



## ДИСКРЕТНЫЕ БРИЗЕРЫ В СКАЛЯРНЫХ ДИНАМИЧЕСКИХ МОДЕЛЯХ НА ПЛОСКОЙ КВАДРАТНОЙ РЕШЕТКЕ\*

*Г.С. Безуглова, П.П. Гончаров, Ю.В. Гуров, Г.М. Чечин*

С помощью теоретико-групповых методов для скалярных динамических моделей на плоской квадратной решетке найдены все симметрично обусловленные инвариантные многообразия, допускающие локализованные колебания. Для модели с однородным потенциалом межчастичного взаимодействия на этих многообразиях построены дискретные бризеры и исследована их устойчивость. Обнаружены необычные бризерные решения, которые не являются нелинейными нормальными модами Розенберга, несмотря на присущую этой модели возможность разделения пространственных и временной переменных. Найдены дискретные бризеры того же типа и в двумерной модели линейно связанных осцилляторов Дуффинга. Примененный подход к изучению бризерных решений может быть распространен на другие типы динамических моделей на двумерных и трехмерных пространственных структурах.

*Ключевые слова:* Нелинейная динамика, решеточные модели, дискретные бризеры, инвариантные многообразия, теоретико-групповые методы.

### Введение

Дискретные бризеры (ДБ) представляют собой локализованные в пространстве и периодические во времени возбуждения в нелинейных гамильтоновых решетках. В настоящее время существует целый ряд обширных обзорных работ, посвященных свойствам этих динамических объектов в различных физических системах и их экспериментальному обнаружению [1–4]. Большую роль при исследовании ДБ играют методы математического моделирования, предполагающие широкое использование вычислительных экспериментов. Большинство таких работ было выполнено для различных типов одномерных цепочек, и лишь относительно небольшое число статей посвящено исследованию ДБ в периодических структурах с размерностью  $D > 1$ . К числу последних относятся, например, работы [5–16], в которых рассматриваются

\*Статья написана по материалам доклада на IX Международной школе «Хаотические автоколебания и образование структур», Саратов, Россия, 4–9 октября, 2010.

различные скалярные и векторные модели в двумерных и трехмерных периодических структурах.

В скалярных моделях каждому узлу решетки отвечает одна динамическая переменная (например, в плоских механических моделях таковой может быть отклонение частиц решетки в перпендикулярном к ней направлении или заряд конденсатора в электрических моделях). В векторных моделях каждому узлу отвечает несколько динамических переменных, каковыми могут быть  $x$ - и  $y$ -компоненты атомных смещений в плоскости двумерной решетки. Во многих из вышеперечисленных работ (см. также ссылки в них на статьи других авторов) ДБ в двумерных решетках строятся с помощью некоторых приближений, например, с помощью метода «вращающейся фазы» (RWA), и лишь в немногих исследование проведено с помощью достаточно точных вычислительных процедур. К числу таких работ следует отнести статью [5], в которой строятся ДБ в скалярной модели на квадратной и гексагональной решетках с межчастичным взаимодействием, описываемым однородными потенциалами четных степеней.

Настоящая работа посвящена проблеме построения ДБ с машинной степенью точности для скалярных динамических моделей на плоской квадратной решетке. При этом поиск бризерных решений разделен на два этапа:

- нахождение всех возможных выделенных по симметрии инвариантных многообразий, на которых могут быть реализованы локализованные в пространстве колебания;
- построение на каждом из этих многообразий периодических во времени колебаний, которые и представляют собой искомые ДБ.

Существенно, что первый этап не зависит от вида исследуемой динамической модели и выполняется лишь с помощью некоторых теоретико-групповых методов, в то время как реализация второго этапа невозможна без знания дифференциальных уравнений, описывающих рассматриваемую модель. Предлагаемая методика может быть естественным образом обобщена на случай решеток и динамических моделей других типов.

В настоящей работе исследуются дискретные бризеры в следующих двух скалярных моделях на плоской квадратной решетке:

$$\ddot{x}_{i,j} + \gamma x_{i,j}^{m-1} = (x_{i+1,j} - x_{i,j})^{m-1} - (x_{i,j} - x_{i-1,j})^{m-1} + (x_{i,j+1} - x_{i,j})^{m-1} - (x_{i,j} - x_{i,j-1})^{m-1}, \quad (1)$$

$$\ddot{x}_{i,j} + \gamma x_{i,j}^3 = x_{i+1,j} + x_{i-1,j} + x_{i,j+1} + x_{i,j-1} - 4x_{i,j}. \quad (2)$$

Первая модель соответствует *однородному* потенциалу степени  $m$  с учетом его *онсайтовой* и *интерсайтовой* частей\*. Такая модель не допускает гармонического приближения, в силу чего в ней отсутствует фононный спектр. ДБ в этой модели обычно представляют собой локализованные в пространстве *нелинейные нормальные моды Розенберга*, а для их нахождения приходится решать некоторую систему нелинейных алгебраических уравнений.

\*В отечественной литературе в первом случае обычно говорят о потенциальной энергии отдельных осцилляторов, а во втором – об энергии взаимодействия между ними.

Вторая модель описывает систему линейно связанных осцилляторов Дуффинга в узлах квадратной решетки и имеет некоторый фононный спектр. Построение ДБ в такой модели сводится к решению системы нелинейных дифференциальных уравнений (2) и применению некоторого варианта метода спуска.

Для обеих вышеуказанных моделей дискретные бризеры строятся на одних и тех же *симметрично обусловленных инвариантных многообразиях*, которые находятся с помощью теоретико-групповых методов.

Заметим, что в дальнейшем для удобства мы будем называть входящие в уравнения (1), (2) динамические переменные «смещениями частиц решетки», хотя они могут иметь и совершенно другой физический смысл.

### 1. Симметрично обусловленные инвариантные многообразия для скалярной модели на плоской квадратной решетке

Первый этап построения ДБ основан на выделении симметрично обусловленных инвариантных многообразий с помощью теоретико групповых методов, которые были ранее использованы нами для построения теории бушей нелинейных нормальных мод [17, 18] (см. также и [19]). Суть такого подхода заключается в том, что все возможные динамические режимы в физической системе, уравнения которой инвариантны относительно некоторой группы дискретной симметрии  $G_0$ , можно классифицировать по *подгруппам* этой группы.

Анализируя дифференциальные уравнения, описывающие динамику скалярной модели (1) на плоской квадратной решетке, легко убедиться в том, что они инвариантны относительно всех преобразований, которые соответствуют элементам симметрии рассматриваемой решетки в состоянии равновесия. В обозначении Шенфлиса эта симметрия описывается точечной группой  $C_{4v}$ . В качестве  $G_0$  мы однако выбираем расширенную группу

$$G_0 = C_{4v} \times (E, P), \quad (3)$$

являющуюся прямым произведением группы  $C_{4v}$  на группу второго порядка, которая состоит из тождественного элемента  $E$  и преобразования  $P$ , изменяющего знаки всех динамических переменных. Такой выбор обусловлен тем, что позволяет рассматривать не только скалярные модели, характеризующиеся потенциалом межчастичного взаимодействия общего вида (для этого достаточно положить  $G_0 = C_{4v}$ ), но и модели, в которых этот потенциал является *четной* функцией своего аргумента.

Более того, следует иметь в виду, что в моделях (1) и (2) учитывается взаимодействие между переменными, относящимися только к ближайшим узлам решетки. Однако обсуждаемые нами группы описывают симметрию и других скалярных моделей на плоской квадратной решетке, в частности, тех, в которых радиус межчастичного взаимодействия является произвольным. Как известно, атомы в кристалле распределяются по точечным *орбитам* соответствующей *пространственной* группы. В кристаллографии набор точек таких орбит в пределах одной элементарной ячейки называется «правильной системой точек» (ПСТ). Каждая ПСТ характеризуется своей точечной группой симметрии, которая центрирована определенным образом относительно элементарной ячейки кристалла (см., например, [20]).

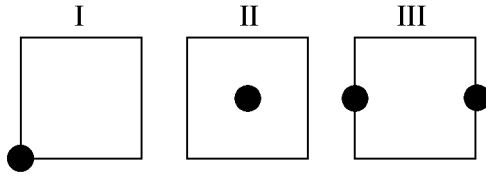


Рис. 1. Правильные системы точек (ПСТ) плоской квадратной решетки, соответствующие возможной локализации дискретных бризеров

Рис. 1. Правильные системы точек (ПСТ) плоской квадратной решетки, соответствующие возможной локализации дискретных бризеров

Рис. 1. Правильные системы точек (ПСТ) плоской квадратной решетки, соответствующие возможной локализации дискретных бризеров

Можно показать, что из всех возможных в плоской квадратной решетке типов правильных систем точек для построения дискретных бризеров достаточно учитывать только три такие системы. Им отвечают следующие точечные группы: I – группа  $C_{4v}$ , «локализованная» в узле элементарной ячейки (все ее элементы симметрии не изменяют положение данного узла решетки); II – точечная группа  $C_{4v}$ , локализованная в центре элементарной ячейки и III – группа  $C_{2v}$ , локализованная в центре ребра элементарной ячейки. На рис. 1 приведены ПСТ, соответствующие этим трем случаям. (Заметим, что в случае III на элементарную ячейку решетки приходится две точки – «кратность» этой ПСТ равна 2.)

В настоящей работе приведены результаты исследований инвариантных многообразий, отвечающих лишь первой ПСТ (данные по двум другим типам ПСТ будут приведены в отдельной публикации).

ДБ представляет собой локализованный в пространстве колебательный режим, в процессе которого частицы решетки отклоняются из своих положений равновесия. Симметрия этого динамического объекта должна поэтому описываться одной из подгрупп точечных групп симметрии ПСТ. Таким образом, для полной симметричной классификации всех возможных бризеров необходимо перебрать все подгруппы точечных групп правильных систем точек данной кристаллической решетки. Каждой из таких подгрупп отвечает некоторое инвариантное многообразие исследуемой динамической модели. Это означает, что любой динамический режим, который определяется начальными условиями на данном многообразии, не сходит с него в течение сколь угодно больших времен эволюции системы.

Симметрично обусловленные инвариантные многообразия были построены нами с помощью теоретико-групповых методов [21], разработанных ранее в рамках исследования структурных фазовых переходов. Эти многообразия задаются набором динамических переменных  $q_{ij}(t)$ , которые соответствуют узлам выделенного фрагмента решетки. Поскольку каждое из многообразий инвариантно относительно некоторой группы симметрии (она является подгруппой группы  $G_0$  и на рис. 2

$$\begin{aligned}
 Q_{3 \times 3}^{(1)} &= \begin{pmatrix} c & b & c \\ b & a & b \\ c & b & c \end{pmatrix} & Q_{3 \times 3}^{(2)} &= \begin{pmatrix} d & b & d \\ c & a & c \\ d & b & d \end{pmatrix} & Q_{3 \times 3}^{(3)} &= \begin{pmatrix} d & b & e \\ b & a & c \\ e & c & d \end{pmatrix} & Q_{3 \times 3}^{(4)} &= \begin{pmatrix} e & b & f \\ d & a & c \\ e & b & f \end{pmatrix} \\
 C_{4v} = 90^\circ, \sigma_y & & 180^\circ, \sigma_y & & \sigma_{xy} & & \sigma_y
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 Q_{3 \times 3}^{(5)} &= \begin{pmatrix} c & b & c \\ b & a & b \\ c & b & c \end{pmatrix} & Q_{3 \times 3}^{(6)} &= \begin{pmatrix} d & b & e \\ c & a & c \\ e & b & d \end{pmatrix} & Q_{3 \times 3}^{(7)} &= \begin{pmatrix} c & b & d \\ b & a & b \\ d & b & c \end{pmatrix} \\
 C_4 = 90^\circ & & 180^\circ & & 180^\circ, \sigma_{xy}
 \end{aligned}$$

Рис. 2. Инвариантные многообразия для скалярной модели на плоской квадратной решетке, допускающие локализованные колебания

указана своими генераторами под этим многообразием), между переменными  $q_{ij}(t)$ , относящимися к разным узлам решетки, существуют вполне определенные связи: некоторые из них оказываются равными друг другу или отличаются лишь своими знаками. В силу наличия таких связей, для входящих в уравнения типа (1) переменных  $q_{ij}(t)$  используются другие обозначения –  $a(t)$ ,  $b(t)$ ,  $c(t)$ , ... На приводимых ниже рисунках инвариантных многообразий временная зависимость этих переменных явно не указана.

$$\begin{pmatrix} a & b & c \\ a & b & c \\ a & b & c \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 0 & a & b \\ -a & 0 & c \\ -b & -c & 0 \end{pmatrix}$$

$C_4$                        $C_{xy}P$

Рис. 3. Примеры инвариантных многообразий, на которых невозможна реализация дискретных бризеров

Для ПСТ первого типа найдено 19 различных инвариантных многообразий, однако локализованные динамические режимы могут реализоваться только на семи из них (см. рис. 2). Действительно, на целом ряде многообразий ДБ не могут существовать в силу их специфической структуры. На рис. 3 приведены два примера инвариантных многообразий такого рода. Для первого из них невозможно организовать убывание амплитуд колебаний от центра к периферии, а для второго – нельзя построить светлый ДБ, поскольку амплитуда колебаний центральной частицы равна 0.

Заметим, что на рис. 2 не указано инвариантное многообразие, которому отвечает тривиальная группа симметрии (нет никаких элементов, кроме единичного), что означает отсутствие каких-либо связей между различными переменными  $q_{ij}(t)$ .

Фрагменты  $3 \times 3$  инвариантных многообразий  $Q_{3 \times 3}^{(1)}$  и  $Q_{3 \times 3}^{(5)}$ , как видно из рис. 2, оказываются тождественными друг другу, несмотря на то, что им отвечают разные группы симметрии –  $C_{4v}$  и  $C_4$ , соответственно. Если же построить для них фрагменты большего размера, например,  $Q_{5 \times 5}^{(1)}$  и  $Q_{5 \times 5}^{(5)}$ , можно убедиться в том, что данные многообразия являются *различными*. Они отличаются друг от друга соотношениями между амплитудами колебаний периферийных частиц. Расширение фрагмента решетки до любого требуемого размера легко осуществить, зная явное выражение для группы симметрии данного многообразия (оно указано на рис. 2 под каждым из них). Заметим, что такое расширение фрагментов необходимо осуществлять в случаях не слишком сильной локализации изучаемых бризеров, то есть когда амплитуды колебаний частиц, соответствующих периферийным узлам, не являются достаточно малыми по сравнению с амплитудами центральных частиц.

В настоящей работе исследуются сильно локализованные дискретные бризеры, что дает возможность ограничиться лишь  $3 \times 3$  или  $5 \times 5$  фрагментами решетки. Вне пределов этих фрагментов амплитуды динамических переменных  $x_{i,j}$  имеют практически нулевые значения. Тем не менее, при интегрировании дифференциальных уравнений (1) и (2) были использованы периодические граничные условия.

Следует особо подчеркнуть, что найденные с помощью теоретико групповых методов инвариантные многообразия являются таковыми для *любой* скалярных моделей, определенных на простой квадратной решетке и обладающих симметрией этой решетки. Более того, применяя те же самые методы, можно построить инвариантные многообразия и для различных *векторных* моделей на квадратной решетке, а также на других типах двумерных и трехмерных решеток.

## 2. Построение дискретных бризеров для модели с однородным потенциалом межчастичного взаимодействия

Каждое из приведенных в предыдущем разделе симметрично обусловленных инвариантных многообразий зависит от ряда произвольных параметров  $(a, b, c, \dots)$ , число которых может быть существенно меньше общего количества степеней свободы рассматриваемого фрагмента решетки. Учет этого обстоятельства в системах дифференциальных уравнений типа (1) позволяет уменьшить число таких уравнений за счет перехода от динамических переменных  $q_{ij}(t)$  к новым переменным  $a(t)$ ,  $b(t)$ ,  $c(t)$  ..., выделенным симметрией данного многообразия.

При решении уравнений (1) с произвольными начальными условиями можно получить некоторое, в общем случае, *непериодическое* движение рассматриваемой динамической системы. Поэтому для построения дискретных бризеров, которые по определению представляют собой *периодические* колебательные режимы, необходимо найти весьма специфические начальные условия для решения соответствующей системы дифференциальных уравнений второго порядка (граничные условия, как было указано выше, предполагаются периодическими). Наиболее просто такие начальные условия могут быть найдены для динамических моделей, которые описываются однородными потенциалами межчастичного взаимодействия. Действительно, в модели (1), отвечающей однородному потенциалу степени  $m$ , можно ввести нелинейные нормальные моды Розенберга [22], что фактически является следствием разделения пространственных и временной переменных. Для каждой такой моды все динамические переменные в любой момент времени  $t$  пропорциональны *одной и той же* функции  $f(t)$

$$q_{ij}(t) = k_{ij} f(t), \quad (4)$$

где  $k_{ij}$  – постоянные коэффициенты,  $i = 1..N$ ,  $j = 1..N$ .

Учитывая уравнение (4), найдем пространственный *профиль*  $\vec{k}$  данной нелинейной нормальной моды (ННМ), которая задается набором коэффициентов  $k_{ij}$ . Построение такого профиля сводится к решению некоторой системы нелинейных алгебраических уравнений, получаемых подстановкой выражений (4) в исходную систему динамических уравнений (1), а временная зависимость  $f(t)$  ННМ определяется так называемым «ведущим» дифференциальным уравнением. Применение аппарата ННМ Розенберга для построения дискретных бризеров и анализа их устойчивости в одномерных цепочках подробно описано в [23–25]. В настоящей работе этот аппарат используется для исследования дискретных бризеров в скалярной модели на плоской квадратной решетке.

Рассмотрим процедуру построения дискретного бризера для приведенного на рис. 2 многообразия  $Q_{3 \times 3}^{(1)}$ . Этому многообразию отвечают три независимые динамические переменные, а соответствующая ННМ Розенберга  $R(t)$  может быть записана в форме

$$R(t) = \begin{pmatrix} c & b & c \\ b & a & b \\ c & b & c \end{pmatrix} f(t), \quad (5)$$

где параметры  $a, b, c$  не зависят от  $t$  (совокупность этих параметров определяет пространственный профиль искомого дискретного бризера). Один из указанных па-

раметров может быть фиксирован произвольным образом. В дальнейшем поэтому будем полагать  $a = 1$ . Действительно, можно показать, что при различных его значениях получается однопараметрическое семейство ДБ с пропорциональными профилями. Подставляя выражение (5) в исходную систему (1) и требуя эквивалентности друг другу всех дифференциальных уравнений, получим два нелинейных алгебраических уравнения

$$\begin{aligned} b [-\gamma + 4(b-1)^{m-1}] &= -\gamma b^{m-1} + 2(c-b)^{m-1} + (1-b)^{m-1}, \\ c [-\gamma + 4(b-1)^{m-1}] &= -\gamma c^{m-1} + 2(b-c)^{m-1}. \end{aligned} \quad (6)$$

Ведущее дифференциальное уравнение принимает следующий вид:

$$\ddot{f}(t) + [\gamma - 4(b-1)^{m-1}] f(t)^{m-1} = 0. \quad (7)$$

Поскольку дискретный бризер является локализованным в пространстве динамическим объектом, амплитуды колебаний частиц решетки должны убывать (наиболее часто экспоненциально) от его центра к периферии:  $|a| > |b| > |c|$ .

Для решения системы нелинейных алгебраических уравнений типа (6) использовались стандартные средства математического пакета MAPLE. С их помощью были построены профили дискретных бризеров на всех инвариантных многообразиях, приведенных на рис. 2, для разных степеней  $m$  однородного потенциала и различных значений параметра  $\gamma$ , который определяет относительную силу онсайтовой и интерсайтовой частей потенциальной энергии рассматриваемой динамической системы.

В качестве примера на рис. 4, а приведены для  $m = 8$  профили дискретных бризеров на инвариантных многообразиях  $Q^{(1)}$ ,  $Q^{(2)}$ ,  $Q^{(4)}$ , которые отвечают группам симметрии  $C_{4v} = \{90^\circ, \sigma_y\}$ ,  $C_{2v} = \{180^\circ, \sigma_y\}$  и  $\{\sigma_y\}$ , соответственно ( $\sigma_y$  – плоскость отражения, перпендикулярная оси  $Y$ ).  $Q^{(2)}$  и  $Q^{(1)}$  являются подмногообразиями многообразия  $Q^{(4)}$ . Действительно,  $Q^{(2)}$  получается из  $Q^{(4)}$  при условии  $e = f$ ,  $c = d$ , а многообразие  $Q^{(1)}$  получается из  $Q^{(2)}$  при условии  $c = b$  (см. рис. 2).

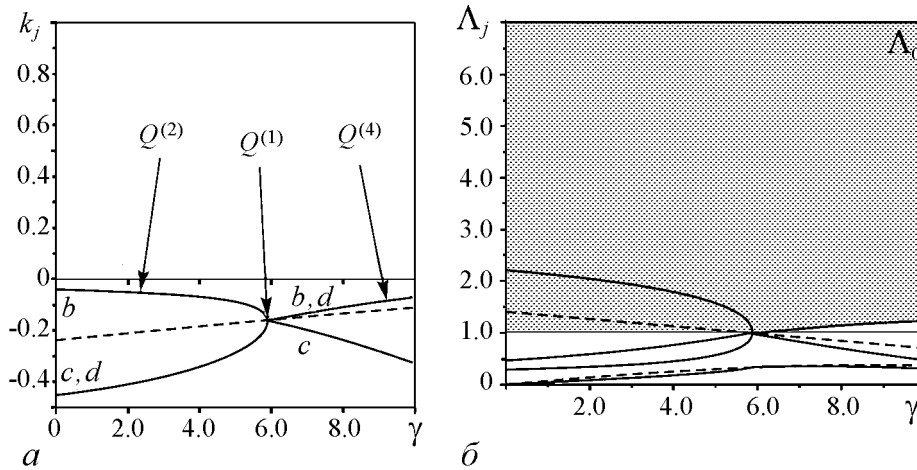


Рис. 4. ДБ на многообразиях  $Q^{(2)}$ ,  $Q^{(4)}$  и  $Q^{(1)}$ : а) зависимость профиля от  $\gamma$ ; б) зависимость показателей устойчивости  $\Lambda_j$  от  $\gamma$

При  $\gamma = \gamma_{\text{кр}} = 5.8848$  дискретные бризеры на всех вышеуказанных многообразиях сливаются. При  $\gamma < \gamma_{\text{кр}}$  найдено бризерное решение, соответствующее многообразию  $Q^{(2)}$ , а при  $\gamma > \gamma_{\text{кр}}$  получен ДБ, отвечающий многообразию  $Q^{(4)}$ . Более того, при одном и том же значении  $\gamma$  могут существовать бризерные решения разной симметрии. На рис. 4 этот факт иллюстрируется тем, что при любых значениях  $\gamma \in [0; 10]$  можно получить, по крайней мере, два различных ДБ, один из которых представляет собой бризер с симметрией  $C_{4v}$  (при  $\gamma < \gamma_{\text{кр}}$  одновременно с ним существует ДБ с симметрией  $C_{2v}$ , а при  $\gamma > \gamma_{\text{кр}}$  – ДБ с симметрией  $\sigma_y$ ).

На рис. 4 вся информация, относящаяся к ДБ с симметрией  $C_{4v}$ , изображена штриховой линией, в частности, на рис. 4, а штриховой линией представлена функция  $b = b(\gamma)$  многообразия  $Q_{3 \times 3}^{(1)}$  (функция  $c = c(\gamma)$  не видна в силу своей малости).

### 3. Устойчивость дискретных бризеров в скалярной модели с однородным потенциалом

Поскольку ДБ представляет собой периодический колебательный режим, для исследования его устойчивости по линейному приближению можно воспользоваться теорией Флоке. В случае скалярной модели на плоской квадратной решетке с однородным потенциалом межчастичного взаимодействия анализ устойчивости периодических режимов, являющихся *нелинейными нормальными модами Розенберга*, можно существенным образом упростить. Это было продемонстрировано на примере одномерных цепочек с однородным потенциалом четвертой степени в статьях [23–25]. В настоящей работе этот же подход применяется для анализа устойчивости ДБ в двумерной решетке для случая потенциала, представляющего собой однородную функцию произвольной четной степени  $m$ .

Задавая ДБ в форме локализованной НМ Розенберга (4) и линеаризуя в ее окрестности исходные динамические уравнения (1), получим некоторую систему линейных дифференциальных уравнений с периодическими коэффициентами. Исследование устойчивости ДБ теперь сводится к анализу устойчивости нулевого решения полученной линеаризованной системы уравнений. Эту систему в анализируемом случае можно записать в форме

$$\ddot{\vec{\delta}} = (m - 1) f^{m-2} \mathbf{B} \vec{\delta} \quad (8)$$

(вычислительные детали см. в работах [23–25]). Здесь  $\vec{\delta}$  – инфинитезимальный вектор, характеризующий отклонения из положений равновесия всех частиц рассматриваемого фрагмента решетки;  $\mathbf{B}$  – постоянная матрица, количество строк и столбцов которой равно числу узлов фрагмента;  $f(t)$  – периодическая функция времени, являющаяся решением ведущего уравнения для моды Розенберга. В случае однородного потенциала степени  $m$  функция  $f(t)$  является решением уравнения

$$\ddot{f}(t) + p^2 f(t)^{m-1} = 0 \quad (9)$$

с начальными условиями  $f(0) = A$ ,  $\dot{f}(0) = 0$ , где  $A$  – амплитуда ДБ, а коэффициент  $p(\vec{k})$  определенным образом зависит от профиля ДБ (см., например, уравнение (7)).

Как и в работах [23–25], можно воспользоваться специфической структурой линеаризованной системы уравнений (8) и с помощью преобразования  $\mathbf{S}^T \mathbf{B} \mathbf{S} = \mathbf{D}$



привести симметричную матрицу  $\mathbf{B}$  к диагональному виду  $\mathbf{D}$ , где  $\mathbf{S}$  – некоторая ортогональная матрица. Столбцы последней являются собственными векторами матрицы  $\mathbf{B}$ , которые легко найти с помощью пакета MAPLE. Собственные значения  $\lambda_k$  матрицы  $\mathbf{B}$  равны диагональным элементам матрицы  $\mathbf{D}$ .

Введение нового инфинитезимального вектора  $\vec{z}$  с помощью преобразования  $\vec{\delta} = \mathbf{S}\vec{z}$  позволяет расщепить систему дифференциальных уравнений (8) на *независимые скалярные уравнения* одного и того же вида

$$\ddot{z} = (m - 1)\lambda_k f(t)^{m-2} z. \quad (10)$$

Проводя в ведущем уравнении (9) и в линеаризованных уравнениях (10) масштабирование функции  $f(t)$  и ее аргумента  $t$  в соответствии с формулами

$$f(t) = A\varphi(t), \quad t = \frac{\tau}{pA^{m/2-1}}, \quad (11)$$

где  $A$  – амплитуда НМ Розенберга, а  $p = p(\vec{k})$ , получим следующие уравнения:

$$\varphi''_{\tau} + \varphi^{m-1}(\tau) = 0, \quad \varphi(0) = 1, \quad \varphi'_{\tau}(0) = 0 \quad (12)$$

$$z''_{\tau} = f^{m-2} \Lambda_k z, \quad z(0) = 0, \quad z'_{\tau}(0) = 0. \quad (13)$$

(Два последних соотношения отвечают тому условию, что исследуется устойчивость нулевого решения линеаризованных уравнений.)

Параметры  $\Lambda_k = ((m - 1)\lambda_k)/p^2$  в дальнейшем будем называть *показателями устойчивости*. Бризерное решение является линейно устойчивым, если все показатели  $\Lambda_k$  лежат внутри интервалов устойчивости нулевого решения уравнения (13). Заметим, что один из показателей,  $\Lambda_0$ , всегда лежит точно на границе между первой зоной неустойчивости и второй зоной устойчивости. Соответствующий ему инфинитезимальный вектор направлен в пространстве всех возможных атомных смещений вдоль профиля ДБ и, следовательно, не влияет на его устойчивость.

Исследование устойчивости нулевого решения уравнения (10) в случае  $m = 4$  сводится к анализу уравнения Лямэ (см. [23–25]), а для  $m > 4$  является гораздо более сложной процедурой, но она также может быть выполнена с помощью некоторых аналитических методов [26]. С другой стороны, такую процедуру можно относительно просто осуществить *численными* методами. В результате применения последних было установлено, что дискретные бризеры являются линейно устойчивыми, если все показатели  $\Lambda_j$  попадают внутрь интервалов

$$[0, 1]; [m - 1, m + 2], [3m - 2, 3m + 3], \dots \quad (14)$$

На рис. 4, б приведены графики показателей устойчивости  $\Lambda_j(\gamma)$  для ДБ, профили которых представлены на рис. 4, а и проанализированы в предыдущем разделе настоящей работы. Из этого рисунка видно, что бризеры с симметрией  $C_{2v}$  и  $\sigma_y$  являются неустойчивыми на всем интервале  $\gamma \in [0; 10]$ , поскольку некоторые из соответствующих им показателей  $\Lambda_j(\gamma)$  попадают в первую зону неустойчивости (эта зона на рис. 4, б показана серым цветом). С другой стороны, бризер с симметрией  $C_{4v}$ , будучи неустойчивым при  $\gamma < \gamma_{кр}$ , становится устойчивым динамическим объектом при  $\gamma > \gamma_{кр}$ .

Особо следует подчеркнуть, что устойчивость ДБ в скалярной модели с однородным потенциалом произвольной степени  $m$  не зависит от его амплитуды, что очевидно из уравнений (12), (13), поскольку амплитуда  $A$  не входит в эти уравнения. Заметим, что в общем случае устойчивость ДБ может существенным образом зависеть от их амплитуды.

На рис. 2 представлено 7 различных инвариантных многообразий, каждому из которых отвечает своя точечная группа. Однако для модели (1) с однородным потенциалом степени  $m = 4, 6, 8$  удалось построить ДБ только на четырех их вышеуказанных многообразиях. Причина этого заключается в очень сильной локализации бризерных решений для потенциалов такого рода. Действительно, например, из рис. 2 видно, что многообразия  $Q_{3 \times 3}^{(2)}$  и  $Q_{3 \times 3}^{(6)}$  отличаются друг от друга только амплитудами периферийных частиц:  $Q_{3 \times 3}^{(6)}$  переходит в  $Q_{3 \times 3}^{(2)}$  при условии  $e = d$ . При построении дискретных бризеров для модели (1) эти амплитуды оказываются слишком малыми и их различие находится на пределе точности используемых нами численных методов. По этой причине в таблице приведены результаты исследования существования и устойчивости ДБ в модели (1) только для четырех из семи возможных инвариантных многообразий. Разумеется, для других скалярных моделей на квадратной решетке могут существовать весьма различные между собой ДБ на *всех* симметрично обусловленных инвариантных многообразиях, приведенных на рис. 2.

В таблице для скалярной модели (1) на плоской квадратной решетке, описываемой однородным потенциалом степени  $m = 4, 6, 8$ , представлены области существования и устойчивости по параметру  $\gamma$  дискретных бризеров на четырех инвариантных многообразиях. Прочерки для многообразий  $Q^{(2)}, Q^{(3)}, Q^{(4)}$  при  $m = 4$  означают, что попытка построить на них бризерные решения автоматически приводит к таким *дополнительным соотношениям* между динамическими переменными, которые соответствуют многообразию  $Q^{(1)}$ .

Аналогично, указание ограниченного по параметру  $\gamma$  интервала существования дискретных бризеров  $\gamma \in [0, \gamma_{кр}]$  (например,  $\gamma \in [0; 0.0476]$ ) означает, что при  $\gamma > \gamma_{кр}$  не удастся построить эти динамические объекты, соответствующие симметрии данного многообразия. Попытка такого построения опять-таки приводит к бризерным решениям, соответствующим инвариантному многообразию  $Q^{(1)}$  с его более высокой симметрией  $C_{4v}$ .

Таблица

Существование и устойчивость дискретных бризеров, построенных на инвариантных многообразиях скалярной модели (1) для однородного потенциала разных степеней  $m$

		Инвариантные многообразия			
		$Q^{(1)}$	$Q^{(2)}$	$Q^{(3)}$	$Q^{(4)}$
m=4	существование	$[0; \infty)$	–	–	–
	устойчивость	$[0; \infty)$	–	–	–
m=6	существование	$[0; \infty)$	$[0; 0.0476]$	$[0; 0.0476]$	$[0; 3.8716]$
	устойчивость	$[0; \infty)$	неуст.	неуст.	неуст.
m=8	существование	$[0; \infty)$	$[0; 5.8848]$	$[0; 5.8848]$	$[0; 17.9037]$
	устойчивость	$[5.8848; \infty)$	неуст.	неуст.	неуст.

#### 4. Дискретные бризеры в скалярных моделях с неоднородными потенциалами

Обсуждаемая в предыдущих разделах работы модель (1), соответствующая однородному потенциалу степени  $m$ , является весьма специфической. Наиболее характерная ее особенность заключается в отсутствии фононного спектра. Действительно, для такой модели нельзя построить гармоническое приближение, поскольку разложение потенциальной энергии в многомерный ряд Тейлора начинается с членов, степени которых превышают 2.

В более же реалистических моделях, которые допускают гармоническое приближение, не существует локализованных ННМ Розенберга, в силу чего для построения ДБ в таких моделях требуется применение методов, отличных от описанных ранее. Наиболее часто для этой цели в работах разных авторов используется в той или иной форме метод Ньютона [1]. Однако на этом пути могут возникнуть существенные трудности, связанные с его сходимостью в многомерном пространстве  $L$  всех возможных начальных условий для исходных динамических переменных, описывающих бризерное решение. Поэтому для построения ДБ в тех случаях, когда нельзя воспользоваться аппаратом мод Розенберга, в настоящей работе применялся некоторый вариант метода *спуска* в вышеуказанном пространстве  $L$ . При этом минимизировалась сумма квадратов расхождений всех динамических переменных при  $t = 0$  и при  $t = T$ , где  $T$  – некоторый произвольно фиксированный период бризерного решения. В ряде случаев для задания начального приближения в методе спуска использовался в «ручном режиме» метод парной синхронизации [24]. Применение такого подхода позволяет построить ДБ на представленных на рис. 2 инвариантных многообразиях для скалярных моделей, описываемых *любыми* потенциалами межчастичного взаимодействия. Сюрпризом оказалось, что даже для моделей с однородными потенциалами, для которых во всех известных нам работах построение бризеров основано на методе разделения переменных (а следовательно, на возможности применения аппарата ННМ Розенберга), можно найти бризерные решения, которые *не являются* модами Розенберга.

Пример такого бризера с периодом  $T = 2$  на инвариантном многообразии  $Q_{5 \times 5}^{(1)}$  для модели (1) при  $m = 4$ ,  $\gamma = 1$  приведен на рис. 5. На этом рисунке изображена временная эволюция динамических переменных  $a(t)$ ,  $b(t)$ ,  $c(t)$ ,  $d(t)$ ,

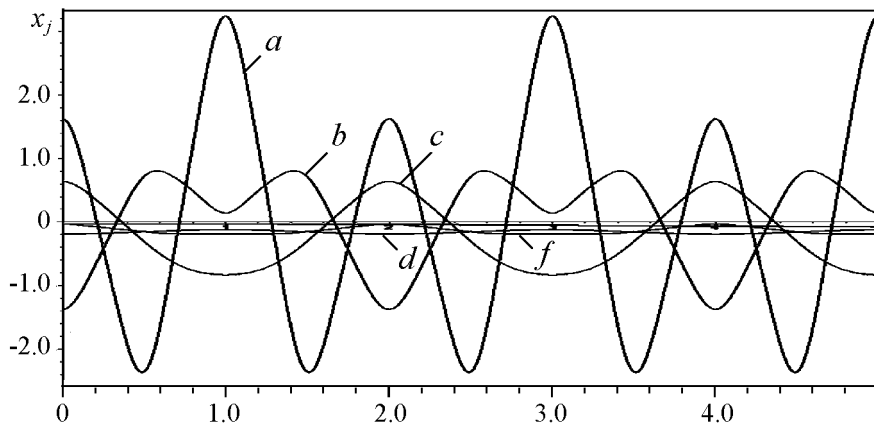


Рис. 5. Нетривиальный дискретный бризер в модели (1) с однородным потенциалом степени  $m = 4$ , при  $\gamma = 1$ , который не является модой Розенберга

которые соответствуют указанному многообразию (две другие переменные не видны в силу малости их амплитуд). Приведенный ДБ не является модой Розенберга уже хотя бы потому, что разные динамические переменные проходят через нуль в разные моменты времени, что противоречит уравнениям (4). Из рис. 5 видно, что полученный ДБ является достаточно хорошо локализованным. Более того, непосредственное интегрирование на больших временах, как и метод Флоке, свидетельствуют о его *устойчивости*. В силу нетривиальности ДБ, изображенного на рис. 5, приведем набор начальных условий для его построения:  $a(0) = 1.6208$ ,  $b(0) = -1.3718$ ,  $c(0) = 0.6325$ ,  $d(0) = -0.0370$ ,  $e(0) = -0.1928$ ,  $f(0) = -0.0354$  (начальные скорости всех динамических переменных имеют нулевые значения).

Для той же модели и того же самого инвариантного многообразия  $Q_{5 \times 5}^{(1)}$  можно найти ДБ, который *является* НМ Розенберга и имеет тот же самый период  $T = 2$ . Он был также построен с помощью метода спуска, исходя из других начальных условий:  $a(0) = 1.2820$ ,  $b(0) = -0.2894$ ,  $c(0) = 0.0036$ ,  $d(0) = 0.0017$ ,  $e(0) = -1.17 \cdot 10^{-6}$ ,  $f(0) = -3.36 \cdot 10^{-16}$ .

Дискретные бризеры, подобные изображенному на рис. 5, были обнаружены и для ряда других моделей, например, для системы (2), которая представляет собой набор расположенных в узлах квадратной решетки и линейно взаимодействующих друг с другом осцилляторов Дуффинга.

### Заключение

В настоящей работе исследуются выделенные по симметрии инвариантные многообразия для скалярных моделей на плоской квадратной решетке, на которых могут реализовываться *локализованные* колебания (как периодические, так и непериодические). В силу ограниченного объема данной публикации, на рис. 2 приведены лишь те многообразия, которые отвечают правильным системам точек первого типа (см. рис. 1), а все другие будут обсуждены в дальнейшем.

Для двух типов моделей (1) и (2) были исследованы дискретные бризеры, соответствующие приведенным на рис. 2 многообразиям. В модели (1) с однородным потенциалом степени  $m = 4, 6, 8$  найдены ДБ, которые в этом случае представляют собой локализованные нелинейные нормальные моды Розенберга. Для всех таких бризеров исследована их устойчивость по отношению к параметру  $\gamma$ , который характеризует силу онсайтовой части потенциала по отношению к его интерсайтовой части. Отметим отличие полученных результатов от представленных в работе [5]. Во-первых, там найдены не все типы дискретных бризеров, реализующихся на полном комплекте инвариантных многообразий трех возможных в квадратной решетке ПСТ (см. рис. 1). Во-вторых, в статье [5] учитывалась только интерсайтовая часть однородных потенциалов, а также не была исследована устойчивость получаемых автором бризерных решений.

Во всех известных работах, в которых рассматриваются ДБ для моделей с *однородными* потенциалами, представлены лишь бризеры, являющиеся модами Розенберга, поскольку они находятся методом разделения переменных. Поэтому неожиданностью было обнаружение в таких моделях бризеров, которые *не являются* таковыми модами. Более того, они могут сосуществовать с локализованными модами Розенберга при одних и тех же параметрах модели (1) и обладать одинаковыми с ними периодами.

Для модели линейно связанных осцилляторов Дуффинга (2) с помощью метода спуска оказалось возможным найти как «обычные» ДБ, для которых характерно одновременное прохождение всеми частицами через положение равновесия, так и «нетривиальные» бризеры, для которых это свойство не имеет места.

В отличие от работ других авторов, в настоящем исследовании был использован теоретико-групповой подход для предварительного поиска симметрично обусловленных инвариантных многообразий в скалярных моделях на плоской квадратной решетке. Нахождение таких многообразий позволяет существенным образом сократить число динамических переменных, соответствующих искомым дискретным бризерам. Вышеуказанный теоретико-групповой подход является общим и может быть применен не только к любым скалярным моделям на квадратной решетке (или на двумерных и трехмерных периодических структурах других типов), но и к разнообразным векторным решеточным моделям.

*Авторы выражают благодарность Ю.В. Михлину за ряд советов, касающихся исследования устойчивости ННМ. Г.С. Безуглова выражает глубокую признательность Фонду некоммерческих программ «Династия» за финансовую поддержку.*

#### **Библиографический список**

1. *Aubry S.* Breathers in nonlinear lattices: existence, linear stability and quantization // *Physica D.* 1997. Vol. 103. P. 201.
2. *Flach S., Willis C.R.* Discrete breathers // *Physics Reports.* 1997. Vol. 295. P. 181.
3. *Aubry S.* Discrete breathers: Localization and transfer of energy in discrete Hamiltonian nonlinear systems // *Physica D.* 2006. Vol. 216. P. 1.
4. *Flach S., Gorbach A.* Discrete breathers: Advances in theory and applications // *Physics Reports.* 2007. Vol. 467. P. 1.
5. *Fischer F.* Self-localized single-anharmonic vibrational modes in two-dimensional lattices // *Ann. Physik.* 1993. Vol. 2. P. 296.
6. *Flach F., Kladko K., Willis C.R.* Acoustic breathers in two-dimensional lattices // *Phys. Rev. Lett.* 1997 Vol. 78. P. 1207.
7. *Kiselev S.A., Sievers A.J.* Generation of intrinsic vibrational gap modes in three-dimensional ionic crystals // *Phys. Rev. B.* 1997. Vol. 55. P. 5755.
8. *Kevrekidis P.G., Rasmussen K.O., Bishop A.R.* Two-dimensional discrete breathers: Construction, stability, and bifurcations // *Phys. Rev. E.* 2000. Vol. 61. P. 2006.
9. *Doi Y., Nakatani A.* Structures of discrete breathers in two-dimensional Fermi–Pasta–Ulam lattices // *Theor. Appl. Mech. Jpn.* 2006. Vol. 55 P. 103.
10. *Butt I.A., Wattis J.A.D.* Discrete breathers in a two-dimensional Fermi–Pasta–Ulam lattice // *J. Phys. A. Math. Gen.* 2006. Vol. 39. P. 4955.
11. *Butt I.A., Wattis J.A.D.* Discrete breathers in a two-dimensional hexagonal Fermi–Pasta–Ulam lattice // *J. Phys. A. Math. Gen.* 2006. Vol. 40. P. 1239.
12. *Feng B.F., Kawahara T.* Discrete breathers in two-dimensional nonlinear lattices // *Wave Motion.* 2007. Vol. 45. P. 68.
13. *Xu Q., Qiang T.* Two-dimensional discrete gap breathers in a two-dimensional discrete diatomic Klein–Gordon lattice // *Chin. Phys. Lett.* 2009 Vol. 26. P. 070501.

14. *Yi X., Wattis J.A.D., Susanto H., Cummings L.J.* Discrete breathers in a two-dimensional spring-mass lattice // *J. Phys. A. Math. Theor.* 2009. Vol. 42. P. 355207.
15. *Дмитриев С.В., Хадеева Л.З., Пиеничнюк А.И., Медведев Н.Н.* Щелевые дискретные бризеры в двухкомпонентном трехмерном и двумерном кристаллах с межатомными потенциалами Морзе // *Физика твердого тела.* 2010. Т. 52. С. 1398.
16. *Koukouloyannis V., Kevrekidis P.G., Law K.J.H., Kourakis I., Frantzeskakis D.J.* Existence and stability of multisite breathers in honeycomb and hexagonal lattices // *J. Phys. A. Math. Theor.* 2010. Vol. 43. P. 235101.
17. *Сахненко В.П., Чечин Г.М.* Симметричные правила отбора в нелинейной динамике атомных систем // *ДАН.* 1993. Т. 330. С. 308.
18. *Chechin G. M., Sakhnenko V. P.* Interactions between normal modes in nonlinear dynamical systems with discrete symmetry. Exact results // *Physica D.* 1998. Vol. 117. P. 43.
19. *Chechin G.M., Ryabov D.S., Sakhnenko V.P.* Bushes of normal modes as exact excitations in nonlinear dynamical systems with discrete symmetry // *Nonlinear phenomena research perspectives / Ed. by C. W. Wang.* Nova Science Publishers, NY, 2007. P. 225.
20. *Бокий Г.Б.* Кристаллохимия. М.: Изд-во МГУ, 1960. 357 с.
21. *Chechin G.M.* Computers and group-theoretical methods for studying structural phase transitions // *Comput. Math. Applic.* 1989. Vol. 17. P. 255.
22. *Rosenberg R.M.* On nonlinear vibrations of systems with many degrees of freedom // *Adv. Appl. Mech.* 1966. Vol. 9. P. 155.
23. *Chechin G.M., Dzhelauhova G.S., Mehonoshina E.A.* Quasibreathers as a generalization of the concept of discrete breathers // *Phys. Rev. E.* 2006. Vol. 74. P. 36608.
24. *Гончаров П.П., Джелаухова Г.С., Чечин Г.М.* Дискретные бризеры в нелинейных моноатомных цепочках // *Изв. вузов. Прикладная нелинейная динамика.* 2007. Т. 6. С. 57.
25. *Chechin G.M., Dzhelauhova G.S.* Discrete breathers and nonlinear normal modes in monoatomic chains // *Journal of Sound and Vibration.* 2009. Vol. 322. P. 490.
26. *Аврамов К.В., Михлин Ю.В.* Нелинейная динамика упругих систем. Модели, методы, явления. Том 1. Ижевск: РХД, 2010. 704 с.

*Южный Федеральный  
университет, Ростов-на-Дону*

*Поступила в редакцию 29.12.2010  
После доработки 14.05.2011*

## **DISCRETE BREATHERS IN SCALAR DYNAMICAL MODELS ON THE PLANE SQUARE LATTICE**

*G.S. Bezuglova, P.P. Goncharov, Y.V. Gurov, G.M. Chechin*

All symmetry related invariant manifolds, admitting localized vibrations, for dynamical models on plane square lattice were found by group-theoretical methods. Discrete breathers were constructed on these manifolds for the model with homogeneous potentials of interparticle interactions and their stability was studied. Nontrivial breather solutions

which are not nonlinear normal modes by Rosenberg have been revealed for the above model despite it admits space-time separation of dynamical variables. Discrete breathers of the same type were also found in the system of linear coupled Duffing oscillators situated in sites of square lattice. Our approach for studying discrete breathers can be spread to different two- and three-dimensional space-periodic dynamical models.

*Keywords:* Nonlinear dynamics, lattice models, discrete breathers, invariant manifolds, group-theoretical methods.



*Безуглова (Джелаухова) Галина Сергеевна* – родилась в Ростове-на-Дону в 1985 году. Аспирантка физического факультета Южного федерального университета. Стипендиат Фонда некоммерческих программ «Династия». Область научных интересов – нелинейная динамика, теоретико-групповые методы в физике, вычислительная физика.

344090 Ростов-на-Дону, ул. Р. Зорге, 5  
Южный федеральный университет  
E-mail: djel@rambler.ru



*Гончаров Петр Петрович* – родился в Донецке Ростовской области в 1986 году. В настоящее время – аспирант физического факультета Южного федерального университета. Специализируется на кафедре теоретической и вычислительной физики. Область научных интересов – нелинейная динамика и вычислительная физика.

344090 Ростов-на-Дону, ул. Р. Зорге, 5  
Южный федеральный университет  
E-mail: petro\_zzz@rambler.ru



*Гуров Юрий Владимирович* – родился в 1985 году. Окончил физический факультет Южного федерального университета (бывший Ростовский государственный университет) (2007). В настоящее время является аспирантом НИИ физики Южного Федерального Университета. Область научных интересов – нелинейная динамика, хаос и хронобиология.

344090 Ростов-на-Дону, ул. Р. Зорге, 5  
Южный федеральный университет  
E-mail: noisegen@mail.ru



*Ччин Георгий Михайлович* – родился в Новочеркасске (1937), окончил РГУ (1960), кандидат физико-математических наук, доцент кафедры теоретической и вычислительной физики Южного федерального университета. Научный руководитель студенческой «Лаборатории нелинейной кристаллофизики» при НИИ физики ЮФУ, Соросовский доцент. Читает лекции по численным методам, вычислительной и нелинейной физике, теории групп. Область научных интересов - теоретико-групповые методы в физике, теория фазовых переходов, нелинейная динамика и вычислительная физика. Автор более 100 научных публикаций.

344090 Ростов-на-Дону, ул. Р. Зорге, 5  
Южный федеральный университет  
E-mail: gchchin@gmail.com