случаях: для идеальных пленок при $Y(\varsigma) \equiv 0$ и для неидеальных пленок при $Y(\varsigma) \neq 0$, где $Y(\varsigma)$ — известная квазипериодическая функция, которая является решением исходного линейного уравнения, моделирующего образование зародышей упорядоченной (в частности, кристаллической) фазы в однородном полимерном расплаве.

В первом случае при $\varsigma \to \infty$ существует сходимость $f(\varsigma) \to P^+$ почти всюду в метрике Хаусдорфа для графиков [8], за исключением некоторого множества точек разрыва предельного решения, мера Лебега которого равна нулю [9]. Предельная функция $f(\varsigma)$, определяющая промежуточную асимптотику по Баренблатту рассматриваемой краевой задачи, является асимптотически периодической кусочно-постоянной функцией, т.е. обобщенным решением. В точках разрыва Г производная $f'(\varsigma) \to \infty$ при $\varsigma \to \infty$, но само решение является сколь угодно гладким при сколь угодно гладких начальных функциях.

При конечном значении Г наблюдаются предельные периодические колебания релаксационного типа (рис. 1). Если множество Г бесконечно, то такие колебания называют колебаниями предтурбулентного типа при Г счетном и колебаниями турбулентного типа при Г несчетном и нигде не плотном множестве (второй категории по Бэру) [9]. Разумеется, при возрастающей производной сходимость в окрестности точек разрыва не является равномерной, что приводит к необходимости рассматривать метрику Хаусдорфа для графиков функций или метрику Скорохода [9], удобную в случае колебаний турбулентого типа, когда векторное поле есть случайная величина, а соответствующее распределение задано инвариантной мерой [9, с. 265].

Для корректной постановки граничной задачи в дополнение к граничным условиям (2) необходимо рассмотреть нулевые граничные условия Неймана, согласно которым [8, 10], если $f(\xi) \to P^+$, то $g(\eta) \to P^+ + c$ при $\eta \to \infty$, где c — произвольная постоянная, определяемая начальными условиями краевой задачи. Итак, для идеальных систем существует сходимость $u(x, t) \to 2P^+ + c$ при $t \to \infty$ почти для всех $0 < x < l$. Это означает, что идеальные системы обладают предельными периодическими колебаниями релаксационного, предтурбулентного и турбулентного типов. Используя результаты работы [11], можно показать, что если неавтономные колебания в разностном уравнении достаточно малы, то, по крайней мере, сценарий бифуркаций удвоения периода сохраняется и, следовательно, можно считать, что сохраняются колебания релаксационного типа. Подробное обсуждение этих вопросов можно найти в работе [12].

Для неидеальных систем аналогом удвоения периода на интервале является сценарий удвоения периода на торе, т.е. когда учитывается фаза

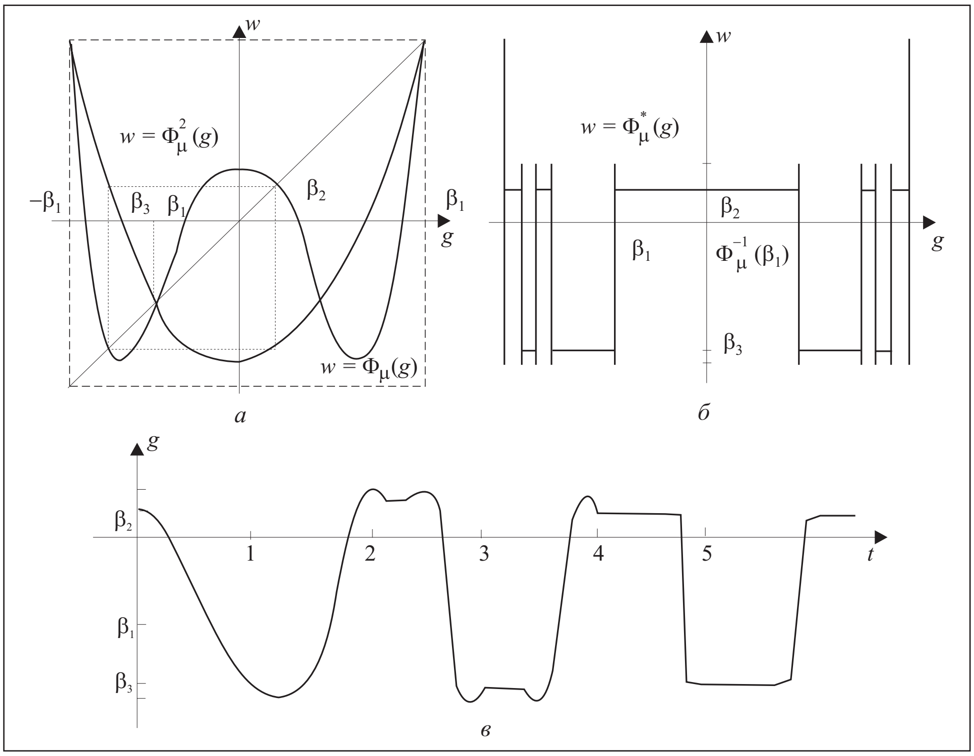

Рис. 1 [9]. Графики предельных периодических колебаний релаксационного типа: *а* — квадратичное отображение Φ_μ и его третья итерация при значении поверхностного параметра (нормированной температуры) $-5/4 < \mu < -3/4$; *б* — отображение Φ_μ^* при числе итераций, стремящемся к бесконечности; *в* — предельное распределение одной из бегущих волн, представляющих решение краевой задачи (2), где $t \to t - x/V$; β_2 и β_3 — притягивающие неподвижные точки отображения; β_1 — отталкивающая неподвижная точка; при поверхностной кристаллизации расплава прямая $g \equiv \beta_1$ разделяет жидкую и твердую фазы

объемных колебаний. Следствием этого является возникновение асимптотически квазипериодических решений уравнения (3) [13]. В отличие от идеальных систем такие предельные квазипериодические колебания не имеют точек разрыва при $t \to \infty$, т.е. не являются кусочно-постоянными функциями и, следовательно, в данном случае не существует колебаний релаксационного типа.

Кроме квазипериодических распределений как элементов аттрактора начально-краевой задачи существуют детерминированные распределения, являющиеся элементами странного нехаотического аттрактора (СНА). Графики таких распределений суть фрактальные множества: впервые пример СНА построен в работе [14]. Несмотря на сложную структуру предельных

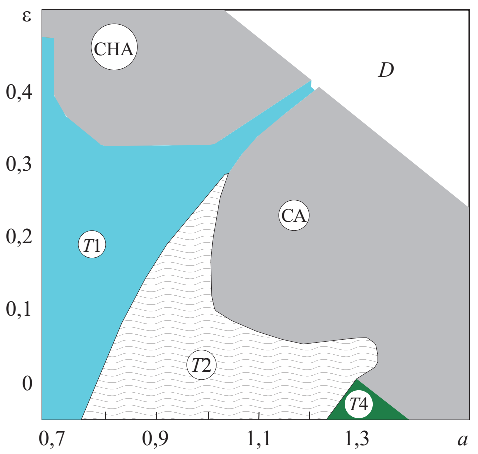

Рис. 2. Обобщенная бифуркационная диаграмма Кузнецова—Пиковского [17]:*D* — область неограниченных колебаний; *T*1, *T*2, *T*4 — бифуркации удвоения тора

траекторий, максимальный показатель Ляпунова для таких траекторий является отрицательным: траектории сближаются при $t \to \infty$ [13]. Наконец, существуют предельные условия краевой задачи, соответствующие классическому странному аттрактору (CA) с максимальным положительным показателем Ляпунова и траекториями, которые расходятся при $t \to \infty$.

Бифуркационное множество для идеальных систем показано на рис. 1, а для неидеальных систем — на рис. 2, где ε и *a* — объемный и поверхностный параметры. Типичные траектории динамической системы, порождаемой гиперболическим отображением (которое, в свою очередь, порождается краевыми условиями идеальной системы) приведены в [10, рис. 3].

Постановка задачи. Рассмотрим диблок-сополимерную цепь, состоящую из N_A сегментов типа *A* и N_B сегментов типа *B*. Диблок-сополимер представляет собой макромолекулу, которая состоит из химически различных мономеров, ковалентно связанных (на одном конце). Данные сегменты взаимно притягиваются или отталкиваются: *AB* — притягивающее взаимодействие, а *BB* и *AA* — отталкивающие взаимодействия.

Как известно, в бинарных полимерных смесях при охлаждении расплава наблюдается фазовый переход «беспорядок $\mapsto$ порядок», а в диблок-сополимерах — микрофазовый переход, т.е. волны расслоения формируются в масштабах: $q_* = 2\pi/\lambda \approx 1{,}9456/\sqrt{\langle R_g^2 \rangle}$. Здесь $R_g^2 = Na^2/6$, где *a* — среднее математическое ожидание статистической длины сегмента Куна; *N* — степень полимеризации [2, 11]. Тип параметра дальнего порядка зависит от отношения $f = N_A/N$, где $N = N_A + N_B$; N_A — число мономеров сорта A. По определению параметр порядка есть плотность $\psi(x,t)\equiv$ $\equiv(\psi_A(x,t)-\psi_B(x,t))/m$.

Рассмотрим несжимаемые смеси, для которых $m=1$. Для диблок-сополимерных цепей (в длинноволновом приближении) эффективный функционал свободной энергии в приближении среднего поля имеет вид [2]

$$\frac{N}{k_B T}\Delta[\psi]=\int_0^l \left((\psi(\tau_0+e_0(\nabla^2+q_*^2)^2)\psi+\frac{u_0}{4!}|\psi|^4)\frac{dx}{2} \right),$$

откуда следует

$$\frac{N}{k_B T}\frac{\delta\Delta[\psi]}{\delta\psi}=(\tau_0+e_0 q_*^4)\psi+\frac{1}{3!}u_0|\psi|^3+e_0(\psi_{xxx}+2q_*^2\psi_{xx}), \tag{4}$$

где T — температура; k_B — постоянная Больцмана; $\delta/\delta\psi$ — вариационная производная от функционала энергии.

Предположим, что соответствующий градиентный поток $E=\dfrac{N}{k_B T}\Delta[\psi]$ удовлетворяет уравнению Ландау—Халатникова [15, 16]:

$$\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\gamma\frac{\delta E}{\delta\psi}, \tag{5}$$

где $\gamma>0$ — постоянная, имеющая размерность частоты. Из вариационного уравнения (5) с учетом (4) вытекает уравнение в частных производных:

$$\psi_t=\gamma\left(e_0 q_*^2\psi_{xx}-\tau_0\psi-\frac{u_0}{3!}|\psi|^3+2e_0\psi_{xxx}\right)=B\psi, \tag{6}$$

где B — оператор, определенный на множестве гладких функций. Линеаризованная версия уравнения (6) в точке $\psi=0$ имеет вид

$$\psi_t=\gamma(e_0 q_*^2\psi_{xx}-\tau_0\psi+2e_0\psi_{xxx}). \tag{7}$$

Уравнение (7) с линейными стационарными граничными условиями вида (1) рассмотрено в работе [2], где численно определены множества значений параметров задачи, допускающие существование асимптотически стационарных осциллирующих распределений параметра порядка. Такая модель не допускает существования аттрактора задачи, который состоит из функций, зависящих от автомодельных переменных ς и η. Однако учет эффектов памяти в полимерных цепях приводит к существованию аттрактора краевой задачи, состоящего из функций, допускающих аналитическое представление в виде двух бегущих волн (2).

На рис. 2 показан аттрактор краевой задачи для функции $f(\varsigma)$. Из условий Неймана следует, что $f(t)=g(t)+c$, где $c=f(0)-g(0)$ определяется из начальных условий краевой задачи в угловой точке $(x, t) := (0, 0)$. Отсюда вытекает, следующее: если аттрактор краевой задачи для функции $f(\varsigma)$ имеет вид, изображенный на рис. 2, то соответственно для функции $g(\eta)$ аттрактор получается с помощью сдвига заданной области G с заданным поведением решений на некоторую постоянную c, определяемую из начальных данных краевой задачи. Если для конкретного значения $g \in G$ число c не слишком велико, то не происходит выхода из области G и, следовательно, структура решения не изменяется. Однако, если значение c достаточно велико, то возможны следующие переходы: $T1 \mapsto T2 \mapsto T4$, $T1 \mapsto SNA$, $T1 \mapsto C$, $T2 \mapsto C$, $T4 \mapsto C$, $C \mapsto D$. В дальнейшем ограничимся исследованием случая $c = 0$.

Введем функцию $J(t)$, называемую функцией податливости (или ползучести) полимера [17]. Для расплава длинных цепей эта функция известна [17, рис. 8.1]. Существует интервал $t < \tau_t$, в течение которого цепи остаются зацепленными одна за другую и система ведет себя подобно упругой сетке. При таких значениях t деформация выходит на плато $J(t) \to J_e^0$.

При очень больших значениях t можно записать $J \propto t / \upsilon$, где υ — вязкость. Это является нормальным стационарным поведением жидкости, в которой скорость изменения деформации $d\delta / dt$ пропорциональна напряжению Ξ. Поэтому $\upsilon d\delta / dt = \Xi$ при $t > \tau_t$. Время τ_t, соответствующее переходу от плато к линейному возрастанию функции $J(t)$, называется максимальным временем релаксации. Вязкость определяется скейлинговым соотношением $\tau_t = \upsilon / \overline{E}$, где $\overline{E}$ можно назвать упругим модулем квазисетки зацеплений, $\overline{E} = 1 / J_e^0$ [17, с. 249].

Теперь вместо (6) рассмотрим соответствующее уравнение с запаздывающим аргументом:

$$\psi_t(x, t + \tau_t) = B\psi(x, t). \tag{8}$$

Введем переменные $t \mapsto t / \tau_{diff}$, $x \mapsto x / l$ и разложим левую часть уравнения (8) в ряд в нулевом приближении при условии, что $\tau_t / \tau_{diff} << 1$. В результате получим уравнение

$$\psi_t + \varepsilon\psi_{tt} = a\psi_{xx} - \tau_0\psi + 2e_0\psi_{xxx}. \tag{9}$$

Здесь выполнена линеаризация нелинейного оператора B в точке $\psi = 0$:

$$B := \gamma\left(e_0 q_*^2 \psi_{xx} - \tau_0\psi - \frac{u_0}{3!}|\psi|^3 + e_0(\psi_{xxx} + 2e_0\psi_{xxx} \right).$$

Параметры уравнения (9): $a = \tau_{diff} e_0 q_*^2 / l^2$, $b = -2\tau_{diff} e_0 / l^4$, $\varepsilon = \tau_{relax} / \tau_{diff}$, $\lambda = \tau_{diff} \gamma \tau_0$. Здесь $\tau_{diff} \approx R^2 / D$, где $R = b\sqrt{N}$ — радиус клубка; N — число мономеров; b — коэффициент самодиффузии [2].

Рассмотрим уравнение (9) с граничными условиями (1) и начальными условиями

$$\psi(x,0)=h_0(x),\ \psi_t(x,0)=h_1(x),\ 0<x<l, \qquad (10)$$

и исследуем асимптотическое поведение решений начально-краевой задачи (1), (10).

Определение объемных колебаний параметра порядка. Будем искать решение уравнения (2), где $V^2=a/\varepsilon$. После подстановки (2) в (10) получим (в силу линейности (2)) два независимых обыкновенных дифференциальных уравнения:

$$bV^{-4}f''''(\varsigma)-f'(\varsigma)-\lambda f(\varsigma)=0, \qquad (11)$$

$$bV^{-4}g''''(\eta)-g'(\eta)-\lambda g(\eta)=0. \qquad (12)$$

Интегрирование (11) от $\varsigma_0=t$ до $\varsigma_l=t+l/v$ приводит к интегро-дифференциальному уравнению с запаздывающим аргументом:

$$bV^{-4}[f'''(t+l/V)-f'''(t)]-[f(t+l/V)-f(t)]-\lambda\int_t^{t+l/V}f(s)\,ds=0. \qquad (13)$$

Интегрирование (12) от $\eta_0=t$ до $\eta_l=t-l/v$ приводит к аналогичному уравнению:

$$bV^{-4}[g'''(t+l/V)-g'''(t)]-[g(t)-g(t-l/V)]-\lambda\int_t^{t-l/V}g(s)\,ds=0.$$

Дифференцирование (12) и (13) по переменной t приводит к двум независимым дифференциально-разностным уравнениям с запаздывающим аргументом:

$$bV^{-4}[f''''(t+l/V)-f''''(t)]-[f'(t+l/V)-f'(t)]-$$
$$-\lambda[f(t+l/V)-f(t)]=0, \qquad (14)$$

$$bV^{-4}[g'''(t)-g''''(t-l/V)]-[g'(t)-g'(t-l/V)]-$$
$$-\lambda[g(t)-g(t-l/V)]=0. \qquad (15)$$

Определим функции $Y(t):=f(t+l/V)-f(t)$, $Z(t):=g(t)-g(t-l/V)$ и запишем уравнения (14), (15) в виде

$$bV^{-4}Y''''(t)-Y'(t)-\lambda Y(t)=0,\ bV^{-4}Z''''(t)-Z'(t)-\lambda Z(t)=0.$$

Будем искать решение первого из них в виде $Y(t)=Ce^{kt}$, где C — комплексная постоянная, а параметр k удовлетворяет уравнению $bV^{-4}k^4-$

$-k-\lambda=0$. Это уравнение принадлежит множеству канонических уравнений $y^4+py^2+qy+r=0$, где $p=0, q=-V^4/b; -r=-\lambda V^4/b$. Следовательно,

$$k_{1,2}=\frac{z}{\sqrt{2}}\pm\frac{1}{2}\sqrt{2z-4\left(z+\frac{q}{2\sqrt{27}}\right)},\ k_{3,4}=\frac{z}{\sqrt{2}}\pm\frac{1}{2}\sqrt{2z-4\left(z-\frac{q}{2\sqrt{27}}\right)},$$

где z — корень уравнения

$$z^3+pz^2+\frac{p^2-4r}{4}z-\frac{q^2}{8}=0.$$

Пусть $\bar{z}=z-(p/3)$. Тогда $\overline{z^3}+\bar{p}\,\bar{z}+\bar{q}=0$, где $\bar{p}=-r; \bar{q}=-(q^2/8)$. Пусть $S=\frac{\overline{q^2}}{4}+\frac{\overline{p^3}}{27}$. Если $S<0$, то уравнение имеет различные корни:

$$\overline{z_k}=2\sqrt{-\frac{\bar{p}}{3}}\cos\left(\frac{F}{3}+\frac{2\pi n}{3}\right),\ n=0,1,2.$$

Выберем

$$\bar{z}=2\sqrt{-\frac{\bar{p}}{3}}\cos\left(\frac{F}{3}\right),\ n=0.$$

Нетрудно видеть, что $\mathrm{tg}\,F\to 0$ при $V\to 0$, т.е. $F=\pi/2$ при $q=0$. Тогда из данных формул вытекает, что $z\to 0$, если $V\to 0$, т.е. $z,\bar{z}\to 0$ при условии, что фазовая скорость бегущей волны стремится к нулю. При $z=0$ корни имеют вид

$$k_{1,2}=\pm\frac{1}{2}\sqrt{-\left(\frac{2q}{\sqrt{27}}\right)},\ k_{3,4}=\pm\frac{1}{2}\sqrt{\left(\frac{2q}{\sqrt{27}}\right)}.$$

При достаточно малых значениях $z\neq 0$

$$k_{1,2}=\frac{z}{\sqrt{2}}\pm i\beta_{1,2},\ k_{3,4}=-\frac{z}{\sqrt{2}}\pm i\beta_{3,4},$$

где

$$\beta_{1,2,3,4}=\pm\frac{1}{2}\sqrt{2z-4\left(z\mp\frac{q}{2\sqrt{27}}\right)}.$$

В результате получаем

$$Y(t)=C_{1,2}e^{\frac{z}{\sqrt{2}}t}(\cos\beta_{1,2}t\pm i\sin\beta_{1,2}t)+C_{3,4}e^{-\frac{z}{\sqrt{2}}t}(\cos\beta_{3,4}t\pm i\sin\beta_{3,4}t),$$

где $C_{1,2}, C_{3,4}$ — комплексные постоянные. Таким образом, можно записать

$$Y(t) = (\mathrm{Re}C_{1,2} + \mathrm{Im}C_{1,2})\, e^{\frac{z}{\sqrt{2}}t} (\cos\beta_{1,2}t \pm i\sin\beta_{1,2}t) +$$

$$+ (\mathrm{Re}C_{3,4} + \mathrm{Im}C_{3,4})\, e^{-\frac{z}{\sqrt{2}}t} (\cos\beta_{3,4}t \pm i\sin\beta_{3,4}t).$$

Выделяя вещественную часть, получаем

$$\mathrm{Re}Y(t) = e^{\frac{z}{\sqrt{2}}t} (\mathrm{Re}C_{1,2}\cos\beta_{1,2}t \pm \mathrm{Im}C_{1,2}\sin\beta_{1,2}t) +$$

$$+ e^{-\frac{z}{\sqrt{2}}t} (\mathrm{Re}C_{3,4}\cos\beta_{3,4}t \pm \mathrm{Im}C_{3,4}\sin\beta_{3,4}t).$$

Здесь $z := z(V)$, где $z(V) \to 0$, как только $V \to 0$. Поэтому при достаточно малых фазовых скоростях экспоненты в выражениях для $\mathrm{Re}Y(t)$ имеют порядок единицы. Следовательно, в нулевом приближении достаточно ограничиться возмущениями вида

$$\mathrm{Re}Y(t) = (\mathrm{Re}C_{1,2}\cos\beta_{1,2}t \pm \mathrm{Im}C_{1,2}\sin\beta_{1,2}t) +$$

$$+ (\mathrm{Re}C_{3,4}\cos\beta_{3,4}t \pm \mathrm{Im}C_{3,4}\sin\beta_{3,4}t).$$

Введем обозначения

$$\cos\vartheta_{1,2} = \frac{\mathrm{Re}C_{1,2}^2}{\sqrt{\mathrm{Re}C_{1,2}^2 + \mathrm{Im}C_{1,2}^2}}, \quad \sin\vartheta_{3,4} = \frac{\mathrm{Re}C_{3,4}^2}{\sqrt{\mathrm{Re}C_{3,4}^2 + \mathrm{Im}C_{3,4}^2}}.$$

Тогда запишем

$$\mathrm{Re}Y(t) = \sqrt{\mathrm{Re}C_{1,2}^2 + \mathrm{Im}C_{1,2}^2}\cos(\beta_{1,2}t \pm \vartheta_{1,2}) +$$

$$+ \sqrt{\mathrm{Re}C_{3,4}^2 + \mathrm{Im}C_{3,4}^2}\cos(\beta_{3,4}t \pm \vartheta_{3,4}).$$

Определение поверхностных колебаний параметра порядка. Введем обозначения $Y(t) = f(t + l/V) - f(t)$ и $Z(t) = g(t) - g(t - l/V)$. Тогда

$$Y(t) - Z(t) = f(t + l/V) + g(t - l/V) - (f(t) + g(t)), \quad -l/V < t < \infty. \tag{16}$$

Рассмотрим граничные условия (1) и

$$u_x(0,t) = 0, \quad u_x(l,t) = 0, \quad t > 0. \tag{17}$$

Из (16) вытекает

$$Y'(t) - Z'(t) = f'(t + l/V) + g'(t - l/V) - (f'(t) + g'(t)),$$

откуда в силу граничных условий (1) следует

$$Y'(t)-Z'(t)=F_1(f\ (t+l/V)+g\ (t-l/V((-F_2((f\ (t)+g\ (t)). \qquad (18)$$

Из (17) и (2) находим соотошение

$$f'_\zeta \frac{d\zeta}{dx}|_{x=0}+g'_\eta \frac{d\eta}{dx}|_{x=0}=0\,.$$

Следовательно, $v^{-1}f'_\zeta(\zeta)|_{\zeta=t}-v^{-1}g'_\eta(\eta)|_{\eta=t}=0.$

Поскольку $d\zeta/dt=1$ и $d\eta/dt=1$, можно перейти к переменной по времени. Интегрирование соответствующего уравнения от одной переменной приводит к функциональному соотношению $f\ (t)=g\ (t)+c_0$, где $c_0=f\ (0)-$ $-g\ (0)$. Аналогично из соотношения $v^{-1}f'_\zeta(\varsigma)|_{\zeta=l/V}-v^{-1}g'_\eta(\varsigma)|_{\eta=l/V}=0$ вытекает функциональное равенство $f\,(t+l/v)=g\,(t-l/v)+c_1$. Здесь постоянные $c_0=f(0)-g\,(0)$, $c_1=f\,(l/V)-g\,(-l/V)$ определяются из начальных условий краевой задачи в угловых точках.

В ситуации общего положения эти постоянные являются бифуркационными параметрами, которые удовлетворяют известному порядку Шарковского [18]: в частности, возможны бифуркации удвоения периода с последующим переходом к хаосу (см., например, [19, 20]). Однако в данном случае достаточно положить $c_0=c_1=0$. Тогда уравнение (18) можно записать в виде разностного уравнения с непрерывным временем:

$$\mathrm{Re}Y'(t)-\mathrm{Re}Z'(t)=F_1(2f\ (t+l/V)-F_2(2f\ (t))). \qquad (19)$$

Для рассмотрения возможного асимптотического поведения решений неавтономного разностного уравнения (19) достаточно ограничиться случаем $F_2:=Id\!:\!f\ \mapsto f$, т.е. тождественным отображением. Тогда из (19) получаем разностное уравнение с неавтономными возмущениями:

$$2f\ (t+l/V)=F_2(2f\ (t))+\mathrm{Re}Z'(t)-\mathrm{Re}Y'(t). \qquad (20)$$

Введем обозначение $f\ \mapsto 2f$ и заметим, что $F_2(f\ ): I\mapsto I$ отображает некоторый открытый ограниченный интервал $I\subset R$ в себя. Если последнее требование выполняется, то решения невозмущенного разностного уравнения неограниченно продолжимы для всех $t>0$. При этом график решения не выходит из интервала I.

Действительно, решения невозмущенного разностного уравнения можно определить по шагам, задавая на интервале $-l/V<t<0$ начальную функцию, которая, в свою очередь, определяется по начальным данным краевой задачи методом характеристик [9]. Для квазипериодических функций $Y'(t)$, $Z'(t)$ и для класса так называемых унимодальных отображений [20] (гомеоморфных квадратичному отображению) асимптотическое поведение решений уравнения (19) известно в случае, когда возмущения являются квазипериодическими синусоидальными функциями [11, 13, 21].

Введем обозначения

$$C_{1,2} = \sqrt{\mathrm{Re}C_{1,2}^2 + \mathrm{Im}C_{1,2}^2},\; C_{3,4} = \sqrt{\mathrm{Re}C_{3,4}^2 + \mathrm{Im}C_{3,4}^2}\;.$$

Тогда $\mathrm{Re}Y(t) = C_{1,2}\cos(\beta_{1,2}t \pm \vartheta_{1,2}) + C_{3,4}\cos(\beta_{3,4}t \pm \vartheta_{3,4})$. Аналогично изложенному выше можно показать, что

$$\mathrm{Re}Z(t) = \overline{C}_{1,2}\cos(\overline{\beta}_{1,2}t \pm \overline{\vartheta}_{1,2}) + \overline{C}_{3,4}\cos(\overline{\beta}_{3,4}t \pm \overline{\vartheta}_{3,4})\,.$$

Следовательно,

$$\mathrm{Re}Y'(t) = -C_{1,2}\beta_{1,2}\sin(\beta_{1,2}t \pm \vartheta_{1,2}) - C_{3,4}\sin\beta_{3,4}\cos(\beta_{3,4}t \pm \vartheta_{3,4})\,,$$

$$\mathrm{Re}Y'(t) = -\overline{C}_{1,2}\overline{\beta}_{1,2}\sin(\overline{\beta}_{1,2}t \pm \overline{\vartheta}_{1,2}) - \overline{C}_{3,4}\sin\overline{\beta}_{3,4}\cos(\overline{\beta}_{3,4}t \pm \overline{\vartheta}_{3,4})\,.$$

Выбрав начальные данные краевой задачи [8], можно положить $\overline{C}_{1,2} = \overline{C}_{3,4} = C_{2,3,4} = 0$. Тогда $\mathrm{Re}Y'(t) = -C_1\beta_1\sin\beta_1 t$, $\mathrm{Re}Z'(t) \equiv 0$, что приводит к разностному уравнению

$$2f\,(t + l/V) = F_2(2f\,(t)) - C_1\beta_1\cos(-\beta_1 t - \vartheta_1 + \pi/2). \tag{21}$$

Выберем $F_2\!: f \mapsto -f^2 + a\!: f \mapsto 2f$, $\varepsilon = -C_1\beta_1$, $\vartheta_1 \mapsto -\vartheta_1 + \pi/2$, $\beta_1 \mapsto -\beta_1$. Тогда уравнение (21) удобно записать в виде

$$f(t + l/V) = -f^2 + a + \varepsilon\cos(\beta_1 t \pm \vartheta_1). \tag{22}$$

Введем обозначение $\vartheta_n = \dfrac{1}{2\pi}(\beta_1 n - \vartheta_1)$ и ограничимся исследованием дискретного разностного уравнения. Тогда при $t = 1, 2, \ldots$ уравнение (22) можно записать в виде

$$\begin{gathered} f(t + l/V) = -f^2 + a + \varepsilon\cos(2\pi\vartheta_n), \\ \vartheta_{n+l/V} = \vartheta_n + \frac{1}{2\pi}\frac{\beta_1}{V}. \end{gathered} \tag{23}$$

Система (23) записана в дискретные моменты времени $t = n \in \{0, 1, 2, \ldots\}$. Параметр $w = \vartheta_{n+l/V} = \dfrac{1}{2\pi}\dfrac{\beta_1}{V}$ называется числом вращения [13]. Если это число рационально, то колебания параметра порядка являются асимптотически периодическими функциями. Если число вращения иррационально, то возникают асимптотически квазипериодические распределения.

Асимптотическое поведение решений показано на рис. 2. В частности, существует область D на диаграмме такая, что амплитуды решений при $t \to \infty$ стремятся к бесконечности. Далее, существует тор $T1$, заданный единственной инвариантной кривой [13, рис. 2.4], который описывает (по переменной ϑ) квазипериодические предельные распределения. При этом существуют бифуркации удвоения периода: например, на торе $T2$ возникают предельные квазипериодические распределения с удвоенным периодом (при наличии двух инвариантных кривых). На торе $T4$ существуют четыре инвариантные кривые и так далее, вплоть до возникновения СНА. На интервале I указанная процедура приводит к бифуркациям удвоения периода с последующим переходом к хаотическим предельным распределениям.

На торе такой сценарий модифицируется возникновением (на промежуточном этапе) СНА, характеризуемого положительной постоянной Ляпунова. Тем не менее, предельный график решения является фрактальным множеством: впервые СНА построен в работе [14]. Термины хаотический и нехаотический определяются значением показателя Ляпунова $\lambda = \,=< \ln dG/df >$ отображения G, порождаемого системой (22), в которой усреднение $< \circ >$ включает в себя усреднение по переменной ϑ, равномерно распределенной на интервале $0 < \vartheta < l/V$.

Следует заметить, что рассматриваемые решения на интервале I, вообще говоря, асимптотически неустойчивы, поскольку существуют только при выполнении неравенства $0 < (zt/\sqrt{2}) << 1$. Если $V \to 0$, то $z(V) \to 0$ и, следовательно, можно говорить о «промежуточном» аттракторе или о том, что при достаточно малой фазовой скорости соответствующие решения имеют собственные «времена жизни». При этом бифуркационная диаграмма на рис. 2 тем точнее отражает реальное поведение решений, чем меньше фазовая скорость бегущих волн.

Таким образом, рассмотрен лишь один объемный параметр задачи $e = \overline{C_1}\beta_1$, что возможно при специальном выборе начальных условий. Такое приближение можно назвать одномодовым. При более общих начальных условиях объемные моды, помимо взаимодействия с поверхностными модами, взаимодействуют также между собой. Такая задача требует дальнейших исследований.

Возможное поведение решений (по-существу, выбор специальных граничных условий), представленное на рис. 2, удобно по той причине, что в силу нелинейных зависимостей $\beta_1 = \beta_1(z, q)$, $q = q(V, b)$, $b = b(\tau_{diff}, e_0 l)$ функция $\varepsilon = \varepsilon(\beta_1, q, b)$ является нелинейной функцией объемных параметров задачи. Аналогично параметр $a = a(h_1, h_2, \gamma, a_1, a_2)$ является функцией поверхностных параметров задачи. Например, в работах [7, 8, 15] рассмотрены граничные условия

$$\frac{\partial u}{\partial t}(0,t) = -\frac{h_1}{\gamma} + a_1(u(0,t)), \ \frac{\partial u}{\partial t}(l,t) = \frac{h_2}{\gamma} + a_2(u(l,t)),$$

где h_1, h_2 — феноменологические параметры, имеющие размерность длины; γ — объемный корреляционный радиус; $a_1(u)$ и $a_2(u)$ — заданные нелинейные функции. Если эти функции линейны соответственно с коэффициентами a_1 и a_2, то для диблок-сополимерных цепей [2]

$$a_1 = \frac{a}{c} N^{-1/4} \Gamma_1^{-1},$$

где $\Gamma_1 = \frac{1}{Nc}\sqrt{2 < R_g^2 > /3}$. Аналогично можно определить Γ_2. Следовательно, параметр a на рис. 2 также является нелинейной функцией поверхностных параметров задачи. Пусть, например, $\varepsilon = \varepsilon(\beta_1)$, $a = a(h_1)$ для рассматриваемой краевой задачи. Остальные параметры предполагаются фиксированными. Тогда диаграмме на рис. 2 можно поставить в соответствие диаграмму на плоскости (β_1, h_1). Очевидно, указанную процедуру можно продолжить. Наконец, тот факт, что в качестве граничного условия выбрано квадратичное отображение, не является ограничением, поскольку квадратичное (или логистическое) отображение гомеоморфно некоторому унимодальному отображению, а для таких отображений существует строгая теория качественного поведения траекторий соответствующих динамических систем [13, 18].

Выводы

Впервые рассмотрена начально-краевая задача, позволяющая моделировать образование автомодельных квазипериодических пространственно-временных структур. Такие структуры описывают распределения концентрации в диблок-сополимерных смесях при их охлаждении. В стационарном случае их называют ламеллярными структурами. В нестационарном случае получаем систему, состоящую из квазипериодических бегущих волн, которые допускают бифуркации удвоения периода (на торе) с последующим переходом к хаосу.

The paper deals with a linear hyperbolic equation for a nonconserved order parameter in the diblock copolymer system with nonlinear differential boundary conditions which models the evolution of an ordered phase in a nonordered phase (in the melt). It is shown that for the ideal polymer systems the asymptotic periodic piecewise constant distributions of the order parameter with a finite or infinite set of points of discontinuities on a period appear in the melt (when bulk perturbations in the melt are small and, hence, surface perturbations are dominating). For the non-ideal systems there are limit quasi-periodic distributions that admits the period doubling bifurcations as the problem parameters are changing. Particularly, these distributions are the elements of the strange unchaotic attractor.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Краснюк И.Б., Таранец Р.М., Стефанович Л.И., Юрченко В.М.* Каскадный процесс образования наноструктур при кристаллизации расплава // Материаловедение. — 2009. — № 7. — С. 8—15.
2. *Binder K., Frisch H.L. , Stepanov S.* Surface Effects on Block Copolymer Melts Above the Order-Disorder Transition: Linear Theory of Equilibrium Properties and the Kinetics of SurfaceInduced Ordering// J. Phys. II France. —1997. — № 7. — P. 1353—1378.
3. *Maxwell J. C.* On Stresses in Rarified Gases Arising from Inequalities of Temperature// Phil. Trans. R. Soc. — 1879. — № 170. — P. 231—256.
4. *Леванов Е.И., Сотский Е.Н.* Теплоперенос с учетом релаксации теплового потока // Математическое моделирование уравнений математической физики. — 1997. — С. 155 —190.
5. *Краснюк И.Б.* Теория особенностей в задачах теплопереноса: решения релаксационного типа // Инж.-физ. журн. — 1994. — № 1-2. — С. 162—167.
6. *Brandenburg A., Käpylä P.J., Mohammed A.* Non-Fickian Diffusion and tau approximation From Numerical Turbulence // Physics Fluids. — 2004. — Vol. 16, № 4. — P. 1020— 1027.
7. *Krasnyuk I.B., Taranets R.M.* The Spatiotemporal Oscillations of Order Parameter for Isothermal Model of the Surface-Directed Spinodal Decomposition ib Bounded Binary Mixtures // Hindavi Publishing Corporation Research Letters in Physics. Volume 2009, Article ID 250203, 4 pages doi: 10.//55/2009/250203.
8. *Krasnyuk I.B., Taranets R.M.* The Spatial-Temporal Lamellar Structures in the Confined Ideal Polymer Blends// J. Stat. Phys. — 2011. — № 6. — P. 1485—1498.
9. *Шарковский А.Н., Майстренко Ю.Л., Романенко Е.Ю.* Разностные уравнения и их приложения. — Киев : Наук. думка, 1986. — 260 с.
10. *Краснюк И.Б., Таранец Р.М., Юрченко В.М.* Импульсные структуры ламеллярного типа в ограниченных полимерных системах // Математическое моделирование. — 2010. — **22**, № 12. — С. 65—81.
11. *Кузнецов С.П.* О воздействии периодического внешнего возмущения на систему, демонстрирующую переход порядок — хаос через бифуркации удвоения периода // Письма ЖЭТФ. —1984. — **39**, №. 3. — С. 113—116.
12. *Краснюк И.Б., Мельник Т.Н., Юрченко В.М.* Пространственно-временные структуры ламеллярного типа в ограниченных полимерных смесях // Ученые записки Таврического университета им. В.И. Вернадского. Серия «Физика». — 2009. — **22** (61), № 1. — С. 182—193.
13. *Feudel U., Kuznetsov S., Pikovsky A.* Strange Nonchaotic Attractors: Dynamics Between Order and Chaos in Quasiperiodically Forced Systems. — World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd, 2006. — 228 p.
14. *Grebodi C., Ott E., Peliken S., Jork J.A.* Strange Attractors that are not Chaotic // Physica D. — 1964. — Vol. 13, № 1-2. — P. 261—268 .

15. *Бойло И.Б., Мельник Т.Н., Краснюк И.Б., Юрченко В.М.* Стохастические наноструктуры в физике полимеров // Необратимые процессы в природе и технике. — 2011. — С. 259—262.
16. *Fredrickson G.H.* Surface Ordering Phenomena in Block Copolymer Melts // Macromolecules. — 1987.— № 20. — P. 2535—2542.
17. *Де Жен П.* Идеи скейлинга в физике полимеров. — М. : Мир, 1982. — 368 с.
18. *Шарковский А.Н.* Сосуществование циклов непрерывного отображения прямой на себя // Укр. мат. журн. — 1964. — **16**, № 1. — С. 61—71.
19. *Шарковский А.Н., Майстренко Ю.Л., Романенко Е.Ю.* Разностные уравнения и их приложения. — Киев : Наук. думка, 1986. — 260 с.
20. *Шарковский А.Н., Коляда С.Ф., Сивак А.Г., Федоренко В.В.* Динамика одномерных отображений. — Киев : Наук. думка, 1986. — 300 с.
21. *Иваньков Н.Ю.* Свойства скейлинга пространства параметров логистического отображения под внешним периодическим воздействием // Изв. вузов. Прикладная нелинейная динамика. — 1997. — **5**, № 2-3. — С. 118—127.

Поступила 07.05.12

КРАСНЮК Игорь Борисович, канд. физ.-мат. наук, ст. науч. сотр. Донецкого физико-технического ин-та им. А.А. Галкина НАН Украины. В 1975 г. окончил Донецкий госуниверситет. Область научных исследований — самоорганизация в нелинейных динамических системах.