

ФОРМАЛЬНОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ВЕРОЯТНОСТЕЙ ЗАРОДЫШЕОБРАЗОВАНИЯ В БИНАРНЫХ СПЛАВАХ: ГИПЕРКОНЕЧНЫЙ ПОДХОД И ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЕ ОБОСНОВАНИЕ РЕШЕТОЧНЫХ МОДЕЛЕЙ

И. Б. Краснюк, В. М. Юрченко*

*Донецкий физико-технический институт Национальной академии наук Украины
83114, Донецк, Украина*

Поступила в редакцию 9 июля 2001 г.

Получено уравнение типа Бюргера, моделирующее процессы стеклования в бинарных сплавах с хаотически расположенными неоднородными включениями: дано термодинамическое обоснование этого уравнения и указаны условия, при которых оно переходит в классическое уравнение Кана–Хилларда.

PACS: 94.64.10.+h, 82.60.Nh

1. ВВЕДЕНИЕ

Как известно, стеклообразное состояние полимеров представляет собой систему случайно расположенных областей повышенной и пониженной плотностей с нечетко выраженными (характерными) пространственным (и временным) масштабами: в термодинамическом приближении пространственный масштаб много больше размера мономерного звена, но много меньше размера системы. При таких условиях существуют гидродинамические модели стеклования полимерных систем, основанные на континуальном описании (см. [1]). Когда же характерная длина l пространственной вариации концентрации плотности $c_i = \langle n_i \rangle = c(r_i, t)$ сравнима с масштабом пространственного взаимодействия «соседних» флуктуаций в сплаве, обычно применяются модели «взаимодействия ближайших соседей» [2–7]. Рассмотрим именно такую ситуацию, причем используем при этом нестандартные методы вероятностного анализа [5]. На интуитивном уровне понимания это означает, что мы будем различать скорости сходимости траекторий случайных процессов $n_i(t, \omega)$, где $\omega \in \Omega$ — измеримое пространство случайных событий по некоторой вероятностной мере

(в частности, в среднем)¹⁾ Примеры, когда такой подход приводит к конструктивным результатам в реальных задачах математической физики, приведены в [8].

В данной работе излагается новый формальный подход моделирования структурной эволюции со временем для неравновесных сплавов. Напомним (см., например, [1]), что локальная концентрация $c_i = c(r_i, t)$ на решетке в i -й ячейке является, вообще говоря, некоторым случайным процессом: в качестве типичных примеров можно привести известные решеточные модели Изинга [2, 3]. Такая ситуация имеет место, если характерный масштаб изменения концентрации c_i в i -й ячейке по пространственной переменной $l \leq a$, где a — постоянная решетки; если это не так, то принято считать, что среднее (т. е. математическое ожидание) некоторого случайного процесса равно $\langle n_i \rangle = c_i = c(r_i, t)$ в термодинамическом смысле.

Вопрос о том, какова «настоящая» структура случайного процесса $n_i(t, \omega)$ и как строго определить пространство элементарных событий $\omega \in \Omega$, был поставлен еще Кацем [4]. В настоящее время достигнут известный прогресс в этом направлении: так, в [5] показано, что $n_i(t, \omega)$ можно определить

*E-mail: kras@host.dipt.donetsk.ua

¹⁾ Если в классическом анализе величины $1/n$ и $1/n^2$ одного порядка малости, то в нестандартном анализе $1/n^2 \ll 1/n$ (см. [8]).

как случайный процесс типа «пуассоновских часов», причем при $a \rightarrow +0$ среднее $\langle n_i \rangle$ удовлетворяет обычному уравнению диффузии только в том случае, когда вероятности p^\pm переходов из i -й ячейки в $(i \pm 1)$ -ю равны $p^+ = p^- = 1/2$.

При $p \neq 1/2$ получаем термодинамические уравнения типа Бюргера [5, 6], т. е. уравнения совсем другого типа, решения которых имеют вид волн концентрации, имеющих тенденцию к «опрокидыванию» за конечное время. Таким образом, выбор модели уже на микроуровне не является тривиальным.

Данную работу можно разделить на две части. В разд. 2 мы приводим соотношение для качественного расчета плотностей вероятностей переходов модели ближайших соседей для бинарных сплавов. Эта модель является простым следствием формальных результатов из [8] и физических результатов из [1]. Авторам неизвестно, можно ли получить аналог этой формулы, исходя из классического вероятностного анализа. В разд. 3 нам понадобились классические (термодинамические) уравнения для бинарных сплавов (модель Кана–Хилларда), для того чтобы показать, что флуктуации в окрестности состояния равновесия (их может быть несколько) удовлетворяют уравнению Бюргера с «вязкостью». Далее показано, что в случае «идеальной жидкости» линеаризованному уравнению Бюргера отвечает случайный процесс типа пуассоновских часов, нарушающий симметрию переходов на решетке ближайших соседей ($p \neq 1/2$). Если учесть вязкость, но положить $v \ll 1$, где v — скорость движения потока (полимерной цепи), то мы получим диффузионное уравнение, решение которого есть математическое ожидание обычного (классического) случайного процесса с нормальным (гауссовским) распределением при $p = 1/2$, или близким к нему при $p \approx 1/2$.

С этой точки зрения уравнение Бюргера (в окрестности положения равновесия классической системы) можно рассматривать как «детерминированную» модель для бинарных сплавов с хаотическим зародышеобразованием. Одновременный учет «растройки» между скоростью и вязкостью ($v \neq 0$ и $\gamma \neq 0$) в данной работе не выполнен.

2. АБСТРАКТНАЯ МОДЕЛЬ ГИПЕРСЛУЧАЙНОГО БЛУЖДЕНИЯ НА РЕШЕТКЕ

Будем рассматривать динамику случайной концентрации бинарного сплава на гиперконечной решетке: для этого необходимо рассмотреть плотности

вероятностей переходов из i -й ячейки в $(i \pm 1)$ -ю при всех $i \in Z^+ = \{0, 1, \dots\}$. Наиболее простая гиперконечная модель — это модель ближайших соседей [8].

Пусть Λ_δ — это решетка:

$$\Lambda_\delta = \{u_\delta \in \Lambda \subset R^d, \quad u \in Z^d\},$$

где Z^d — целочисленная решетка размерности $d \geq 1$. Для каждого $i \in \Lambda_\delta$ определим

$$N_i = \{j \in \Lambda_\delta : |i - j| = \delta\},$$

— множество ближайших соседей i -го узла в наборе Λ_δ , т. е. $|N_i|$ есть число элементов в этом множестве. Очевидно, что $|N_i| = 2d$ за исключением случая, когда i -я граница (вершина) лежит на границе решетки.

Будем считать, что $c_i(t, \omega)$ есть гиперконечный марковский случайный процесс. Как следует из ([8, с. 540]), такой процесс порождается инфинитезимальным генератором $-\Delta_\delta/2 + m^2$, где

$$\Delta_\delta f(i) = \delta^{-2} \left(\sum_{j \in N_i} f(j) - |N_i| f(i) \right),$$

где δ — шаг решетки, а функция f_i соответствует искомой концентрации c_i .

Будем следовать работе [1], где с помощью модели Изинга рассчитывались концентрации в сплаве. Нам понадобится введенное в [1] время релаксации $t \propto k_{CH}^{-2}$, где k_{CH} — волновой вектор, учитывающий амплитуду убывания флуктуации с длиной волны $\lambda = 2\pi k_{CH}/L$, где L — размер образца (мы ограничимся одномерной ситуацией).

Определим также потенциал [1]

$$v(r) = \begin{cases} -A \exp(-a^2/\sigma^2) & \text{при } r \leq a \sim \delta, \\ 0 & \text{при } r > a \end{cases}$$

для конечного бинарного сплава, где A — некоторая постоянная, которую мы определим ниже, а σ — дисперсия. Заметим, что эту модель рассматривал еще Кац [4] для случая одномерного (непрерывного) газа. Поскольку (по определению) мы рассматриваем плотности случайных распределений концентрации на решетке, положим ниже $a = \delta$.

Выберем безразмерное время $t = t' \gamma^{-1} \sigma^2$, где постоянная γ характеризует величину подвижности $M(c)$ в теории спиноподобного распада [1]. Тогда время релаксации в ячейке равно

$$t_{CH} \propto \frac{\sigma^2}{\gamma k_{CH}^2},$$

и, следовательно, можно формально положить

$$m = -\frac{\sigma^2 A}{\gamma k_{CH}^2} \exp \left\{ -\frac{\delta^2}{2\sigma^2} \right\},$$

где m играет роль постоянной взаимодействия для «ближайших соседей», так что рассматриваемый нами гиперконечный случайный процесс является локально марковским [3].

Рассмотрим гипердискретную прямую

$$T = \{k\Delta t | k \in N^* \cup \{0\}\},$$

где N^* — расширенный универсум натуральных чисел (см. [8, с. 541]). Здесь Δt — некоторая положительная бесконечно малая величина, которая будет фиксированной (в отличие от шага δ , который в одних случаях будет оставаться стандартным, а в других — бесконечно малым в гиперконечном смысле). Наконец, для формальной строгости, мы добавим «ловушку» \square (или «поглощающее» состояние), так что пространством состояний гиперконечной решетки будет $\Lambda_{\square} = \Lambda_{\delta} \cup \{\square\}$.

Обычно вероятности переходов из ячейки в ячейку неизвестны и задаются *a priori* некоторой матрицей переходов так, чтобы эта матрица порождала (по теореме о реконструкции Колмогорова; см., например, [9]) некоторую дискретную марковскую цепь [3]. Ниже мы рассчитаем эти вероятности переходов для модели бинарного сплава, исходя из данных, которые определены в [1]. Действительно, пусть в некоторый момент времени случайно образовался зародыш; тогда в последующий момент времени он может оказаться в любом из соседних состояний (согласно формуле из [8, с. 541]) $j \in N_i$ с вероятностью

$$P_{i \neq j} \approx \frac{\Delta t}{2\delta^2} = \frac{1}{2} \frac{t}{\delta^2} \approx \frac{1}{2} \left(\frac{\sigma}{\delta} \right)^2 \frac{4\pi^2}{\lambda^2} = 2\pi^2 \left(\frac{\sigma}{\delta} \right)^2 \frac{1}{\lambda^2}. \quad (1)$$

Заметим, что в силу локальной марковости (это доказано в [7]) случайного процесса эта вероятность не зависит от вероятности зародышеобразования.

Поскольку $0 \leq P \leq 1$,

$$\lambda > \sqrt{2\pi} \left(\frac{\sigma}{\delta} \right). \quad (2)$$

Неравенство (2) имеет простой физический смысл: при большой дисперсии мы можем (и должны) учитывать только длинноволновые флуктуации при заданном шаге δ ; а величину (σ/δ) можно рассматривать как рассеяние случайного процесса на решетке.

Формула (1) вытекает из математической модели из [8, с. 541] и физической модели из [1] и означает, что для бинарного сплава наиболее вероятны коротковолновые флуктуации, а также, что рост зародыша зависит от $(\sigma/\lambda)^2$ — отношения квадрата дисперсии к квадрату длины волны λ .

Наконец, зародыш остается в состоянии i с вероятностью

$$P_{i=j} \approx 1 - \left[\frac{|N_i|}{2\delta^2} + m^2 \right] \Delta t. \quad (3)$$

Интерпретация соотношения (3) также достаточно прозрачна: так, из (3) нетрудно получить ограничение на величину амплитуды потенциала взаимодействия

$$m^2(A) \leq \gamma \left(\frac{k}{\sigma} \right)^2.$$

Это неравенство просто означает, что при достаточно большом A (т. е. когда взаимодействие велико) вновь образовавшийся (в ячейке i) зародыш никогда в ней не остается. (Напомним, что мы ограничились для простоты изложения случаем $\sigma \ll \delta$, хотя нетрудно проанализировать при необходимости и общую ситуацию.)

Далее, менее тривиальным является требование

$$2d \leq \frac{1}{4\pi^2} \left(\frac{\lambda}{\sigma} \right)^2 - \sigma^2 m^2$$

для размерности решетки d (напомним, что $2d = |N_i|$), из которого вытекают следующие условия:

1) ограничение на величину взаимодействия ближайших соседей

$$m^2(A) \leq \frac{1}{4\pi\sigma^2} \left(\frac{\lambda}{\sigma} \right)^2;$$

2) ограничение на величину флуктуаций (которые не покидают данной ячейки) в зависимости от размерности решетки

$$2\pi\sqrt{2d} \leq \left(\frac{\lambda}{\sigma} \right),$$

которое более удобно записать в виде

$$V \geq \frac{\sigma}{\omega} \sqrt{2d},$$

где V — объем случайного зародыша.

Это неравенство имеет простой физический смысл: чем больше размерность пространства, тем больших размеров зародыши необходимы, для того

чтобы оставаться (после спонтанного возникновения) в заданной ячейке пространства. С точки зрения теории фазовых переходов ситуация здесь еще более прозрачна, поскольку хорошо известно [3], что в одномерной модели Изинга фазовые переходы не наблюдаются, а в размерностях $d \geq 2$ возможность перехода обычно тем выше, чем больше размерность пространства.

3. КЛАССИЧЕСКИЙ ПОДХОД

Запишем свободную энергию $f = \beta F$ ($\beta = 1/T$) для неоднородного сплава в виде

$$f = \sum_i (c_i \ln c_i + c'_i \ln c'_i) + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \beta v_{ij} c_i c_j.$$

Тогда соответствующее обыкновенное дифференциальное уравнение можно записать в виде [1]

$$\frac{dc_i}{dt} = \sum_s A_{is} \left[\exp\left(\frac{\partial f}{\partial c_s}\right) - \exp\left(\frac{\partial f}{\partial c_i}\right) \right], \quad (1')$$

где в силу условия Онзагера $A_{is} = A_{si} > 0$. В состоянии равновесия все $f_i = \partial f / \partial c_i$ равны химическому потенциалу, так что правая часть уравнения (1') становится равной нулю. (Заметим, что уравнение (1') описывает эволюцию концентрации c_i в ячейке i).

В случае многокомпонентного сплава соответствующие уравнения имеют вид

$$\frac{dc_{p_i}}{dt} = \sum_{q_s} v_{i,s}^{p,q} [\exp(f_{ps} + f_{qi}) - \exp(f_{pi} + f_{qs})], \quad (2')$$

где

$$f = \sum_{p_i} c_{p_i} \ln c_{p_i} + \frac{1}{2} \beta v_{i,j}^{p,q} c_{p_i} c_{q_j}.$$

Эти уравнения понадобятся нам в дальнейшем.

В случае неоднородного распределения плотности в сплаве будем рассматривать уравнение Кана-Хилларда [1]

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} = \text{div} \left\{ M(c_i) \left[\frac{\nabla c_i}{c_i c'_i} + \nabla(\beta v c)_i \right] \right\}. \quad (3')$$

Здесь подвижность

$$M(c) = \gamma c c' \exp[\beta(u c)_i],$$

β пропорциональна вероятности перехода из i -й ячейки в $(i + 1)$ -ю, γ определена выше, $c' = 1 - c$, величина u определяет потенциал взаимодействия согласно модели Каца (см. выше).

Предположим, что в (3') выполнено усреднение по i (в смысле [1], см. также Введение) и запишем соответствующее уравнение в виде

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial M(c)}{\partial x} \left[\frac{\nabla c}{c c'} + \beta v \nabla c \right] + M(c) \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\nabla c}{c c'} + \beta v \nabla c \right].$$

Линеаризуем далее это уравнение в некотором положении равновесия (их может быть несколько). Тогда для возмущений получим уравнение

$$\frac{\partial c}{\partial t} = M'(c_0) \left[\frac{(\nabla c)^2}{c_0 c'_0} + \beta v \nabla^2 c + \beta \nabla v \nabla c \right] + \frac{\nabla^2 c c_0 c'_0 - \nabla c \nabla(c c')}{(c_0 c'_0)^2} + \beta \nabla v \nabla c + \beta v \nabla^2 c.$$

Здесь к коэффициентам уравнения мы применим метод «замораживания коэффициентов» (см., например, [10]). Заметим, что здесь членом $\nabla c \nabla(c c')$ можно пренебречь, поскольку он имеет порядок ε^3 . В результате получим уравнение

$$\frac{\partial c}{\partial t} = [M'(c_0) \beta \nabla v + \beta \nabla v] \nabla c + \frac{M'(c_0)}{c_0 c'_0} (\nabla c)^2 + \left[M'(c_0) \beta v + \frac{1}{c_0 c'_0} + \beta v \right] \nabla^2 c.$$

Поскольку это есть уравнение для возмущений, то, строго говоря, его следует записать в виде

$$\varepsilon \frac{\partial c}{\partial t} = \varepsilon a_1 \nabla c + \varepsilon^2 a_2 (\nabla c)^2 + \varepsilon^2 a_3 \nabla^2 c, \quad (3'')$$

где смысл обозначений $a_i, i = 1, 2, 3$, очевиден.

Уравнение (3'') имеет простой физический смысл: так, если градиент

$$\nabla v(x) = 2A \frac{x}{\sigma^2} e^{-x^2/\sigma^2}$$

мал, то членом с коэффициентом a_1 можно пренебречь, и в результате мы получим уравнение Бюргера

$$\varepsilon \frac{\partial c}{\partial t} + \frac{1}{2} a_2 \varepsilon^2 \left(\frac{\partial c}{\partial x} \right)^2 - \frac{1}{2} a_3 \varepsilon^2 \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} = 0, \quad (4')$$

хотя и записанное в несколько необычном виде: действительно, решению уравнения

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{a_3}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad \left(t' = \frac{t}{\varepsilon}, \quad x' = \frac{x}{\varepsilon} \right)$$

отвечает решение $c = -a_3 \ln u$ уравнения (4'). Обычно уравнением Бюргера называют уравнение, полученное из (4') дифференцированием по x и заменой

$u = \partial c / \partial x$. В дальнейшем, подразумевая сказанное, будем рассматривать уравнение Бюргерса в общепринятой форме:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a_2 u \frac{\partial u}{\partial x} = a_3 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}. \quad (4'')$$

Поскольку потенциал $v(r)$ мал не только при $r \leq \sigma^2$, но и при $r \gg \sigma$, уравнение (4'') имеет место и в этом случае; однако промежуточная ситуация $r \sim \sigma$ приводит к простому уравнению

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \beta \nabla v(x) (1 + M'(c_0)) \frac{\partial c}{\partial x}. \quad (5)$$

Уравнение (5) может быть записано в виде

$$\frac{dc}{dt} = 0 \quad \text{при} \quad \frac{dx}{dt} = a_1(x), \quad (6)$$

где

$$a_1(x) = -2\beta A \frac{x}{\sigma^2} e^{-x^2/\sigma^2} (1 + M'(c_0)).$$

Введем обозначение $y = x/\sigma$. Тогда, разлагая функцию $\exp(y^2)$ в ряд Тейлора, при достаточно малых y^2 получаем уравнение

$$\sigma \frac{dy}{dt} = -2\beta \frac{A}{\sigma} y,$$

которое имеет интеграл

$$\ln y = -2\beta \frac{A}{\sigma^2} t + \text{const}, \quad (7)$$

и, следовательно, вдоль кривой, определяемой решением уравнения (6), функция $c(x, t)$ не изменяет своих значений: например, любое начальное возмущение, имеющее форму δ -функции, распространяется вдоль этой кривой без изменения формы, т.е. мы получаем некоторый аналог решения солитонного типа. Эти возмущения распространяются с фазовой скоростью, которая определяется функцией $a_1(x)$. Удобно характеризовать возмущения в «фазовой трубке» радиуса $|x| = \sigma$. Тогда

$$v_c \sim -2\beta \frac{A}{\sigma} (1 + M'(c_0)).$$

Последняя формула имеет, очевидно, простой физический смысл.

Заметим далее, что если в уравнении (4') «убрать» параметр ε с помощью замены $x = x'/\varepsilon$ и $t = t'/\varepsilon$, то в результате получим уравнение (4''); если, однако, в уравнении (4'') «возвратиться» к исходным переменным, то окажется, что члены в левой части этого уравнения будут иметь порядок ε , а член в правой части — порядка ε^2 и, следовательно,

им можно пренебречь. В результате получаем уравнение Бюргерса

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial G(u)}{\partial x} = 0, \quad (5')$$

где $G(u) = u^2$ и $a = a_2/2$ (напомним, что $a_2 = M'(c_0)/c_0(1 - c_0)$).

Поставим для уравнения (5') начальные условия

$$u(\cdot, 0) = u_0. \quad (5'')$$

Тогда из [5–7] следует, что решения уравнения (5') можно записать в виде

$$u_t^\varepsilon = E\{X_t^\varepsilon(x)\} = E\{X_{t/\varepsilon}([x/\varepsilon])\}$$

при $\varepsilon \rightarrow +0$, где $\varepsilon > 0$ играет роль шага решетки, а $E\{\cdot\}$ обозначает операцию взятия математического ожидания от случайного процесса $X_t^\varepsilon(\cdot)$.

При этом имеет место сходимость в слабом смысле [3]

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \int_x^y E\{x_t^\varepsilon(z)\} dz = \int_x^y u(z, t) dz,$$

и, следовательно,

$$u(z, t) = \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} E\{X_t^\varepsilon(z)\}$$

для почти всех $z \in R$. Здесь

$$\{X_t = \{X_t(k), k \in Z\}, \quad t \geq 0\}$$

есть стационарный марковский процесс (в узком смысле) типа пуассоновских часов (более подробно см. [3, 5–7]), непрерывный справа и имеющий конечные пределы слева. Генератор этого случайного процесса определяется на множестве цилиндрических функций из некоторого измеримого пространства \mathcal{E} (определение см., например, в [3, 8]) соотношением

$$Lf(\eta) = \sum_{k,l \in Z} p(l)g(\eta(k))[f(\eta^{k,k+l}) - f(\eta)],$$

где

$$\eta^{k,k+l}(m) = \begin{cases} \eta(m), & \text{если } m \neq k \text{ и } m \neq k+l \\ & \text{или } \eta(k) = 0, \\ \eta(m) - 1, & \text{если } m = k \text{ и } \eta(k) \geq 1, \\ \eta(m) + 1, & \text{если } m = k+l \text{ и } \eta(k) \geq 1, \end{cases}$$

а функция $g(\cdot)$ порождается функцией $G(\cdot)$ (см. уравнение (5')); и, наконец,

$$a = \sum_{l \in Z^+} lp(l) \neq 0$$

и, таким образом, число a определяет среднюю скорость движения потока возмущений, который направлен вправо при $a > 0$ и влево при $a < 0$.

При $a < 0$ должны выполняться энтропийные условия [8]

$$u^-(x, t) = \lim_{y \rightarrow x} u(y, t) \geq u^+(x, t) = \lim_{y \rightarrow x} u(y, t),$$

при $a > 0$

$$u^-(x, t) \leq u^+(x, t).$$

Эти условия, очевидно, выполняются, поскольку u есть убывающая функция от координаты x , т. е.

$$u(x, t) = \begin{cases} \alpha, & \text{если } x < a \frac{G(\beta) - G(\alpha)}{\beta - \alpha}, \\ \beta, & \text{если } x > a \frac{G(\beta) - G(\alpha)}{\beta - \alpha}, \end{cases}$$

причем $u_0(x, 0) = \alpha$, если $x = 0$ и $u_0(x, 0) = \beta$, если $x > 0$ ²⁾.

При $a > 0$ непрерывная функция $G'(\cdot)$ является строго убывающей, и мы имеем

$$aG'(\alpha) \leq aG'(\cdot) \leq aG'(\beta)$$

и, как вытекает из метода характеристик для гиперболических уравнений (см. [10]),

$$x > aG'(\beta)t \Rightarrow u(x, t) = u_0(x - aG'(u)t) = \beta$$

и

$$x < aG'(\alpha)t \Rightarrow u(x, t) = u_0(x - aG'(u)t) = \alpha$$

и, наконец, в общем случае мы получаем, что

$$u(x, t) = \begin{cases} \alpha, & \text{если } x \leq aG'(\alpha)t, \\ (G')^{-1}\left(\frac{x}{at}\right), & \text{если } aG'(\alpha)t \leq x \leq aG'(\beta)t, \\ \beta, & \text{если } x \geq aG'(\beta)t. \end{cases}$$

Это просто известное представление решения уравнения Бюргера. Движение влево рассматривается аналогично.

Тем самым мы показали, что возмущения решения уравнения Кана–Хилларда в окрестности некоторого положения равновесия имеют форму бегущей волны, которая распространяется с фазовой скоростью $v(x, t) = aG'(u(x(t), t))$ для каждого

²⁾ Т. е. здесь и далее мы считаем, что начальная форма зародыша представима в виде «ступеньки».

заданного решения u . Как известно (см., например, [10]), каждая точка профиля такой волны «бежит» по своей характеристике (с собственной скоростью), и в силу непараллельности характеристик профиль волны при этом изменяется, т. е. сжимается или растягивается; в результате образуется разрыв, т. е. область бесконечно быстрого изменения амплитуд возмущений (в данном приближении).

При образовании достаточно узкой области быстрого изменения амплитуд возмущений в окрестности положения равновесия существенную роль начинают играть высокочастотные диссипация и дисперсия: так, когда их действие компенсирует действие нелинейности, форма волны почти перестает изменяться (если не считать слабого затухания), т. е. образуется квазистационарная ударная волна. Область, состоящая из множества разрывов в такой волне, распространяется с конечной скоростью v_c , значение которой определяется, как известно, граничными условиями на разрыве: в рассматриваемой нами ситуации эти условия имеют вид

$$(\beta - \alpha)v_c = a[G(\beta) - G(\alpha)],$$

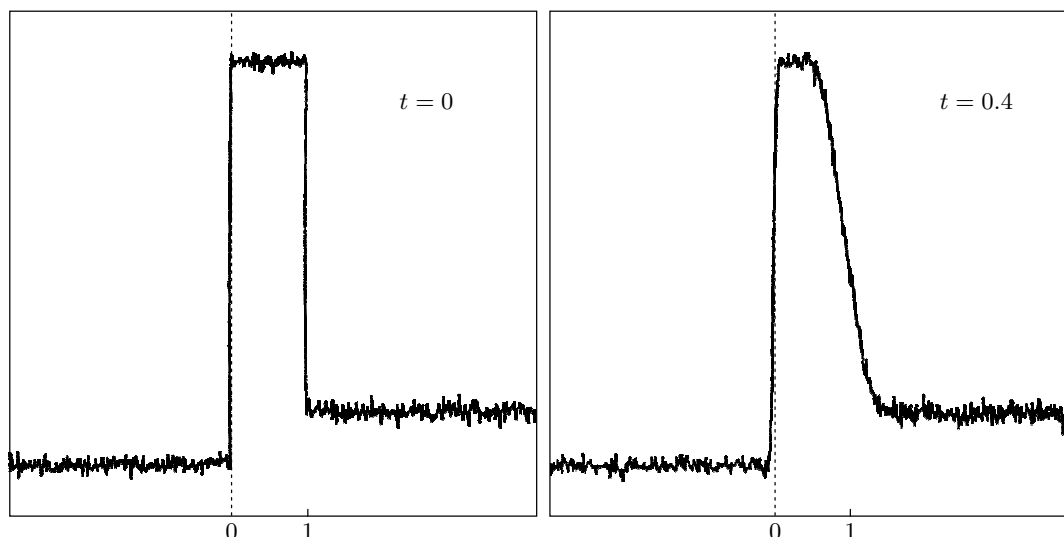
где значения α и β относятся к значениям амплитуд до и после разрыва на фронте волны.

Результаты численного моделирования (методом Монте–Карло) изображены на рисунке для случайного блуждания на решетке с условной плотностью распределения типа «ступеньки». Заметим, что задача Бюргера с произвольным (достаточно общим) начальным условием (формой зародыша) может иметь также кусочно-линейные периодические распределения типа бегущих волн (по автомодельной переменной; см. [10]). В этой ситуации неизвестно, какому случайному процессу соответствует полученное выше уравнение типа Бюргера: так что для «продолгации» утверждения данной работы на общие начальные распределения зародышей необходим эксперимент. Здесь имеет место та же ситуация, что и для известного в сверхпроводимости уравнения Гинзбурга–Ландау, которое строго доказано лишь при $T = T_c$, где T_c — критическая температура, но тем не менее находит экспериментальное подтверждение на конечном интервале температур, вдали от критической точки.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Выше доказаны следующие утверждения:

1) редукция уравнения Кана–Хилларда (в окрестности положений равновесия) к уравнению



Динамика вероятности распределения элементарной квазиравновесной флуктуации в окрестности точки спиновального распада для модели «ближайших соседей»

Бюргерса с вязкостью позволяет использовать формальные результаты из [5–7], где указан класс случайных процессов, которые усредняются на решетке (в смысле математического ожидания) таким образом, что в пределе непрерывной среды мы получаем задачу Коши для уравнения Бюргерса: с помощью такого (точно указанного) случайного процесса можно моделировать процесс зародышеобразования в бинарном сплаве);

2) гиперконечный подход [8], в свою очередь, позволяет точно рассчитать вероятности переходов из ячейки в ячейку с учетом времени релаксации в ячейке с помощью соответствующих результатов из [1];

3) получено строгое термодинамическое обоснование предлагаемой выше решеточной модели для флуктуаций плотности, описывающей процессы зародышеобразования в бинарных сплавах согласно теории Кана–Хилларда [11].

Авторы выражают благодарность Л. И. Стефановичу за просмотр рукописи и ряд ценных замечаний. Данная работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Украины (проект 2М/71-2000).

ЛИТЕРАТУРА

1. V. G. Vaks, S. V. Beiden, and V. Yu. Dobretsov, Письма в ЖЭТФ **61**, 1 (1995).
2. А. Г. Синай, *Теория фазовых переходов. Строгие результаты*, Наука, Москва (1980).
3. Т. Лигgett, *Марковские процессы с локальным взаимодействием*, Мир, Москва (1989).
4. М. Кац, *Несколько вероятностных задач физики и математики*, Мир, Москва (1965).
5. A. Benassi and J. P. Fouque, *Ann. I. N. P.* **29**, 2 (1988).
6. J. P. Fouque, *Summer Seminar Mathematics of Random Media*, AMS-SIAM Virginia–U.S.A. (1988).
7. A. Benassi and J. P. Fouque, *Ann. Probability* **15**, 2 (1987).
8. С. Альбеверно, Й. Фенстад, Р. Хеэг-Крон, Т. Линдстрем, *Нестандартные методы в стохастическом анализе и математической физике*, Мир, Москва (1980).
9. Л. Аккарди, А. Фриджеро, Дж. Т. Льюис, в сб. *Квантовые случайные процессы и открытые системы*, под ред. А. С. Холево, Мир, Москва (1988), с. 13.
10. Г. М. Заславский, Р. З. Сагдеев, *Введение в нелинейную физику: от маятника до турбулентности и хаоса*, Наука, Москва (1988).
11. J. W. Cahn, *Transactions of the metallurgical society of aime* **242**, 166 (1968).