

Cahn-Hilliard 方程的行波解¹⁾

刘深泉 陆启韶 王琪

(北京航空航天大学 应用数理系)

摘要 主要利用奇异摄动方法,得到一维 Cahn-Hilliard 方程行波解形式的内、外解. 两者匹配得到整体行波解. 这个结果的特点是,它不仅将高阶偏微分方程的解用内外解匹配好,而且完全满足方程的边界条件和初始条件. 当长时间变化时, Cahn-Hilliard 方程的解以行波结构为极限状态. 此结果很好地解释 Cahn-Hilliard 方程的现有理论及数值结果,实际模型和方程的性质也完全符合.

关键词 行波解; 奇异摄动; 内解; 外解; 匹配

分类号 O 175.29

1 问题的提出

Cahn-Hilliard 模型一般表示在某一固定温度下,双合金熔融态金属淬火后的状态分离变化过程,它的一般形式为

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x^2} \left[-\epsilon^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f(u) \right] \quad (1)$$

其中 $u(x, t) ((x, t) \in [0, 1] \times R)$ 表示双合金中的一种金属成分的浓度; $\epsilon > 0$ 是小参数. 当 $u(x, t)$ 变化时,可表示固态或液态合金的相互转化. 此模型最早出现在文献[1],以后有许多文献讨论与此有关的问题,大量的结果集中在—维,其理论研究主要在两方面:一是方程的解在 Sobolev 空间的理论性质^[2,3],另一是方程的平衡态出现的各种波形^[4,5]. 数值结果主要是初边值问题的计算^[2,6]. 二维以上的结果很少,参看文献[7].

对—维的 Cahn-Hilliard 方程(1), $f(u)$ 一般具有如图1的形状,且满足

$$\int_0^1 f(u) du = 0 \quad f(-1) = f(0) = f(1) = 0 \quad (2)$$

在与外界无交换时,一般采用 Neumann 边界条件:

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} = 0 \quad x = 0, x = 1 \quad (3)$$

由此条件得到: $m = \int_0^1 u(x, t) dx$ 是常数,即 Cahn-Hilliard 方程在 $[0, 1]$ 上是守恒的.

关于方程(1),许多文章^[2,4]讨论在边界条件(3)的情况下, Cahn-Hilliard 方程的平衡解的结构

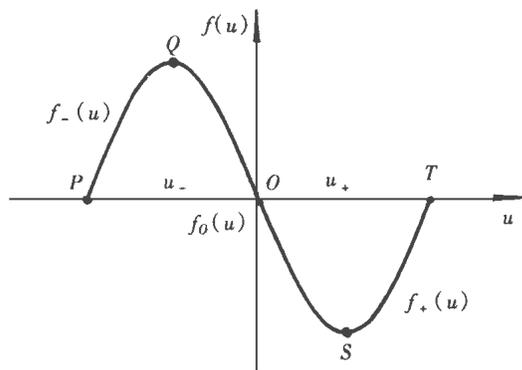


图1 函数 $f(u)$ 在 $u \in [0, 1]$ 的变化图

及稳定性,并在附加初始条件时作了大量的数值计算. 他们的结论侧重于单个特解的性质,并且比较零散. 本文主要从理论上研究方程(1)的行波解,用奇异摄动的方法,构造 Cahn-Hilliard 方程的 $O(\epsilon)$ 阶的行波解的内、外解,再将两者匹配后得到方程的整体行波解. 并对已有结果给出系统的分析.

2 行波解

抛开边界条件(3),先研究方程(1)当 ϵ 很小时的行波解. 对方程(1)寻求 $u = u(z)$, $z = x - ct$ 形式的行波解,将其代入(1)后得到

$$-cu' = [-\epsilon^2 u'' + f(u)]'' \quad (4)$$

积分一次得

$$-\epsilon^2 u''' + f'(u)u' + cu + k = 0 \quad (5)$$

其中 k 是积分常数. 仿照(3)在 $z \in [0, 1]$ 上 u 应满足如下条件:

收稿日期: 1997-03-12 第一作者 男 33岁 博士生 100083 北京

1) 国家自然科学基金(19572014)资助项目

$$u' = u''' = 0 \quad z = 0 \quad z = 1$$

$$\int_0^1 u(z) dz = m \quad (6)$$

作为一种重要情况,先考虑如下端点限制条件:

$$u(0) = u(1) = -1 \quad (7)$$

当 ϵ 很小时,满足(5)的 $O(\epsilon^2)$ 阶近似函数 $u(z)$ 一般几乎不可能在两个端点同时满足边界条件(6)和(7).所以在 $[0, 1]$ 内一定有变量 u 变化很快的转变层,又由(7)可知转变层可能有两个.假设在 $(0, 1)$ 内的 a, b 两点处分别有一个 u 变化很快的转变层,下面利用转变层理论构造方程(5)的内、外解.内、外解匹配得到(5)的 $O(\epsilon)$ 整体解.对方程(4)寻找如下图 2 的解.

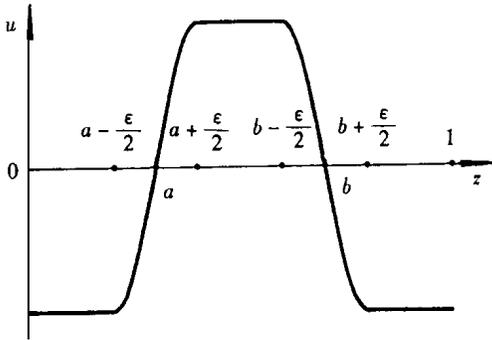


图 2 解 u 关于 z 的示意图

为方便,先分析图 1 中 $f(u)$. 如果从变分角度^[3]来考虑,可将 $[-1, 1]$ 分成 3 个区间,其中 $f(u)$ 分别表示为: $f_-(u)$ ($u \in [-1, u_-]$, u 稳定), $f_0(u)$ ($u \in [u_-, u_+]$, u 不稳定)和 $f_+(u)$ ($u \in [u_+, 1]$, u 稳定). 其中稳定区间中还有接近 $f(u)$ 极值的亚稳区间. 假设 ϵ 为小量,两个边界层的宽度分别为 $O(\epsilon)$. 下面分别构造内、外解.

1) 外解

在(5)式中,取 $O(\epsilon^2)$ 近似得到

$$f'(u)u' + cu + k = 0 \quad (8)$$

当 $z \in [0, a - \epsilon/2]$ 时, u 接近于 -1 , 且变化很慢,取 $f(u) = f_-(u)$, (5)式变为

$$f'_-(u)u' + cu + k_{1-} = 0 \quad z \in (0, a - \epsilon/2) \quad (9)$$

将边界条件(6)、(7)在 $z=0$ 处代入得 $k_{1-} = c$, 此时方程的解记为 $u = u_{1-}^{(0)}(z)$. 当 $z \in [a + \epsilon/2, b - \epsilon/2]$ 时, u 接近于 1 , 且变化很慢,取 $f(u) = f_+(u)$, (5)式变为

$$f'_+(u)u' + cu + k_{1+} = 0$$

$$z \in (a + \epsilon/2, b - \epsilon/2) \quad (10)$$

取 $k_{1+} = 0$, 后面在轨线分析再解释. 此时方程的解记为 $u = u_+(z)$.

当 $z \in [b + \epsilon/2, 1]$ 时, u 接近于 -1 , 且变化很慢,取 $f(u) = f_-(u)$, (5)式变为

$$f'_-(u)u' + cu + k_{2-} = 0 \quad z \in (a + \epsilon/2, 1) \quad (11)$$

将边界条件(6)、(7)在 $z=1$ 处代入得 $k_{2-} = c$, 此时方程的解记为 $u = u_{1-}(z)$.

这样就得到了外解,下面再构造内解.

2) 内解

由于内解在转变层内,且转变层很薄, u 变化很快,所以必须用放大的空间标度来分析. 在 $x = a$ 点附近,引入变换 $y = (z - a)/\epsilon$, 则(5)式变为

$$-u''_{yy} + f'(u)u'_y + \epsilon(cu + k) = 0 \quad (12)$$

取 $O(\epsilon)$ 阶近似得

$$-u''_{yy} + f'(u)u'_y = 0 \quad (13)$$

积分后得

$$u''_{yy} = f(u) + A \quad (14)$$

在此边界层内,取 $f(u) = f_0(u)$, 积分常数取 $A = 0$. 此方程是典型的二阶非线性保守系统. 它在此边界层内的解必须和外解(9)、(10)相匹配. 注意到 $\epsilon \rightarrow 0$ 等价于 $y \rightarrow \infty$, 则有如下边界条件:

$$\left. \begin{aligned} \lim_{y \rightarrow -\infty} u(y) &= u_0-(a) \\ \lim_{y \rightarrow +\infty} u(y) &= u_+(a) \end{aligned} \right\} \quad (15)$$

上式中的 u_{0-}, u_+ 分别为(9)、(10)的解.

类似可考虑边界层 $z = b$. 引入变换 $y = (z - b)/\epsilon$, 得到 $O(\epsilon)$ 解:

$$u''_{yy} = f(u) + B \quad (16)$$

对此边界层,仍取 $f(u) = f_0(u)$, 积分常数取 $B = 0$. 此方程也是二阶非线性保守系统. 它的解亦必须和外解(10)、(11)相匹配, 边界条件为:

$$\left. \begin{aligned} \lim_{y \rightarrow -\infty} u(y) &= u_+(b) \\ \lim_{y \rightarrow +\infty} u(y) &= u_{1-}(b) \end{aligned} \right\} \quad (17)$$

上式中的 u_+, u_{1-} 分别为(10)、(11)解的表达式. 内、外解经过上述匹配,可得方程(5)的 $O(\epsilon)$ 解.

下面我们来分析内、外解的匹配关系. 先看 u 随 z 的变化规律. 从图 1 和图 2 可知: ①在 $z \in [0, a - \epsilon/2]$ 时, u 从 P 点缓慢增加到 Q 点; ②在 $z \in [a - \epsilon/2, a + \epsilon/2]$ 时, u 从 Q 点快速增加到 S 点; ③在 $z \in [a + \epsilon/2, b - \epsilon/2]$ 时, u 从 S 点缓慢增加到 T 点, 又缓慢从 T 点下降到 S 点; ④在 $z \in [b - \epsilon/2, b + \epsilon/2]$ 时, u 从 S 点快速减小到 Q 点; ⑤在 $z \in [b + \epsilon/2, 1]$ 时, u 从 Q 点缓慢减小到 P 点.

从上述分析可知, u 在稳定区间变化很慢, 在不稳定区间变化很快, 在两者的转化中, 包含在稳定区间内还有一个亚稳区间. 此外, 外解(10)实际包含 u 接近 -1 和 1 的两部分, 选取积分常数需两部分匹配, 显然, 不失一般性, 取 $k_+ = 0$ 即可.

内解分析: 两个边界层的内解都是二阶非线性保守系统, 典型的相图分析可知, 当取 $A = B = 0$ 时, 方程 $u'' = f(u)$ 可转化为如下方程:

$$\left. \begin{aligned} u' &= v \\ v' &= f(u) \end{aligned} \right\} \quad (18)$$

显然, 由 $f(u)$ 的图形可知, 此系统有 3 个奇点: $(-1, 0), (0, 0), (1, 0)$, 分别为鞍点、中心、鞍点. 从轨线可知, 内解具有异宿轨线, 所以 a, b 两点附近都存在从 1 到 -1 或从 -1 到 1 的激波. 即(15)、(17)的内、外解匹配关系可以满足. 从几何上观察, 这种类型的激波图形有一变化较快, 斜率较大的中间部分; 还有变化较慢, 斜率较小的两端部分. 对应物理上表示液、固态的转变过程相当快, 转化为液、固态后, 物理状态会变为相对稳定. 这样的内解分析和实际情形完全一致.

外解分析: 先看 $z = 0$ 点的边界条件, 当取 $k_- = c$ 时, 若 $f'(-1) \neq 0$, 注意到条件 $u(0) = -1$, 可以得到:

$$f'(-1)u' + cu + k_- = 0$$

$$\left. \frac{du}{dz} \right|_{z=0} = -\frac{c(u+1)}{f'(u)} \Big|_{z=0} = 0$$

类似计算可得

$$\left(\frac{d^2u}{dz^2} \Big|_{z=0} = \frac{d}{du} \left(\frac{du}{dz} \right) \frac{du}{dz} \Big|_{z=0} = 0 \right.$$

$$\left. \frac{d^3u}{dz^3} \Big|_{z=0} = \frac{d}{du} \left(\frac{d^2u}{dz^2} \right) \frac{du}{dz} \Big|_{z=0} = 0 \right.$$

所以在 $z = 0$ 点满足边界条件

$$\frac{du}{dz} = \frac{d^3u}{dz^3} = 0$$

类似计算可知, 在 $z = 1$ 点也满足上面边界条件. 从以上外解分析得到, 外解在边界端点满足边界条件, 这些条件表明外解变化比较缓慢, 这 and 实际情况完全一致.

边界层的位置: 当 ϵ 很小时, 利用

$$\int_0^1 u(x, t) dx = m$$

得到 $b - a = (m + 1)/2$

当波形在 $z \in [0, 1]$ 中关于 $z = 1/2$ 对称时, $a + b = 1$, 则有 $a = (1 - m)/4, b = (m + 3)/4$. 一般地, 要确定边界层的位置还需要和边界条件联系起来.

这样我们得到满足边界条件(6)的方程(4)的 $O(\epsilon)$ 解. 解的形状如图 2.

3 理论和数值结果的比较

1) 和平衡解的比较

当 $c = 0$ 时, 本文行波解就是(1)的平衡解. 在前面分析中, 假设行波解在端点处满足 $u(0) = u(1) = -1$ 的条件, 一般地, 对任意 $-1 < \alpha, \beta < 1$ 都可以用以上方法构造满足 $u(0) = \alpha, u(1) = \beta$ 的行波解. 由于边界条件的不同取法, 边界层的数目可能改变, 有的边界层可能不存在, 一般会有亚稳平衡解、spike 解和图 2 类似的解等几种情况.

对这里的 spike 解, 在几何上表示一个边界层在 $a = 0$ 处, 另一边界层不存在, 这种类型的解, 首先由 P. W. Bates 在文献[4]中用变分方法得到, 并且确定这类解的不稳定性. 此解经过扰动, 或趋向于平凡的亚稳常数解, 或趋向于图 2 的全部波形. 本文用内、外匹配方法, 不仅得到 spike 解类型的解, 而且还可得到波形图形的各种变化. 这些变化可解释一些特殊的实验现象.

2) 和 Cahn-Hilliard 方程解的比较

对波形图 2, 由于 $u(0) = u(1) = -1$, 所以可在 z 轴上周期延拓, 并将延拓后的解放在 (u, x) 平面上. 注意, 本文行波解满足方程(1), 但在 $z = 0$ 或 $x = ct$ 上满足边界条件(6), 所以本文行波解和 Cahn-Hilliard 方程满足边界条件(3)的解有所区别. 我们从以下两个方面作一比较.

① 延拓后的行波解随时间增加时, 在 $c > 0, 0 < x < 1$ 的范围内波形演化过程. 与文献[6]中方程(1)的初边值问题解的计算时(在 ϵ 很小情况下), 时间很长的情况下的波形演变完全一致. 文献[6]的计算中, 由于边界层很薄的影响出现了步长选取的问题, 但在这却有很好的解释, 只不过是行波的平移的结果.

② 文献[6]的计算可知, 当 ϵ 很小时从任意初值开始, 开始的波形受初值的影响很大, 长时间计算后, 都出现和图 2 类似的波形. 特别地, 当以类似行波的形状为初始条件计算时, 后面的形状几乎不变. 如果认为长时间变化的解趋向于定态, 则他们的结果和本文的行波解是一致的.

4 结论

从上面分析可知, 本文的行波解和以前的定态解符合得很好, 也和 Cahn-Hilliard 方程的一般

解在长时间变化时的波形基本一致. 从本文可知:

1) Cahn-Hilliard 方程本身具有行波形的构造, 此结论对平面仍然成立, 此结构反映在液、固态变化上表明: 两种状态的改变很快, 而改变后的液、固态相对稳定. 这和实际情况完全一致.

2) 本文的理论结果将以前的各种计算结果统一联系起来, 这表明长时间变化时, Cahn-Hilliard 方程以行波结构为极限, 从而在理论上根本解释了各种状态下长时间初边值问题的计算出现固定波形的原因.

3) 对二维 Cahn-Hilliard 方程, 可用类似一维的摄动方法得到平面上形如 $u = u(z)$, $z = x \cos \alpha + y \sin \alpha - ct$ 的行波解. 这里 α 为任一角度.

此外 Cahn-Hilliard 方程的解受初值的影响很大, 短时间的计算结果不能反映 Cahn-Hilliard 方程本身的特点. 一般情况下, 更深入地讨论 Cahn-Hilliard 方程与行波解的关系是很有意义的工作.

参 考 文 献

- 1 Cahn J W, Hilliard J E. Free energy of a nonuniform system (I). J Chem Phys. 1958, 28; 258 ~ 267
- 2 Alikakos N, Bates P W. Slow motion for the Cahn-Hilliard equation in one space dimension. J Differential Equations 1991, 90; 81 ~ 135
- 3 Pego R L. Front migration in the nonlinear Cahn-Hilliard equation. Proc Roy Soc London Ser A, 1989, 422; 261 ~ 278
- 4 Bates P W, Fife P C. The dynamics of nucleation for the Cahn-Hilliard equation. SIAM J Appl Math, 1993, 53(4); 990 ~ 1008
- 5 Carr J, Gurtin M E, Slemrod M. Structured phase transitions on finite interval. Arch Rational Mech Anal, 1984, 86; 317 ~ 351
- 6 Elliott C M, French D A. Numerical studies of the Cahn-Hilliard equation for phase separation. IMA J Appl Math, 1987, 38; 97 ~ 128
- 7 Bates P W, Fife P C. Spectral comparison principles for the Cahn-Hilliard and phase field equations and times scales for coarsening. Phys D, 1990, 43; 335 ~ 348

Traveling Waves of the Cahn-Hilliard Equation

Liu Shenquan Lu Qishao Wang Qi

(Beijing University of Aeronautics and Astronautics, Dept. of Applied Mathematics and Physics)

Abstract The asymptotic perturbation method is used to deal with the Cahn-Hilliard equation and obtain the inner and outer solutions of traveling waves. The two solutions are matched into one solution of the equation. The feature of the method not only matches the inner and outer solutions of the higher order partial differential equation, but also satisfies the boundary condition and initial condition. After a long time evolution, the solutions of the Cahn-Hilliard equation have the structures of traveling waves as the limit states. The result in this paper can explain the theoretic and numerical simulation results of the Cahn-Hilliard equation. The property of model fits well with that of the equation.

Key words traveling wave; asymptotic perturbation; inner solution; outer solution; matching