

ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНТСТВО ПО ОБРАЗОВАНИЮ
Федеральное государственное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«ЮЖНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Г. М. Чечин, Г. С. Безуглова

Учебно-методическое пособие

Дискретные бризеры в скалярных моделях на двумерной квадратной решетке

по предмету «Нелинейная динамика»
для студентов магистратуры физического факультета

г. Ростов-на-Дону
2013 г.

Аннотация

Дискретные бризеры представляют собой локализованные в пространстве и периодические во времени колебания, которые могут существовать в нелинейных системах различной физической природы, определенных на одномерных, двумерных и трехмерных решетках. Изучению этих динамических объектов в настоящее время посвящено огромное число теоретических и экспериментальных работ (см. обзорные статьи [1, 2]). В методических указаниях [3] приведен некоторый обзор конкретных физических систем, в которых были обнаружены дискретные бризеры, а также рассмотрены некоторые общие математические методы их построения и исследования. В методических указаниях [4] подробно рассмотрены дискретные бризеры различного типа в одномерных решетках, изложен оригинальный метод их поиска, имеющий прозрачную физическую интерпретацию. Там же приведено объяснение возможности существования этих динамических объектов, для которых характерна строгая периодичность колебаний частиц решетки, несмотря на существенно различные их амплитуды. В методических указаниях [4] рассмотрены также квазибризеры, которые являются некоторым обобщением понятия дискретного бризера. Настоящее пособие является продолжением методических указаний [3, 4]. Оно рассчитано на студентов магистратуры физического факультета ЮФУ, изучающих курс «Нелинейная динамика».

1 Исследуемые двумерные модели

Мы будем исследовать дискретные бризеры (ДБ) в скалярных динамических моделях на плоской квадратной решетке. В моделях этого типа каждому узлу соответствует *одна скалярная* переменная. Такие модели могут иметь различную физическую интерпретацию. Например, в работе [5] изучаются дискретные бризеры в динамической модели с однородным потенциалом межчастичного взаимодействия, которая описывает поперечные механические колебания квадратной (см. рис. 1) и гексагональной решёток. В статьях [6, 7] исследуются локализованные электрические колебания в системах нелинейных конденсаторов, находящихся в узлах плоских решеток и связанных друг с другом линейными индуктивностями (см. рис. 2).

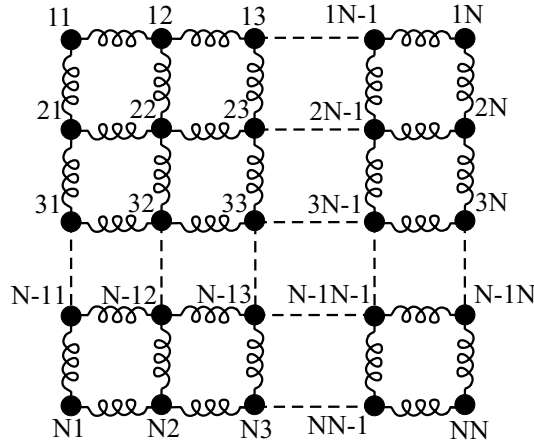


Рис. 1: Механическая модель.

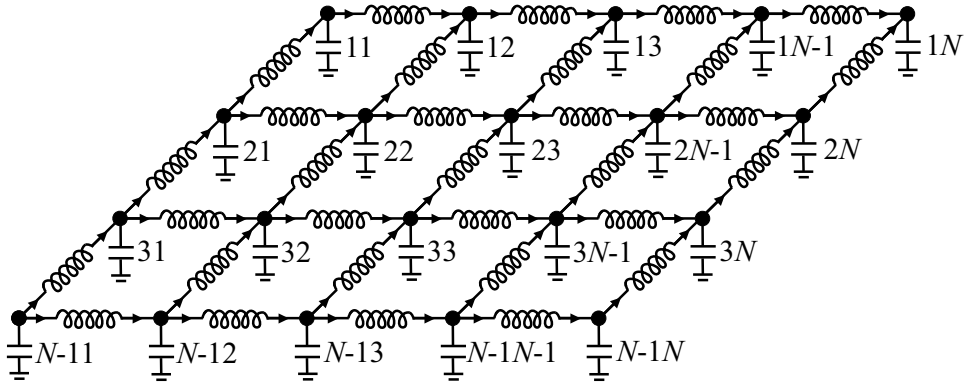


Рис. 2: Электрическая модель.

В настоящих методических указаниях рассмотрены две следующие динамические модели:

Модель 1.

$$\ddot{q}_{i,j} + \gamma \cdot q_{i,j}^{m-1} = (q_{i+1,j} - q_{i,j})^{m-1} - (q_{i,j} - q_{i-1,j})^{m-1} + (q_{i,j+1} - q_{i,j})^{m-1} - (q_{i,j} - q_{i,j-1})^{m-1}, \quad (1)$$

Модель 2.

$$\ddot{q}_{i,j} + q_{i,j}^3 = \alpha \cdot (q_{i+1,j} + q_{i-1,j} + q_{i,j+1} + q_{i,j-1} - 4q_{i,j}). \quad (2)$$

Первая модель отвечает однородному потенциалу связи между динамическими переменными $q_{i,j}(t)$, соответствующими ближайшим соседним узлам, и их взаимодействию «с подложкой» (онсайтовый потенциал). Вторая модель описывает систему осцилляторов Дуффинга, находящихся в узлах решетки и линейно взаимодействующих с четырьмя ближайшими соседями. Для обеих моделей предполагается наличие периодических граничных условий

$$q_{N+1,i} \equiv q_{1,i}, \quad q_{i,N+1} \equiv q_{i,1}, \quad q_{0,i} \equiv q_{N,i}, \quad q_{i,0} \equiv q_{i,N}, \quad (i = 1..N), \quad (3)$$

а сами динамические переменные $[q_{i,j}(t), i = 1..M, j = 1..N]$ могут иметь различную физическую интерпретацию.

Описанные ниже методы можно использовать для анализа дискретных бризеров в любых скалярных моделях на плоских решётках. Они также допускают естественное обобщение на случай трехмерных периодических структур, на которых определены различные скалярные и векторные модели. В последних, в отличие от скалярных моделей, каждому узлу решетки отвечают *несколько* динамических переменных.

2 Построение симметрично-обусловленных инвариантных многообразий

В течение двух последних десятилетий в Ростовском государственном университете (ныне ЮФУ) интенсивно развивались теоретико-групповые методы исследования нелинейной динамики систем с дискретной симметрией [8, 9, 10] (см. также и [11]). В указанных работах основным объектом изучения являлись так называемые *буши* (кусты) делокализованных нелинейных нормальных мод. В дальнейшем эти методы были распространены на анализ *локализованных* нелинейных колебаний, представляющих собой дискретные бризеры и квазибризеры.

Первый этап построения ДБ основан на выделении симметрично обусловленных инвариантных многообразий с помощью теоретико-групповых методов, которые были ранее использованы для построения теории бушей нелинейных нормальных мод. 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 скалярных моделей, 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, выберем расширенную группу

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

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, характеризуемые 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. Подчеркнем, что обсуждаемые нами группы описывают симметрию и других скалярных моделей на плоской квадратной решетке, в частности, и тех, в которых радиус межчастичного взаимодействия является произвольным.

Как известно, атомы в кристалле распределяются по *точечным орбитам* соответствующей *пространственной* группы. В кристаллографии набор точек орбиты в пределах одной элементарной ячейки называется «правильной системой точек» (ПСТ). Каждая ПСТ характеризуется своей точечной группой симметрии, которая центрирована определенным образом относительно ячейки кристалла (см., например, [12, 13]).

Для построения дискретных бризеров нам необходимо найти симметрично-обусловленные многообразия, на которых могут реализоваться, *локализованные нелинейные колебания*.

Можно показать, что из всех возможных в плоской квадратной решетке типов ПСТ 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* — группа C_{4v} , локализованная в центре ячейки и *III* — группа C_{2v} , локализованная в центре ребра ячейки. С помощью общепринятых обозначений, они могут быть записаны следующим образом:

$$I: \quad 1a, 4mm (0, 0); \quad (5)$$

$$II: \quad 1b, 4mm \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right); \quad (6)$$

$$III: \quad 2c, mm \left(0, \frac{1}{2}\right). \quad (7)$$

На рисунке 3 приведены ПСТ, соответствующие этим трем случаям. Заметим, что в случае III на элементарную ячейку решетки приходятся *две* точки — «кратность» этой ПСТ равна двум.

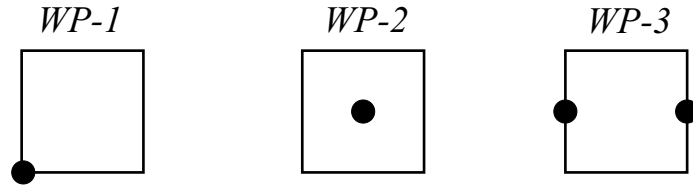


Рис. 3: Правильные системы точек (ПСТ) плоской квадратной решетки, соответствующие возможной локализации дискретных бризеров

ДБ представляет собой локализованный в пространстве колебательный режим, в процессе которого частицы решетки отклоняются из своих положений равновесия, в силу чего симметрия этого динамического объекта должна 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.

В общем случае, динамические уравнения скалярной модели на квадратной решетке могут быть записаны в форме

$$\ddot{\mathbf{Q}}_{M \times N} = \mathbf{F}(\mathbf{Q}_{M \times N}), \quad (8)$$

где матрица

$$\mathbf{Q}_{M \times N} = \begin{pmatrix} q_{11} & q_{12} & \dots & q_{1N} \\ q_{21} & q_{22} & \dots & q_{2N} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ q_{M1} & q_{M2} & \dots & q_{MN} \end{pmatrix} \quad (9)$$

задается множеством переменных $q_{ij} = q_{ij}(t)$, соответствующих фрагменту решетки размером $M \times N$, который в дальнейшем будем называть «паттерном», а матрица \mathbf{F} определяет правые части дифференциальных уравнений рассматриваемой модели.

Найдём все возможными симметрично-обусловленные многообразия, соответствующие подгруппам группы G_0 . Требуя, чтобы паттерн $\mathbf{Q}_{M \times N}$ был инвариантен относительно действия группы симметрии $G \in G_0$, получим дополнительные связи между динамическими переменными $q_{ij}(t)$: некоторые из них становятся равными друг другу, в то время как другие отличаются только знаком. Ниже, записывая явный вид симметрично-обусловленных инвариантных многообразий, будем обозначать идентичные динамические переменные с помощью одинаковых символов $a(t)$, $b(t)$, $c(t)$.

Так как в настоящем пособии рассматриваются только *сильно локализованные* дискретные бризеры, можно ограничиться лишь небольшими фрагментами $\mathbf{Q}_{M \times N}$ каждого инвариантного многообразия. Конкретные значения M и N выбираются исходя из условия, чтобы амплитуды $q_{ij}(t)$ периферийных частиц ДБ были много меньше амплитуд центральных частиц.

Продemonстрируем процедуру нахождения многообразия $\mathbf{Q}_{3 \times 3}^{(1)}$ инвариантного по отношению к точечной группе $G = C_{4v}$.

Эта группа состоит из 8 элементов: четыре из них (g_1, g_2, g_3, g_4) — повороты на углы $0^\circ, 90^\circ, 180^\circ, 270^\circ$ вокруг оси z , перпендикулярной плоскости решётки, а остальные элементы (g_5, g_6, g_7, g_8) — отражения в зеркальных плоскостях, перпендикулярных $3D$ векторам $(1,0,0)$, $(1,1,0)$, $(0,1,0)$, $(-1,1,0)$. Эти четыре отражения обозначим символами $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_{xy}, \sigma_{-xy}$, соответственно.

Вышеперечисленные элементы симметрии, действуя на паттерн

$$\mathbf{Q}_{3 \times 3}^{(1)} = \begin{pmatrix} q_{11} & q_{12} & q_{13} \\ q_{21} & q_{22} & q_{23} \\ q_{31} & q_{32} & q_{33} \end{pmatrix}, \quad (10)$$

переставляют его элементы $q_{ij} \equiv q_{ij}(t)$ некоторым образом. В частности, для элемента g_2 (поворота на 90°) получим выражение

$$\hat{g}_2 \mathbf{Q}_{3 \times 3}^{(1)} = \begin{pmatrix} q_{13} & q_{23} & q_{33} \\ q_{12} & q_{22} & q_{32} \\ q_{11} & q_{21} & q_{31} \end{pmatrix}, \quad (11)$$

а для элемента g_5 (отражение σ_x):

$$\hat{g}_5 \mathbf{Q}_{3 \times 3}^{(1)} = \begin{pmatrix} q_{13} & q_{12} & q_{11} \\ q_{23} & q_{22} & q_{21} \\ q_{33} & q_{32} & q_{31} \end{pmatrix}. \quad (12)$$

Заметим, что элементы симметрии g_2 и g_5 являются *генераторами* группы $G = C_{4v}$: все остальные её элементы могут быть выражены в виде различных произведений этих двух генераторов. Из условия инвариантности паттерна $\mathbf{Q}_{3 \times 3}^{(1)}$ относительно группы C_{4v} имеем

$$\hat{g}_2 \mathbf{Q}_{3 \times 3}^{(1)} = \mathbf{Q}_{3 \times 3}^{(1)}, \quad (13)$$

$$\hat{g}_5 \mathbf{Q}_{3 \times 3}^{(1)} = \mathbf{Q}_{3 \times 3}^{(1)}. \quad (14)$$

Из уравнений (11), (12), (13) и (14) находим:

$$\begin{aligned} q_{12} &= q_{21} = q_{32} = q_{23} = b(t), \\ q_{11} &= q_{31} = q_{33} = q_{13} = c(t), \\ q_{22} &= a(t). \end{aligned}$$

Здесь произведена замена девяти «старых» переменных $q_{ij}(t)$, $i = 1..3$, $j = 1..3$ тремя «новыми» $a(t)$, $b(t)$ и $c(t)$. В результате приходим к следующему фрагменту многообразия $\mathbf{Q}_{3 \times 3}^{(1)}$, инвариантному по отношению к группе симметрии $G = C_{4v}$:

$$\mathbf{Q}_{3 \times 3}^{(1)} = \begin{pmatrix} c & b & c \\ b & a & b \\ c & b & c \end{pmatrix} \quad (15)$$

Заметим, что уравнение (14) не вносит никаких дополнительных ограничений на динамические переменные по сравнению с (13), т.е. инвариантное многообразие (15) на самом деле определяется только уравнением (13). Это означает, что полученное выше многообразие $\mathbf{Q}_{3 \times 3}^{(1)}$ оказывается инвариантным не только по отношению к группе $C_4 = \{C_4\}$ с одним генератором g_2 , представляющем собой вращение на 90° , но одновременно и по отношению к группе $C_{4v} = \{C_4, \sigma_x\}$ с двумя генераторами — g_2 и g_5 . (Здесь и далее генераторы, определяющие любую группу симметрии, приведены в фигурных скобках).

Заметим, если мы рассмотрим бóльший фрагмент квадратной решетки, например, паттерн $\mathbf{Q}_{5 \times 5}^{(1)}$, уравнение (14) приведёт к появлению таких ограничений на переменные q_{ij} , что инвариантные многообразия, соответствующие группам $C_4 = \{C_4\}$ и $C_{4v} = \{C_4, \sigma_x\}$, становятся различными (см. $\mathbf{Q}^{(1)}$ и $\mathbf{Q}^{(2)}$ в таблице 1).

Среди подгрупп группы симметрии G_0 , есть такие, которым соответствуют инвариантные многообразия, допускающие существование как локализованных, так и

делокализованных динамических объектов. Например, многообразие (15) позволяет построить локализованный периодический или квазипериодический режим (если $|a| \gg |b| \gg |c|$), в то время как многообразие

$$\begin{pmatrix} b & a & c \\ b & a & c \\ b & a & c \end{pmatrix} \quad (16)$$

не допускает локализации в Y -направлении.

Заметим, что некоторым инвариантным многообразиям могут соответствовать *мультибризеры* сложной структуры, например, с нулевой амплитудой в центре бризера. В таблице 1 приведены все инвариантные многообразия связанные с подгруппами группы симметрии G_0 , которые допускают существование *простых* дискретных бризеров — они локализованы в обоих X -и Y -направлениях, а центральная частица имеет ненулевую амплитуду.

Тем не менее, в конце каждого раздела, соответствующего различным ПСТ в таблице 1, указан список остальных подгрупп, связанных с этой правильной системой точек. Такая информация может быть использована для построения всех типов инвариантных многообразий. В случае необходимости, знание группы симметрии данного многообразия легко позволяет выполнить его расширение до необходимых размеров. Заметим, что такое расширение фрагментов необходимо осуществлять в случаях не слишком сильной локализации изучаемых бризеров, т.е. когда амплитуды колебаний частиц, соответствующих периферийным узлам, не являются достаточно малыми по сравнению с амплитудами центральных частиц.

Поскольку мы рассматриваем лишь сильно локализованные дискретные бризеры, возможно ограничиться лишь небольшими фрагментами решетки. Поэтому в таблице 1 приведены лишь паттерны 5×5 инвариантных многообразий $\mathbf{Q}^{(j)}$ ($j = 1..27$), а соответствующие 3×3 фрагменты выделены рамками. Вне пределов этих фрагментов амплитуды динамических переменных q_{ij} имеют практически нулевые значения (тем не менее, при интегрировании дифференциальных уравнений).

Отметим, что многообразия со знаком минус перед некоторыми переменными соответствуют подгруппам, элементы которых содержат оператор \hat{P} (самостоятельно или в сочетании с другими элементами симметрии). Эти многообразия перечислены после многообразий соответствующих группе C_{4v} . Первые соответствуют только моделям с произвольным потенциалом, а вторые — моделям с чётным потенциалом.

Задание: Получить симметрично-обусловленные инвариантные многообразия для ПСТ-1 в виде 3×3 фрагментов квадратной решетки и в виде 2×2 фрагментов для ПСТ-2.

Ответы приведены в таблице 1 внутри соответствующих квадратных рамок.

Таблица 1: Симметрично-обусловленные инвариантные многообразия для скалярных моделей на квадратной решетке.

ПСТ-1			
$\begin{pmatrix} f & e & d & e & f \\ e & \boxed{c & b & c} & e \\ d & b & a & b & d \\ e & \boxed{c & b & c} & e \\ f & e & d & e & f \end{pmatrix}$ $Q^{(1)}: \{C_4, \sigma_y\}$	$\begin{pmatrix} g & e & d & f & g \\ f & \boxed{c & b & c} & e \\ d & b & a & b & d \\ e & \boxed{c & b & c} & f \\ g & f & d & e & g \end{pmatrix}$ $Q^{(2)}: \{C_4\}$	$\begin{pmatrix} h & f & e & g & j \\ f & \boxed{c & b & d} & g \\ e & b & a & b & e \\ g & \boxed{d & b & c} & f \\ j & g & e & f & h \end{pmatrix}$ $Q^{(3)}: \{C_2, \sigma_{xy}\}$	$\begin{pmatrix} m & k & f & e & n \\ h & \boxed{d & b & e} & j \\ g & c & a & c & g \\ j & \boxed{e & b & d} & n \\ n & e & f & k & m \end{pmatrix}$ $Q^{(4)}: \{C_2\}$
$\begin{pmatrix} j & h & e & h & j \\ g & \boxed{d & b & d} & g \\ f & c & a & c & f \\ g & \boxed{d & b & d} & g \\ j & h & e & h & j \end{pmatrix}$ $Q^{(5)}: \{C_2, \sigma_y\}$	$\begin{pmatrix} n & i & g & j & p \\ i & \boxed{d & b & e} & k \\ g & b & a & c & h \\ j & \boxed{e & c & f} & l \\ p & k & h & l & m \end{pmatrix}$ $Q^{(6)}: \{\sigma_{xy}\}$	$\begin{pmatrix} n & j & i & k & p \\ g & \boxed{e & b & f} & m \\ j & c & a & d & h \\ g & \boxed{e & b & f} & m \\ n & j & i & k & p \end{pmatrix}$ $Q^{(7)}: \{\sigma_y\}$	$\{C_4\hat{P}\}, \{C_2\hat{P}\},$ $\{\sigma_y\hat{P}\}, \{\sigma_{xy}\hat{P}\},$ $\{C_4\hat{P}, \sigma_y\}, \{C_4\hat{P}, \sigma_y\hat{P}\},$ $\{C_2, \sigma_y\hat{P}\}, \{C_2, \sigma_{xy}\hat{P}\},$ $\{C_2\hat{P}, \sigma_y\}, \{C_2\hat{P}, \sigma_{xy}\},$ $\{C_4, \sigma_y\hat{P}\}$
ПСТ-2			
$\begin{pmatrix} a & b & b & a \\ b & \boxed{c & c} & b \\ b & \boxed{c & c} & b \\ a & b & b & a \end{pmatrix}$ $Q^{(8)}: \{C_4, \sigma_y\}$	$\begin{pmatrix} a & b & b & a \\ c & \boxed{d & d} & c \\ c & \boxed{d & d} & c \\ a & b & b & a \end{pmatrix}$ $Q^{(9)}: \{C_2, \sigma_y\}$	$\begin{pmatrix} a & b & c & a \\ c & \boxed{d & d} & b \\ b & \boxed{d & d} & c \\ a & c & b & a \end{pmatrix}$ $Q^{(10)}: \{C_4\}$	$\begin{pmatrix} a & b & c & d \\ b & \boxed{e & f} & c \\ c & \boxed{f & e} & b \\ d & c & b & a \end{pmatrix}$ $Q^{(11)}: \{C_2, \sigma_{xy}\}$
$\begin{pmatrix} a & b & c & d \\ e & \boxed{f & g} & h \\ h & \boxed{g & f} & e \\ d & c & b & a \end{pmatrix}$ $Q^{(12)}: \{C_2\}$	$\begin{pmatrix} a & b & c & d \\ b & \boxed{e & f} & g \\ c & \boxed{f & k} & l \\ d & g & l & p \end{pmatrix}$ $Q^{(13)}: \{\sigma_{xy}\}$	$\begin{pmatrix} a & b & c & d \\ e & \boxed{f & g} & h \\ e & \boxed{f & g} & h \\ a & b & c & d \end{pmatrix}$ $Q^{(14)}: \{\sigma_y\}$	$\begin{pmatrix} a & b & -b & -a \\ c & \boxed{d & -d} & -c \\ c & \boxed{d & -d} & -c \\ a & b & -b & -a \end{pmatrix}$ $Q^{(15)}: \{C_2\hat{P}, \sigma_y\}$
$\begin{pmatrix} a & b & c & -a \\ -c & \boxed{d & -d} & -b \\ -b & \boxed{-d & d} & -c \\ -a & c & b & a \end{pmatrix}$ $Q^{(16)}: \{C_4\hat{P}\}$	$\begin{pmatrix} a & b & -b & -a \\ b & \boxed{c & -c} & -b \\ -b & \boxed{-c & c} & b \\ -a & -b & b & a \end{pmatrix}$ $Q^{(17)}: \{C_4\hat{P}, \sigma_y\hat{P}\}$	$\begin{pmatrix} a & b & -b & -a \\ c & \boxed{d & -d} & -c \\ -c & \boxed{-d & d} & c \\ -a & -b & b & a \end{pmatrix}$ $Q^{(18)}: \{C_2, \sigma_y\hat{P}\}$	
$\begin{pmatrix} a & b & c & d \\ e & \boxed{f & g} & h \\ -e & \boxed{-f & -g} & -h \\ -a & -b & -c & -d \end{pmatrix}$ $Q^{(19)}: \{\sigma_y\hat{P}\}$	$\begin{pmatrix} a & b & c & d \\ e & \boxed{f & g} & h \\ -h & \boxed{-g & -f} & -e \\ -d & -c & -b & -a \end{pmatrix}$ $Q^{(20)}: \{C_2\hat{P}\}$	$\{\sigma_{xy}\hat{P}\}, \{C_2, \sigma_{xy}\hat{P}\},$ $\{C_2\hat{P}, \sigma_{xy}\}, \{C_4, \sigma_y\},$ $\{C_4, \sigma_y\hat{P}\}.$	

ΠCT-3

$\begin{pmatrix} a & b & c & d & e \\ f & \boxed{g & h & j} & k \\ f & \boxed{g & h & j} & k \\ a & b & c & d & e \end{pmatrix}$ $Q^{(21)}: \{\sigma_y\}$	$\begin{pmatrix} a & b & c & b & a \\ f & \boxed{g & h & g} & f \\ f & \boxed{g & h & g} & f \\ a & b & c & b & a \end{pmatrix}$ $Q^{(22)}: \{C_2, \sigma_y\}$	$\begin{pmatrix} a & b & c & b & a \\ f & \boxed{g & h & g} & f \\ l & \boxed{m & n & m} & l \\ p & q & r & q & p \end{pmatrix}$ $Q^{(23)}: \{\sigma_x\}$
$\begin{pmatrix} a & b & c & d & e \\ f & \boxed{g & h & j} & k \\ k & \boxed{j & h & g} & f \\ e & d & c & b & a \end{pmatrix}$ $Q^{(24)}: \{C_2\}$	$\begin{pmatrix} a & b & c & d & e \\ f & \boxed{g & h & j} & k \\ -f & \boxed{-g & -h & -j} & -k \\ -a & -b & -c & -d & -e \end{pmatrix}$ $Q^{(25)}: \{\sigma_y \hat{P}\}$	$\begin{pmatrix} a & b & c & b & a \\ f & \boxed{g & h & g} & f \\ -f & \boxed{-g & -h & -g} & -f \\ -a & -b & -c & -b & -a \end{pmatrix}$ $Q^{(26)}: \{\sigma_y \hat{P}, \sigma_x\}$
$\begin{pmatrix} a & b & c & d & e \\ f & \boxed{g & h & j} & k \\ -k & \boxed{-j & -h & -g} & -f \\ -e & -d & -c & -b & -a \end{pmatrix}$ $Q^{(27)}: \{C_2 \hat{P}\}$	$\{\sigma_x \hat{P}\}, \quad \{\sigma_y, \sigma_x \hat{P}\}, \quad \{\sigma_y \hat{P}, \sigma_x \hat{P}\}$	

3 Построение дискретных бризеров для динамической 2D модели с однородным потенциалом

Каждое из симметрично-обусловленных инвариантных многообразий, представленных в таблице 1, 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 позволяет уменьшить число уравнений рассматриваемой модели за счет перехода от динамических переменных $q_{ij}(t)$ к новым переменным $a(t), b(t), c(t) \dots$, выделенным симметрией данного многообразия.

Построение дискретного бризера на заданном инвариантном многообразии сводится к нахождению таких значений $a(0), b(0), c(0) \dots$ которые, будучи использованы в качестве начальных условий при решении динамических уравнений рассматриваемой модели, порождают *периодический* колебательный режим. Неполная синхронизация колебаний, описываемых динамическими переменными $a(t), b(t), c(t)$, ... приводит к возникновению на том же многообразии некоторого *квазибризера*.

Наиболее просто такие начальные условия могут быть найдены для динамических моделей, которые определяются однородными потенциалами межчастичного взаимодействия. Рассмотрим построение ДБ для модели (1), которая соответствует однородному потенциалу степени m .

Нелинейные нормальные моды Розенберга представляют собой нелинейные динамические режимы, характерным свойством которых является пропорциональность всех динамических переменных одной и той же функции времени $f(t)$. Обычные (линейные) нормальные моды также удовлетворяют этому условию, причем для них функция $f(t) = \cos(\omega t + \phi_0)$, где ω — частота моды, а ϕ_0 — начальная фаза. Моды Розенберга могут существовать далеко не в любой нелинейной динамической системе, а их число может быть как меньше, так и больше числа её степеней свободы. Было доказано, что нелинейные нормальные моды Розенберга заведомо существуют в динамических системах, потенциальная энергия которых является *однородной функцией* всех своих аргументов. Поскольку, рассматриваемая модель (1) принадлежит именно к этому классу динамических систем, мы будем искать её решение в виде:

$$q_{ij}(t) = k_{ij} \cdot f(t), \quad (17)$$

где k_{ij} — постоянные коэффициенты ($i = 1..N, j = 1..M$), определяющие профиль дискретного бризера, а $f(t)$ — некоторая функция времени t .

Учитывая явный вид инвариантных многообразий, представленных в таблице 1, количество неизвестных коэффициентов k_{ij} равно числу соответствующих многообразию произвольных параметров a, b, c минус 1 (один из этих параметров фиксирован).

Проиллюстрируем процедуру построения мод Розенберга на примере многообразия $Q_{3 \times 3}^{(1)} = \{90^\circ, \sigma_y\}$ (см. таблицу 1), которому отвечают три независимые динамические переменные $a(t), b(t)$ и $c(t)$. Используя определение нелинейных нормальных мод, потребуем, чтобы эти переменные были пропорциональны одной и той же функции $f(t)$:

$$a(t) = a \cdot f(t), \quad b(t) = b \cdot f(t), \quad c(t) = c \cdot f(t).$$

Здесь a, b, c — константы, определяющие профиль ДБ. Таким образом, локализованную моду Розенберга $R(t)$ можно представить в виде

$$R(t) = \begin{pmatrix} c & b & c \\ b & a & b \\ c & b & c \end{pmatrix} \cdot f(t), \quad (18)$$

Так как один из указанных параметров может быть фиксирован произвольным образом, будем в дальнейшем полагать $a = 1$. Значения b, c находим в результате решения системы нелинейных алгебраических уравнений.

$$b \cdot [-\gamma + 4(b-1)^{m-1}] = -\gamma \cdot b^{m-1} + 2 \cdot (c-b)^{m-1} + (1-b)^{m-1}, \quad (19)$$

$$c \cdot [-\gamma + 4(b-1)^{m-1}] = -\gamma \cdot c^{m-1} + 2 \cdot (b-c)^{m-1}, \quad (20)$$

а «ведущее» дифференциальное уравнение, описывающее колебание бризера, имеет вид:

$$\ddot{f}(t) + p^2 \cdot f(t)^{m-1} = 0, \quad p^2 = \gamma - 4 \cdot (b-a)^{m-1} \quad (21)$$

Задание: Вывести вышеприведённые соотношения.

Как правило, существует много различных (локализованных и делокализованных) решений системы уравнений (19), (20). Поскольку дискретный бризер является локализованным в пространстве динамическим объектом, при поиске решения этих уравнений необходимо учитывать, что амплитуды колебаний частиц решетки должны убывать (наиболее часто экспоненциально) от его центра к периферии: $|a| > |b| > |c|$.

Для решения системы нелинейных алгебраических уравнений типа (19), (20) можно использовать стандартные средства математического пакета MAPLE. С их помощью достаточно легко построить дискретных бризеров на многообразиях, приведенных в таблице 1 для различных степеней m однородного потенциала и различных значений параметра $\gamma \in [1..10]$.

Например, для ряда значений параметра γ в случае однородного потенциала степени $m = 4$, можно найти следующие пространственные профили бризеров на инвариантном многообразии $\mathbf{Q}_{3 \times 3}^{(1)}$:

$$\begin{aligned} \gamma = 0 : & \quad a = 1, \quad b = -0.25439, \quad c = 0.00439; \\ \gamma = 3 : & \quad a = 1, \quad b = -0.17354, \quad c = 0.00113; \\ \gamma = 6 : & \quad a = 1, \quad b = -0.12261, \quad c = 0.00032. \end{aligned} \quad (22)$$

Задание: Проверить правильность приведенных данных.

Из приведенных значений коэффициентов b и c видно, что с ростом γ они уменьшаются, т.е. чем больше относительная сила онсайтовой части потенциальной энергии по отношению к его интерсайтовой части, тем лучше локализация бризера.

Временная зависимость бризеров, описываемых профилями (22), задается уравнением

$$\ddot{f}(t) + p^2 \cdot f(t)^3 = 0, \quad p^2 = 4(a-b)^3 + \gamma, \quad (23)$$

аналитическое решение которого может быть записано в форме:

$$f(t) = \text{cn}\left(\omega t, \frac{1}{\sqrt{2}}\right), \quad \omega = p \cdot f(0), \quad (24)$$

где $\text{sn}\left(\omega t, \frac{1}{\sqrt{2}}\right)$ — эллиптический косинус Якоби с параметром $\frac{1}{\sqrt{2}}$.

На рисунке 4а, показана зависимость коэффициентов $b = b(\gamma)$ и $c = c(\gamma)$ от параметра $\gamma \in [0; 10]$. Заметим, что эти функции имеют противоположные знаки и нарисованы в различных масштабах. Заметим также, что функции $b(\gamma)$ и $c(\gamma)$ можно с хорошей степенью точности аппроксимировать полиномами.

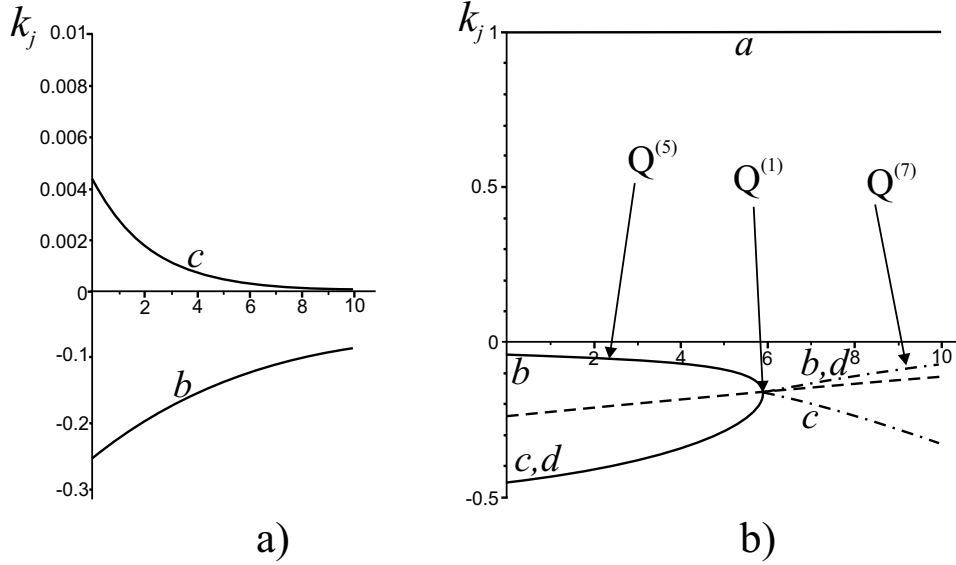


Рис. 4: Дискретные бризеры в модели (1) на инвариантных многообразиях а) $Q_{3 \times 3}^{(1)}$; б) $Q_{3 \times 3}^{(1)}$, $Q_{3 \times 3}^{(5)}$, $Q_{3 \times 3}^{(7)}$.

Это бризерное семейство описывается двумя переменными $b(\gamma)$, $c(\gamma)$, в то время как третья переменная a (см. таблицу 1) зафиксирована: $a = 1$. Другое фиксированное значение этой переменной повлечет за собой пропорциональное изменение бризерного профиля (можно доказать, что эта пропорциональность имеет место несмотря на то, что алгебраические уравнения (19), (20) являются нелинейными).

С другой стороны, временная зависимость бризерного решения, в частности, его частота, является нелинейной функцией параметра a , так как $p = p(a)$ (см. уравнение (23)).

В качестве примера на рисунке 4б для $m = 8$ приведены профили дискретных бризеров, построенные на инвариантных многообразиях $Q^{(1)}$, $Q^{(2)}$, $Q^{(4)}$ (группы симметрии $C_{4v} = \{90^\circ, \sigma_y\}$, $C_{2v} = \{180^\circ, \sigma_y\}$ и $\{\sigma_y\}$, соответственно). $Q^{(2)}$ и $Q^{(1)}$ являются подмногообразиями многообразия $Q^{(4)}$. Действительно, $Q^{(2)}$ получается из $Q^{(4)}$ при условии $e = f$, $c = d$, а многообразие $Q^{(1)}$ возникает из $Q^{(2)}$ при условии $c = b$ (см. таблицу 1).

Для $\gamma = \gamma_{\text{кр}} \approx 5.8848$ дискретные бризеры на всех вышеуказанных многообразиях сливаются. При $\gamma < \gamma_{\text{кр}}$ получается ДБ, соответствующий многообразию $Q^{(2)}$, а при $\gamma > \gamma_{\text{кр}}$ — бризер, отвечающий многообразию $Q^{(4)}$. Более того, для одного и того же значения γ могут существовать бризерные решения *разной симметрии*. На рис. 4б 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 σ_y).

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

4 Исследование устойчивости дискретных бризеров в 2D модели с однородным потенциалом

Поскольку ДБ представляет собой периодический колебательный режим, для исследования его устойчивости по линейному приближению можно воспользоваться теорией Флоке (см., например, [3]). 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. Ниже рассматривается анализ устойчивости ДБ в двумерной решетке для случая потенциала, представляющего собой однородную функцию произвольной четной степени m .

Задавая ДБ в форме локализованной ННМ Розенберга (17) 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 вариационной системы уравнений. Эту систему в нашем случае можно записать в виде:

$$\ddot{\delta} = (m - 1) \cdot f^{m-2} \mathbf{B} \cdot \delta. \quad (25)$$

Здесь

δ — 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.

Периодическая функция времени $f(t)$ является решением ведущего уравнения для моды Розенберга

$$\ddot{f}(t) + p^2 \cdot f(t)^{m-1} = 0, \quad (26)$$

с начальными условиями $f(0) = A$, $\dot{f}(0) = 0$, где A — амплитуда ДБ, а коэффициент $p = p(\mathbf{k})$ определенным образом зависит от его профиля \mathbf{k} .

Задание: Вывести формулы (25) и (26), линеаризуя динамическую модель (1).

Воспользовавшись специфической структурой линеаризованной системы уравнений (25), с помощью преобразования $\mathbf{S}^T \mathbf{B} \mathbf{S} = \mathbf{D}$ приведём 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 λ_k матрицы \mathbf{B} равны диагональным элементам матрицы \mathbf{D} .

Исследование устойчивости ДБ теперь сводится к анализу устойчивости нулевого решения системы уравнений (25). Введение нового инфинитезимального вектора $\mathbf{z} = \mathbf{S}^T \delta$ позволяет расщепить систему дифференциальных уравнений (25) на *независимые скалярные уравнения* одного и того же вида:

$$\ddot{z} = (m - 1) \lambda_k f(t)^{m-2} \cdot z, \quad (27)$$

где λ_k — собственные значения матрицы \mathbf{B} .

Проводя в ведущем уравнении (26) и в линеаризованных уравнениях (27) масштабирование функции $f(t)$ и ее аргумента t в соответствии с формулами

$$f(t) = A\varphi(t), \quad t = \frac{\tau}{pA^{m/2-1}}; \quad (28)$$

где A — амплитуда ННМ Розенберга, а $p = p(\mathbf{k})$, получим следующие уравнения:

$$\varphi''_\tau + \varphi^{m-1}(\tau) = 0, \quad \varphi(0) = 1, \quad \varphi'_\tau(0) = 0 \quad (29)$$

$$z''_\tau = f^{m-2} \cdot \Lambda_k \cdot z, \quad z(0) = 0, \quad z'_\tau(0) = 0. \quad (30)$$

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

Задание: Вывести формулы (28), (29) и (30).

Параметры $\Lambda_k = \frac{(m-1)\lambda_k}{p^2}$ будем называть *показателями устойчивости*. Бризерное решение является линейно устойчивым, если все показатели Λ_k лежат внутри интервалов устойчивости нулевого решения уравнения (30).

Исследование устойчивости нулевого решения уравнения (27) при $m = 4$ сводится к анализу уравнения Лямэ, а случай $m > 4$ может быть исследован с помощью некоторых достаточно сложных аналитических методов [14]. С другой стороны, рассматриваемую проблему можно относительно просто решить с помощью *численных* методов, в результате чего можно получить следующие интервалы устойчивости для показателей Λ_j :

$$[0, 1]; [m - 1, m + 2], [3m - 2, 3m + 3], \dots \quad (31)$$

Задание: Убедитесь в правильности соотношения (31) с помощью вычислительных экспериментов.

Особо следует подчеркнуть, что устойчивость ДБ в скалярной модели с однородным потенциалом произвольной степени m не зависит от его амплитуды, что очевидно из уравнений (29), (30), поскольку амплитуда A в них не входит в эти уравнения. Заметим, что в общем случае устойчивость ДБ может существенным образом зависеть от их амплитуды.

Области устойчивости и неустойчивости нулевого решения уравнения (30) чередуются в соответствии с формулой (31). Первая область устойчивости $[0, 1]$ одинакова для всех значения m , в то время как ширина первой области неустойчивости $[1, m - 1]$ растёт с ростом m .

Один из показателей, Λ_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.

Показатели $\Lambda_j = \Lambda_j(\gamma)$ суть некоторые функции параметра γ , определяющего силу онсайтовой части потенциала по отношению к его интерсайтовой части в модели (1). На рисунке 5 представлены графики функций $\Lambda_j(\gamma)$, $\gamma \in [0; 10]$ для различных инвариантных многообразий $\mathbf{Q}^{(i)}$ и разных значений степени m однородного потенциала (серым цветом выделены зоны неустойчивого движения).

Остановимся на рисунке 5 более подробно:

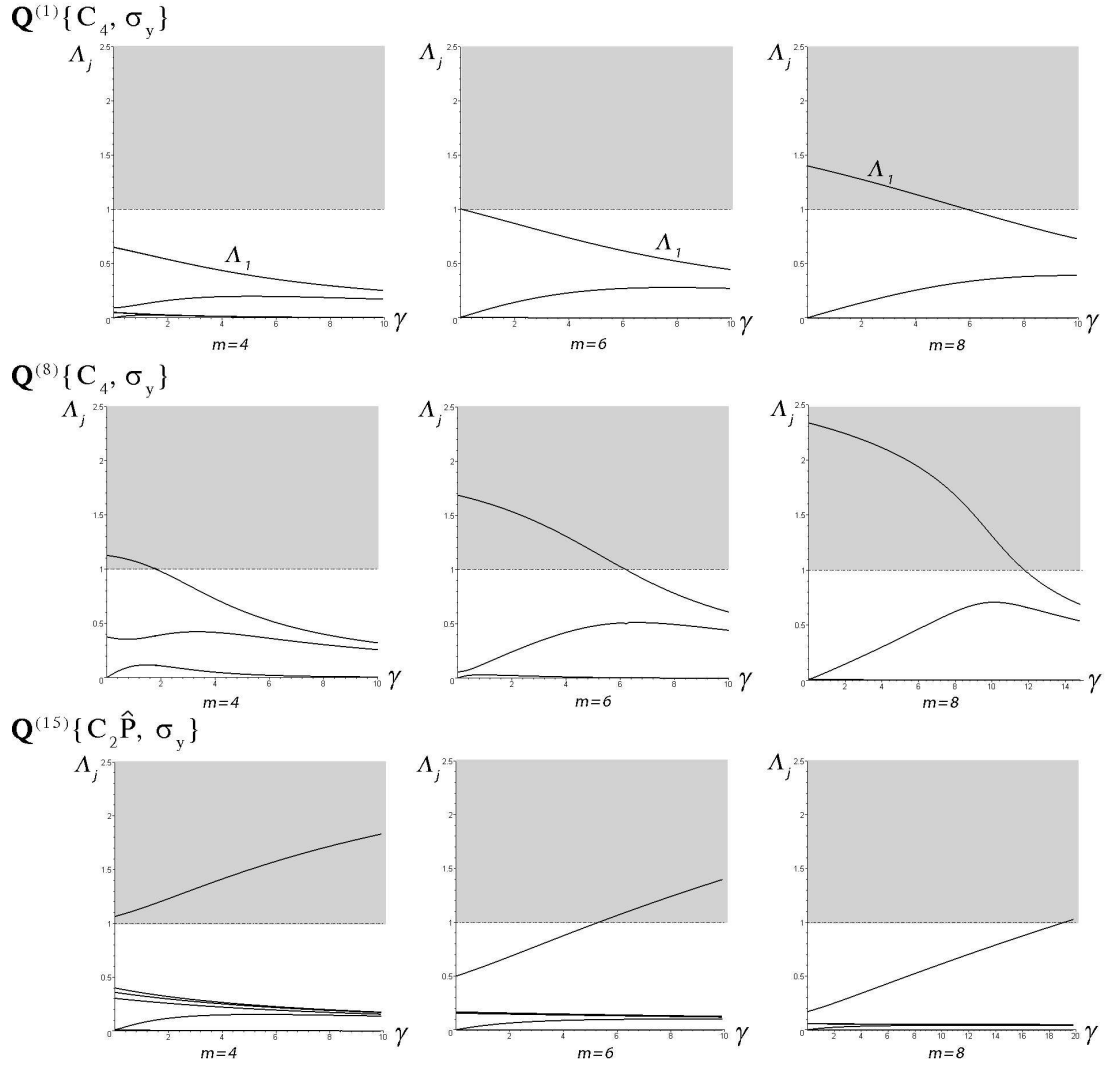


Рис. 5: Показатели устойчивости $\Lambda_j(\gamma)$ дискретных бризров, построенных на многообразиях $\mathbf{Q}^{(1)} \{C_4, \sigma_y\}$, $\mathbf{Q}^{(8)} \{C_4, \sigma_y\}$, $\mathbf{Q}^{(15)} \{C_2\hat{P}, \sigma_y\}$ модели (1).

1. Рассмотрим дискретные бризеры, относящиеся к инвариантному многообразию $Q_{3 \times 3}^{(1)}$ и соответствующие группе симметрии $\{C_4, \sigma_y\} = C_4 v$, центрированной в углу элементарной ячейки (ПСТ-1) для $m = 4, 6, 8$. Фрагмент 3×3 квадратной решетки имеет девять степеней свободы, поэтому устойчивость ДБ, построенного на этом фрагменте, определяют девять Λ_j .

Например, при $m = 4$, $\gamma = 0$ можно получить следующие показатели устойчивости Λ_j ($j = 0, 1, \dots, 8$):

$$\begin{aligned} \Lambda_0 = 3, \quad \Lambda_1 = \Lambda_2 = 0.65095, \quad \Lambda_3 = 0.64879, \\ \Lambda_4 = 0.09128, \quad \Lambda_5 = 0.05089, \quad \Lambda_6 = \Lambda_7 = 0.04873, \quad \Lambda_8 = 8 \sim 10^{-10} \end{aligned} \quad (32)$$

Задание: Убедиться в правильности вышеприведенных результатов.

Заметим, что некоторые показатели Λ_j оказываются равными друг другу. На рисунке 5 изображены функции $\Lambda_j = \Lambda_j(\gamma)$ для бризера, построенного на многообразии $Q_{3 \times 3}^{(1)}$ при $m = 4, 6, 8$ $\gamma \in [0; 10]$. Для $m = 4$, все показатели $\Lambda_j(\gamma)$ попадают

в первую зону устойчивости $0 < \Lambda_j(\gamma) < 1$, $j = 0..8$, $\gamma \in [0; 10]$ (на графике некоторые показатели не видны в силу их малости). Следовательно, рассматриваемые сейчас дискретные бризеры, являются устойчивыми динамическими объектами для всех значений параметра γ из интервала $[0; 10]$.

Для случая $m = 8$ картина устойчивости существенно меняется. Из рисунка 5 видно, что функция $\Lambda_1(\gamma)$ при $\gamma < \gamma_c \approx 5.8848$ лежит в первой области неустойчивости. Это означает, что при маленькой силе онсайтовой части потенциальной энергии бризер неустойчив. С другой стороны, при $\gamma > \gamma_c$ функция $\Lambda_1(\gamma)$ переходит в первую зону устойчивого движения и ДБ становится устойчивым.

И наконец, для $m = 6$, имеет место промежуточный случай, лежащий между двумя вышеперассмотренными случаями: кривая $\Lambda_1(\gamma)$ начинается точно от верхней границы первой области устойчивости и, следовательно, дискретный бризер в этом случае оказывается маргинально устойчивым при $\gamma = 0$. Все ДБ при $\gamma > 0$ устойчивы, так как $\Lambda_j(\gamma) < 1$, $j = 0..8$, $\gamma \in (0; 10]$.

Задание: Проверить правильность вышеприведенных результатов.

2. Другая ситуация имеет место для ДБ, построенного на инвариантном многообразии $Q_{3 \times 3}^{(8)}$ (группа симметрии $\{C_4; \sigma_y\} = C_4 v$, относящаяся к ПСТ-2). Из графиков, приведенных на рисунке 5, видно, что при $m = 4$, $m = 6$ и $m = 8$, некоторые показатели устойчивости лежат вне первой области устойчивости вплоть до соответствующих критических значений γ_c параметра γ . Эти критические значения $\gamma_c = \gamma_c(m)$ для разных степеней m различны. Более того, можно заметить, что значения $\gamma_c(m)$ при увеличении m тоже растут. Другими словами, чем больше m , тем более сильный онсайтовый потенциал нужен для получения устойчивого бризерного решения.

Задание: Проверить правильность приведенных результатов.

3. Для дискретного бризера, построенного на инвариантном многообразии $Q_{4 \times 4}^{(15)}$ (группа симметрии $\{C_2 \hat{P}; \sigma_y\} \equiv C_2 v$, соответствующая ПСТ-2), функции $\Lambda_j(\gamma)$, $j = 0..15$ изображены на 5. Из этих графиков видно, что при $m = 4$ дискретный бризер неустойчив для всех значений $\gamma \in [0; 10]$. С другой стороны, при $m = 6$ и $m = 8$, ДБ устойчивы вплоть до некоторого критического значения $\gamma_c^{(1)} \approx 5.3104$ и $\gamma_c^{(2)} \approx 19.1248$, соответственно. Во всех вышеперассмотренных случаях наблюдается одна и та же тенденция: достаточно сильный онсайтовый потенциал может стабилизировать колебания дискретного бризера.

Задание: Проверить правильность приведенных результатов.

Информацию, приведённую на рисунке 5, удобно представить в виде таблицы 2. В ней для скалярной модели (1) на плоской квадратной решетке, описываемой однородным потенциалом степени $m = 4, 6, 8$, представлены области существования и устойчивости по параметру γ 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 γ 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 2: Существование и устойчивость дискретных бризеров в скалярной модели (1) на инвариантных многообразиях, соответствующих ПСТ-1, для однородного потенциала разных степеней m

ПСТ-1		Инвариантные многообразия			
		$Q^{(1)}$ $\{90^\circ, \sigma_y\}$	$Q^{(2)}$ $\{180^\circ, \sigma_y\}$	$Q^{(3)}$ $\{\sigma_{xy}\}$	$Q^{(4)}$ $\{\sigma_y\}$
m=4	существ.	$[0; \infty)$	—	—	—
	устойчивость	$[0; \infty)$	—	—	—
m=6	существ.	$[0; \infty)$	$[0; 0.0476]$	$[0; 0.0476]$	$[0; 3.8716]$
	устойчивость	$[0; \infty)$	неуст.	неуст.	неуст.
m=8	существ.	$[0; \infty)$	$[0; 5.8848]$	$[0; 5.8848]$	$[0; 17.9037]$
	устойчивость	$[5.8848; \infty)$	неуст.	неуст.	неуст.

Для наглядности на рис. 6 приведены графики показателей устойчивости $\Lambda_j(\gamma)$ для дискретных бризеров, изображённых на рис. 4,6. Бризеры с симметрией C_{2v} и σ_y являются неустойчивыми на всем интервале $\gamma \in [0; 10]$, поскольку некоторые из соответствующих им показателей $\Lambda_j(\gamma)$ попадают в первую зону неустойчивости (на рис. 6 она выделена серым цветом). С другой стороны, бризер с симметрией C_{4v} , будучи неустойчивым при $\gamma < \gamma_{кр}$, становится устойчивым динамическим объектом при $\gamma > \gamma_{кр}$.

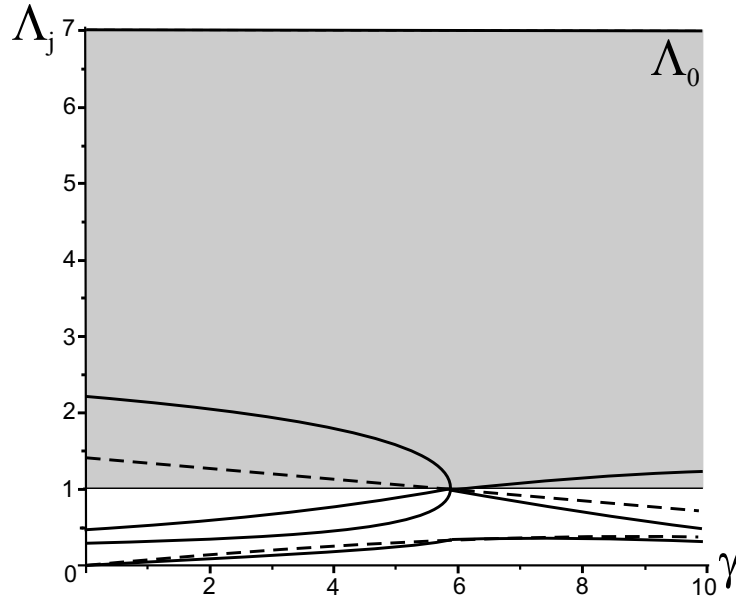


Рис. 6: ДБ на многообразиях $Q^{(2)}$, $Q^{(4)}$ и $Q^{(1)}$: зависимость показателей устойчивости Λ_j от γ .

5 Построение дискретных бризеров в моделях с неоднородными потенциалами

Динамическая модель (1), соответствующая однородному потенциалу степени $m > 2$, является весьма специфической, поскольку она не допускает существования фонового спектра. Действительно, для такой модели нельзя построить гармоническое приближение, ибо разложение потенциальной энергии в многомерный ряд Тейлора начинается с членов, степени которых превышают 2. С другой стороны, в более реалистических моделях обычно *не существует* локализованных мод Розенберга. В силу этого обстоятельства для поиска ДБ в таких моделях требуется применение методов, отличных от тех, которые используются при исследовании моделей с однородными потенциалами.

В общем случае, для построения дискретного бризера с заданным периодом T необходимо найти такие начальные данные (набор координат $q_{i,j}(0)$ и скоростей $\dot{q}_{i,j}(0)$ всех частиц), которые порождают решение системы нелинейных дифференциальных уравнений, удовлетворяющее в момент времени $t = T$ условию периодичности искомого бризерного решения: $q_{i,j}(T) = q_{i,j}(0)$, $\dot{q}_{i,j}(T) = \dot{q}_{i,j}(0)$. При расхождении значений динамических переменных при $t = 0$ и $t = T$ необходимо некоторым образом «улучшить» начальное приближение. В большинстве работ для этой цели применяется метод Ньютона-Рафсона [15, 2]. Для сходимости такой вычислительной процедуры необходимо знание достаточно хорошего начального приближения в многомерном фазовом пространстве L изучаемой системы. Для нахождения этого приближения в [1, 2] используется продолжение по параметру межчастичного взаимодействия из так называемого «антиконтинуального приближения». Однако, в общем случае, даже «хорошее начальное приближение» не гарантирует сходимость такой итерационной процедуры.

В связи с этим, для построения ДБ в тех случаях, когда нельзя воспользоваться аппаратом мод Розенберга, можно применить некоторый вариант метода *спуска* в вышеуказанном пространстве L . При этом минимизируется сумма квадратов расхождений всех динамических переменных и их скоростей при $t = 0$ и при $t = T$. Для задания приемлемого начального приближения в методе спуска удобно использовать в «ручном режиме» метод парной синхронизации [16]. Применение такого подхода позволяет построить ДБ на инвариантных многообразиях для скалярных моделей, описываемых *любыми* потенциалами межчастичного взаимодействия.

Для построения ДБ в модели (2) можно использовать те же инвариантные многообразия из таблицы 1.

Например, для многообразия $Q_{5 \times 5}^{(1)}$ в модели (2) с $\gamma = 1$ для ДБ с периодом $T = 2$ были получены следующие начальные условия (все начальные скорости предполагались равными нулю):

$$\begin{aligned} a(0) = 2.23751, \quad b(0) = -0.64719, \quad c(0) = 0.30201, \quad d(0) = 0.13725, \\ e(0) = -0.07879, \quad f(0) = 0.02294 \end{aligned} \quad (33)$$

Очевидно, что метод спуска можно использовать и для моделей с однородным потенциалом. Используя этот метод для модели (1) ($\gamma = 1$, $m = 4$), можно получить на том же многообразии $Q_{5 \times 5}^{(1)}$ следующее бризерное решение для случая $T = 2$:

$$\begin{aligned} a(0) = 1.28198, \quad b(0) = -0.28941, \quad c(0) = 0.00366, \quad d(0) = 0.00180, \\ e(0) = -0.00018, \quad f(0) = -9 \cdot 10^{-14} \end{aligned} \quad (34)$$

(Этот же бризер может быть найден с помощью техники ННМ Розенберга, описанной в разделе 4.2.)

Сравнивая решения (33) и (34), можно заметить, что ДБ в модели (1) более сильно локализован в пространстве, по сравнению с бризером, построенным в модели (2).

Это обстоятельство необходимо учитывать при построении ДБ на двух *разных* многообразиях $Q^{(1)}$ и $Q^{(2)}$. Дело в том, что 3×3 фрагменты этих многообразий (см. таблицу 1) полностью идентичны, в то время как 5×5 фрагменты оказываются уже различными ($Q_{5 \times 5}^{(2)}$ переходит в $Q_{5 \times 5}^{(1)}$ при $d = f = e$). Бризеры, построенные в модели 1 для $Q_{5 \times 5}^{(1)}$ и $Q_{5 \times 5}^{(2)}$, практически полностью совпадают, тогда как для модели (2), в которой локализация существенно хуже, уже заметно различие в форме этих динамических объектов.

Как оказалось, даже для моделей с однородными потенциалами, для которых построение бризеров основано на методе разделения переменных, что приводит к бризерным решениям в виде мод Розенберга, можно найти решения, которые таковыми модами *не являются*. 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. 7. На нем изображена временная эволюция динамических переменных $a(t)$, $b(t)$, $c(t)$, $d(t)$, которые соответствуют указанному многообразию (две другие переменные не видны в силу малости их амплитуд). Приведенный ДБ, будучи устойчивым динамическим объектом, не является модой Розенберга уже хотя бы потому, что разные динамические переменные проходят через нуль в разные моменты времени, что противоречит уравнениям (17).

Из рис. 7 видно, что полученный ДБ является достаточно хорошо локализованным. Непосредственное интегрирование на больших временах, как и метод Флоке, свидетельствуют об его *устойчивости*.

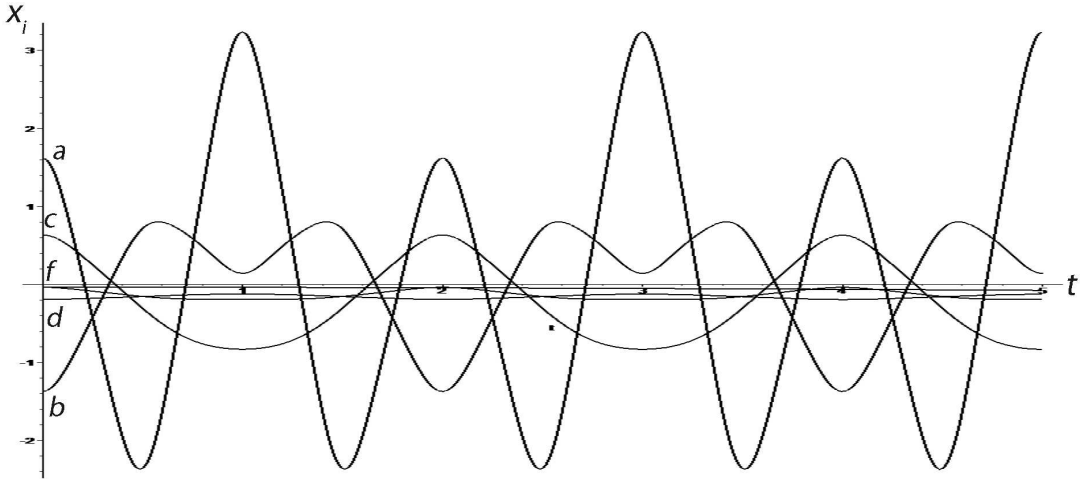


Рис. 7: Нетривиальный дискретный бризер в модели (1) на многообразии $Q_{3 \times 3}^{(1)}$ с однородным потенциалом степени $m = 4$, при $\gamma = 1$, который не является модой Розенберга.

В силу нетривиальности бризера, изображенного на рис. 7, мы приводим 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).

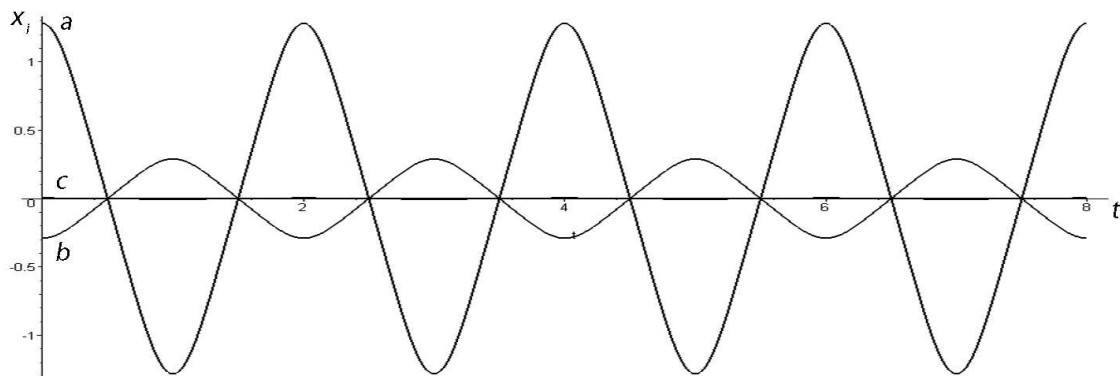


Рис. 8: Дискретный бризер в модели (1) на многообразии $Q_{3 \times 3}^{(1)}$ с однородным потенциалом степени $m = 4$, при $\gamma = 1$, который является модой Розенберга.

Для той же модели и того же самого инвариантного многообразия $Q_{5 \times 5}^{(1)}$ можно найти ДБ, который является ННМ Розенберга и имеет тот же самый период $T = 2$. Он был построен также с помощью метода спуска, исходя из других начальных условий: $a(0) = 1.2820$, $b(0) = -0.2894$, $c(0) = 0.0036$, $d(0) = 0.0017$, $e(0) = -1.17 \cdot 10^{-6}$, $f(0) = -3.36 \cdot 10^{-16}$ (см. рис. 8).

Дискретные бризеры, подобные изображенному на рис. 7 можно обнаружить и для ряда других моделей, например, для системы (2).

Задание: Получить временную эволюцию дискретных бризеров, определяемых начальными условиями (33), (34). Построить графики, изображенные на рисунках 7, ??

6 Применение теоретико-групповых методов к исследованию устойчивости бризеров и квазibriзеров в 2D моделях с произвольными потенциалами

В работе [17] был разработан общий теоретико-групповой метод упрощения анализа устойчивости нелинейных колебаний в системах с дискретной симметрией и с его помощью проведено исследование устойчивости бушей делокализованных ННМ. Его легко распространить на случай исследования устойчивости *локализованных* колебаний (бризеров и квазibriзеров) в скалярных моделях, определённых на плоской квадратной решётке. Этот метод позволяет расщепить линеаризованную в окрестности данного нелинейного колебательного режима систему динамических уравнений (вариационную систему) на некоторое число *независимых подсистем* существенно меньшей размерности.

Вариационная система, возникающая при исследовании устойчивости дискретных бризеров в модели (2), имеет вид:

$$\ddot{\delta} = \mathbf{J}(t)\delta, \quad (35)$$

где $\mathbf{J}(t) = \mathbf{D}(t) + \mathbf{C}$. Здесь $\mathbf{D}(t)$ — диагональная матрица, элементы которой являются функциями времени, а \mathbf{C} — постоянная матрица, зависящая от параметра γ , описывающего связь между соседними осцилляторами Дуффинга.

Поскольку указанные матрицы не коммутируют $[\mathbf{D}(t) \cdot \mathbf{C} \neq \mathbf{C} \cdot \mathbf{D}(t)]$, их невозможно привести одновременно к диагональному виду. Это, с свою очередь, означает, что невозможно расщепить вариационную систему $\ddot{\delta} = \mathbf{J}(t)\delta$ на независимые скалярные уравнения. Возникает вопрос: «Есть ли методы расщепления вариационной системы уравнений на некоторые независимые подсистем размерности меньшей, чем у исходной системы $\ddot{\delta} = \mathbf{J}(t)\delta$ »? Общий метод для решения этой проблемы и был развит в статье [17]. Ниже мы приводим схему этого метода, адаптированного к случаю двумерной скалярной модели.

Предположим, что система нелинейных дифференциальных уравнений (8) инвариантна относительно группы G_0 . Это означает, что после действия операторов \hat{g} , индуцированных элементами $g \in G_0$, мы получим новую систему уравнений, которая будет эквивалентна исходной (8).

С другой стороны, каждый динамический режим в рассматриваемой модели связан с определенной подгруппой G исходной группы симметрии G_0 ($G \subset G_0$). Для исследования линейной устойчивости, линеаризуем нелинейные уравнения (8) в окрестности этого режима и построим вариационную систему $\ddot{\delta} = \mathbf{J}(t)\delta$, где $\delta = \delta(t)$ — инфинитезимальный вектор, описывающий возмущения всех переменных $q_{ij}(t)$, а $\mathbf{J}(t)$ — матрица Якоби системы (8).

В статье [17] было доказано, что эта вариационная система инвариантна относительно группы симметрии G исследуемого на устойчивость динамического режима, что позволяет построить *приводимое представление* Γ группы G , используя в качестве базиса уравнения системы (35).

Пусть разложение представления Γ на *неприводимые представления* (НП) Γ_j группы G имеет вид

$$\Gamma = \sum_j^{\oplus} m_j \Gamma_j. \quad (36)$$

Тогда оказывается, что вариационную систему можно расщепить на независимые подсистемы, соответствующие *отдельным неприводимым представлениям* Γ_j . Существенно, что это расщепление не зависит от характера рассматриваемого динамического режима — он может быть периодическим, квазипериодическим и даже хаотическим.

В [17] показано, что матрица Якоби $J(t)$ коммутирует со всеми матрицами представления Γ , что позволяет, применив известную теорему Вигнера [18], представить $J(t)$ в следующей блочно-диагональной форме:

$$\mathbf{J}(t) = \sum_j^{\oplus} D_j, \quad (37)$$

Здесь каждый блок D_j отвечает неприводимому представлению Γ_j группы G , в соответствии с разложением (36).

Размерность блока D_j равна произведению $m_j \cdot n_j$, где n_j — размерность НП Γ_j , а m_j — кратность его вхождения в разложение (36) приводимого представления Γ .

Более того, каждый блок D_j имеет весьма специфическую структуру: он состоит из подблоков, пропорциональных единичной матрице размерности n_j , каждый из которых повторяется m_j раз вдоль строк и столбцов блока D_j . Например, блок $D_j = D$, которому отвечают числа $n_j = n$, $m_j = m$, имеет вид

$$D = \begin{pmatrix} \mu_{11}I_n & \mu_{12}I_n & \dots & \mu_{1m}I_n \\ \mu_{21}I_n & \mu_{22}I_n & \dots & \mu_{2m}I_n \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \mu_{m1}I_n & \mu_{m2}I_n & \dots & \mu_{mm}I_n \end{pmatrix}, \quad (38)$$

где I_n — единичная $n \times n$ матрица.

Такая структура блоков D_j из разложения (37) позволяет расцепить вариационную систему $\ddot{\delta} = \mathbf{J}(t)\delta$ на независимые подсистемы, соответствующие отдельным неприводимым представлениям. При этом каждому НП Γ_j отвечает n_j идентичных подсистем размерности m_j . Очевидно, что такое разложение может быть очень эффективным, если целые числа m_j намного меньше полной размерности системы $\ddot{\delta} = \mathbf{J}(t)\delta$.

Для нахождения явного вида расщепления вариационной системы $\ddot{\delta} = \mathbf{J}(t)\delta$ на независимые подсистемы необходимо найти *базисные векторы* всех Γ_j , входящих в представление Γ . Эти векторы используются в качестве столбцов ортогональной матрицы \mathbf{S} , с помощью которой можно ввести новый инфинитезимальный вектор \mathbf{y} вместо старого вектора δ :

$$\mathbf{y} = \mathbf{S}\delta. \quad (39)$$

Умножив слева обе части уравнения $\ddot{\delta} = \mathbf{J}(t)\delta$ на матрицу \mathbf{S} , получим $\mathbf{S}\ddot{\delta} = [\mathbf{S}\mathbf{J}(t)\mathbf{S}^T] \cdot (\mathbf{S}\delta)$ или

$$\ddot{\mathbf{y}} = \tilde{\mathbf{J}}(t) \cdot \mathbf{y}. \quad (40)$$

Поскольку матрица $\tilde{\mathbf{J}}(t) \equiv \mathbf{S} \cdot \mathbf{J}(t)\mathbf{S}^T$ является блочно-диагональной, уравнения (40) разбиваются на независимые подсистемы, имеющие размерности m_j .

Построение явного вида матрицы $\tilde{\mathbf{J}}$ представляет собой весьма громоздкую процедуру, в связи с чем желательно до начала её применения выяснить, насколько эффективным будет расщепление вариационной системы $\ddot{\delta} = \mathbf{J}(t)\delta$ на независимые подсистемы. С этой целью в работе [17] на основе *теории характеров* представлений групп симметрии [19] была разработана методика построения так называемых *схем расщепления*. Эти схемы определяют число и размерности m_j независимых подсистем, получаемых в результате расщепления вариационной системы.

Кратности m_j вхождения НП Γ_j в приводимое представление Γ группы симметрии G рассматриваемого динамического режима можно найти с помощью известной формулы

$$m_j = \frac{1}{||G||} \sum_{g \in G} \chi_\Gamma(g) \cdot \bar{\chi}_j(g), \quad (41)$$

где $||G||$ — порядок группы G , $\chi_\Gamma(g)$, $\chi_j(g)$ — следы матриц, соответствующих элементам $g \in G$ в приводимом представлении Γ и в неприводимом представлении Γ_j , соответственно.

В качестве примера, рассмотрим процедуру нахождения схем расщепления вариационной системы для динамического режима, реализующегося на инвариантном многообразии $Q_{3 \times 3}^{(1)}$. Это многообразие соответствует группе симметрии $C_{4v} = \{C_4, \sigma_y\}$, состоящей из следующих восьми элементов ($||G|| = 8$):

$$\begin{aligned}
g_1(x, y) &= (x, y) \text{ — единичный элемент;} \\
g_2(x, y) &= (-y, x) \text{ — поворот на } 90^\circ; \\
g_3(x, y) &= (-x, -y) \text{ — поворот на } 180^\circ; \\
g_4(x, y) &= (y, -x) \text{ — поворот на } 270^\circ; \\
g_5(x, y) &= (-x, y) \text{ — отражение в зеркальной плоскости } (1, 0) [\sigma_x]; \\
g_6(x, y) &= (-y, -x) \text{ — отражение в зеркальной плоскости } (-1, 1) [\sigma_{\bar{x}y}]; \\
g_7(x, y) &= (x, -y) \text{ — отражение в зеркальной плоскости } (0, 1) [\sigma_y]; \\
g_8(x, y) &= (y, x) \text{ — отражение в зеркальной плоскости } (1, 1) [\sigma_{xy}];
\end{aligned} \tag{42}$$

Здесь каждый элемент симметрии определяется своим действием на произвольную точку (x, y) двумерной плоскости. Все повороты выполняются вокруг оси z , перпендикулярной к этой плоскости. Зеркальные плоскости задаются направлением нормали. В квадратных скобках приводятся обозначения этих элементов симметрии.

Проиллюстрируем определение элементов симметрии из уравнений (42) на примере g_2 . Этот элемент задает поворот на угол 90° : точка (x, y) переходит в точку $(-y, x)$, т.е. при действии g_2 $x \rightarrow -y, y \rightarrow x$.

Каждый динамический режим, построенный на инвариантном многообразии $Q_{3 \times 3}^{(1)}$, описывается тремя переменными $a(t), b(t), c(t)$. Однако, произвольно малое возмущение этого решения, очевидно, характеризуется девятью независимыми переменными δ_{ij} :

$$\delta = \begin{pmatrix} \delta_{11} & \delta_{12} & \delta_{13} \\ \delta_{21} & \delta_{22} & \delta_{23} \\ \delta_{31} & \delta_{32} & \delta_{33} \end{pmatrix}. \tag{43}$$

Таким образом, мы должны рассматривать девятимерное векторное пространство всех возможных возмущений.

В этом пространстве выберем «естественный» базис $\{\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \dots, \mathbf{e}_9\}$:

$$\mathbf{e}_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{e}_2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{e}_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \dots, \quad \mathbf{e}_9 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{44}$$

Приведенные базисные векторы переходят друг в друга под действием любого из элементов симметрии $g \in G$. Например, $\hat{g}_7 \mathbf{e}_1 = \mathbf{e}_7$, $\hat{g}_7 \mathbf{e}_2 = \mathbf{e}_8$, $\hat{g}_7 \mathbf{e}_3 = \mathbf{e}_9$, ..., $\hat{g}_7 \mathbf{e}_9 = \mathbf{e}_3$. Эта перестановка базисных векторов определяет девятимерную матрицу $M(g_7)$, соответствующую элементу g_7 . Совокупность $\{M(g) \mid \forall g \in G\}$ таких матриц, отвечающих всем элементам группы G , образует так называемое перестановочное представление этой группы.

Для использования уравнения (41), мы должны найти лишь следы $\chi(g)$ всех матриц $M(g)$ представления Γ . Легко видеть, что ненулевой вклад в $\chi(g)$ вносят только те базисные векторы \mathbf{e}_j , которые не изменяются под действием оператора \hat{g} . Например, для элемента g_7 такие векторы содержат 1 в тех узлах решетки, которые лежат

Таблица 3: Неприводимые представления Γ_j ($j = 1..5$) группы $G = C_{4v}$, их характеры и характер приводимого представления Γ .

	g_1	g_2	g_3	g_4	g_5	g_6	g_7	g_8
Γ_1	1	1	1	1	1	1	1	1
Γ_2	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1
Γ_3	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1
Γ_4	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1
Γ_5	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$
$\chi(\Gamma_5)$	2	0	-2	0	0	0	0	0
$\chi(\Gamma)$	9	1	1	1	3	3	3	3

на зеркальной плоскости σ_y : $\hat{g}_7 \mathbf{e}_4 = \mathbf{e}_4$, $\hat{g}_7 \mathbf{e}_5 = \mathbf{e}_5$ и $\hat{g}_7 \mathbf{e}_6 = \mathbf{e}_6$. Отсюда следует, что $\chi(g_7) = 3$. Проводя аналогичные вычисления для всех $g \in G = C_{4v}$, мы получим характер $\chi(\Gamma)$ приводимого представления Γ (см. последнюю строку в таблице 3).

Группа $G = C_{4v}$ имеет пять неприводимых представлений: четыре из них одномерные (Γ_1 , Γ_2 , Γ_3 , Γ_4), а Γ_5 — двумерное. Эта информация представлена в таблице 2 и может быть найдена практически во всех справочниках по теории групп. Заметим, что характеры одномерных НП совпадают с самими этими представлениями.

Используя таблицу 3 и уравнение (41), можно найти:

$$m(\Gamma_1) = 3, \quad m(\Gamma_2) = 0, \quad m(\Gamma_3) = 1, \quad m(\Gamma_4) = 1, \quad m(\Gamma_5) = 2. \quad (45)$$

Следовательно, разложение приводимого представления Γ на неприводимые представления Γ_j имеет вид:

$$\Gamma = 3\Gamma_1 \oplus \Gamma_3 \oplus \Gamma_4 \oplus 2\Gamma_5. \quad (46)$$

Отсюда следует, что вариационная система $\ddot{\delta} = \mathbf{J}(t)\delta$ расщепляется на независимые подсистемы в соответствии со следующей схемой:

$$(3 \times 3) \oplus (1 \times 1) \oplus (1 \times 1) \oplus 2(2 \times 2). \quad (47)$$

Согласно этой схеме, вариационная система из 9 уравнений расщепляется на пять независимых подсистем: одну трехмерную (она соответствует НП Γ_1), две двумерных одинакового вида (они соответствуют НП Γ_5) и два скалярных уравнения, отвечающих НП Γ_3 и Γ_4 . В результате исследование устойчивости динамических режимов на многообразии $Q_{3 \times 3}$ значительно упрощается: вместо анализа полной вариационной системы 9×9 можно исследовать устойчивость 4 независимых подсистем размерности 1, 2 и 3. Такой подход особенно эффективен в случаях, когда динамический режим квазипериодичен и, следовательно, мы не можем воспользоваться методом Флоке для исследования его устойчивости.

6.1 Примеры расщепления системы вариационных уравнений

Для нахождения явной формы расщепленной вариационной систем необходимо найти ортогональную матрицу, столбцами которой являются базисные векторы всех

неприводимых представлений Γ_j , входящих в приводимое представление Γ . Как правило, базисные векторы НП данной группы строятся методом проекционных операторов [19]. Однако для наших целей более удобным является «прямой» метод [20], основанный на применении определения представления группы.

Пусть $\Phi = \{\mathbf{V}_1, \mathbf{V}_2, \dots, \mathbf{V}_n\}$ — «супервектор», представляющий собой множество всех базисных векторов \mathbf{V}_j заданного (приводимого или неприводимого) n -мерного представления $\tilde{\Gamma}$ группы G :

$$\tilde{\Gamma} = \{M(g) | \forall g \in G\}. \quad (48)$$

Это означает, что (см., например, [19]):

$$\hat{g}\Phi = M^T(g)\Phi, \quad (49)$$

где $M^T(g)$ — матрица, транспонированная по отношению к матрице $M(g)$, соответствующая элементу g группы G .

Построим векторы всех неприводимых представления Γ_j ($j = 1..5$) группы $G = C_{4v}$, перечисленных в таблице 3. Так как НП Γ_1 , Γ_2 , Γ_3 и Γ_4 — одномерные, то каждому из них соответствует по одному базисному вектору. Обозначим эти векторы через φ_1 , φ_2 , φ_3 и φ_4 , соответственно.

Заметим, что достаточно учесть только те из уравнений (49), которые соответствуют *генераторам* группы G : все другие элементы могут быть представлены в виде различных произведений этих генераторов. Вследствие этого, уравнения (49), написанные для остальных элементов $g \in G$, не дают никакой дополнительной информации о базисных векторах данного представления. Выберем элементы g_2 и g_5 в качестве генераторов рассматриваемой группы $G = C_{4v}$.

Из определения (49), находим следующие уравнения для базисных векторов:

$$\Gamma_1 : \hat{g}_2\varphi_1 = \varphi_1, \quad \hat{g}_5\varphi_1 = \varphi_1; \quad (50)$$

$$\Gamma_2 : \hat{g}_2\varphi_2 = \varphi_2, \quad \hat{g}_5\varphi_2 = -\varphi_2; \quad (51)$$

$$\Gamma_3 : \hat{g}_2\varphi_1 = -\varphi_3, \quad \hat{g}_5\varphi_1 = \varphi_3; \quad (52)$$

$$\Gamma_4 : \hat{g}_2\varphi_4 = -\varphi_4, \quad \hat{g}_5\varphi_4 = -\varphi_4; \quad (53)$$

Неприводимое представление Γ_5 является двумерным и, следовательно, ему соответствуют два базисных вектора ψ_1 и ψ_2 , которые удовлетворяют уравнениям:

$$\Gamma_5 : \begin{aligned} \hat{g}_2\psi_1 &= \psi_2, & \hat{g}_2\psi_2 &= -\psi_1; \\ \hat{g}_5\psi_1 &= -\psi_1, & \hat{g}_5\psi_2 &= \psi_2. \end{aligned} \quad (54)$$

Решив уравнения (50)–(54), получим полный набор базисных векторов в девятимерном пространстве всех возможных отклонений $\delta_{ij}(t)$ [см уравнение (43)] от рассматриваемого динамического режима, построенного на инвариантном многообразии $Q_{3 \times 3}^{(1)}$.

Поскольку уравнения (50) совпадают с уравнениями (13)–(14) с точностью до переименования переменных, приходим к выводу, что базисный вектор неприводимого представления Γ_1 имеет такой же вид, как и инвариантное многообразие $Q_{3 \times 3}^{(1)}$ в уравнении (15):

$$\varphi_1 = \begin{pmatrix} C & B & C \\ B & A & B \\ C & B & C \end{pmatrix}. \quad (55)$$

Здесь и далее мы изображаем девятимерные базисные векторы в виде 3×3 матриц. Из (55) видно, что φ_1 зависит от трёх независимых параметров A, B, C и представляет собой трехмерное подпространство рассматриваемого девятимерного пространства. Это означает, что НП Γ_1 входит в приводимое представление Γ три раза.

Принимая во внимание уравнение (55), перепишем φ_1 в следующем виде:

$$\varphi_1 = A \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + B \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} + C \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (56)$$

Следовательно, мы можем выбрать следующие три базисных вектора \mathbf{V}_j в трехмерном подпространстве, описываемом φ_1 ;

$$\begin{aligned} \mathbf{V}_1 &= (0, 0, 0 | 0, 1, 0 | 0, 0, 0)^T; \\ \mathbf{V}_2 &= \frac{1}{2}(0, 1, 0 | 1, 0, 1 | 0, 1, 0)^T; \\ \mathbf{V}_3 &= \frac{1}{2}(1, 0, 1 | 0, 0, 0 | 1, 0, 1)^T. \end{aligned} \quad (57)$$

Эти девятимерные векторы формируют три первые колонки матрицы \mathbf{S} , которая приводит к расщеплению вариационной системы $\ddot{\delta} = J(t) \cdot \delta$ на несколько независимых подсистем. (Здесь использован символ транспонирования T , позволяющий записать векторы-столбцы, в виде векторов-строк).

Из уравнений (51), находим $\varphi_2 = 0$, т.е. НП Γ_2 не входит в приводимое представление Γ .

Из решения уравнений (52) находим

$$\varphi_3 = \begin{pmatrix} 0 & -B & 0 \\ B & 0 & B \\ 0 & -B & 0 \end{pmatrix}, \quad (58)$$

откуда следует, что НП Γ_3 входит в приводимое представление Γ только один раз и, следовательно, четвёртый столбец матрицы \mathbf{S} можно записать в виде

$$\mathbf{V}_4 = \frac{1}{2}(0, -1, 0 | 1, 0, 1 | 0, -1, 0)^T. \quad (59)$$

Из решения уравнений (53)

$$\varphi_4 = \begin{pmatrix} -A & 0 & A \\ 0 & 0 & 0 \\ A & 0 & -A \end{pmatrix} \quad (60)$$

получим пятый столбец матрицы \mathbf{S}

$$\mathbf{V}_5 = \frac{1}{2}(-1, 0, 1 | 0, 0, 0 | 1, 0, -1)^T. \quad (61)$$

Наконец, для неприводимого представления Γ_5 , находим из уравнений (54):

$$\psi_1 = \begin{pmatrix} A & B & A \\ 0 & 0 & 0 \\ -A & -B & -A \end{pmatrix}, \quad \psi_2 = \begin{pmatrix} A & 0 & -A \\ B & 0 & -B \\ A & 0 & -A \end{pmatrix}. \quad (62)$$

Эти базисные векторы зависят от двух параметров A, B . Подставив, последовательно, $A = 1, B = 0$ и $A = 0, B = 1$, найдём после нормировки последние четыре столбца матрицы \mathbf{S} :

$$\begin{aligned} \mathbf{V}_6 &= \frac{1}{2}(1, 0, 1|0, 0, 0|-1, 0, -1)^T; \\ \mathbf{V}_7 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(0, 1, 0|0, 0, 0|0, -1, 0)^T; \\ \mathbf{V}_8 &= \frac{1}{2}(1, 0, -1|0, 0, 0|1, 0, -1)^T; \\ \mathbf{V}_9 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(0, 0, 0|1, 0, -1|0, 0, 0)^T. \end{aligned} \quad (63)$$

Заметим, что число независимых параметров, от которых зависят базисные векторы, представляющие собой решение уравнений (50)-(54) определяют кратности вхождения (m_j) НП Γ_j в приводимое представление Γ в полном соответствии с формулой (36).

Все векторы \mathbf{V}_j ($j = 1..9$) ортогональны и нормированы, что является необходимым условием для того, чтобы матрица \mathbf{S} была ортогональной.

Исходя из вышесказанного, матрицу \mathbf{S} , позволяющую расщепить вариационную систему $\ddot{\delta} = J(t) \cdot \delta$ на независимые подсистемы, можно записать в виде:

$$S = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\sqrt{2}}{2} \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & -\frac{\sqrt{2}}{2} & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (64)$$

Вводя новый девятимерный инфинитезимальный вектор $\mathbf{y} = \mathbf{S}\delta$, где матрица \mathbf{S} определяется уравнением (64), мы получим из «старой» вариационной системы $\ddot{\delta} = J(t) \cdot \delta$ «новую»

$$\ddot{\mathbf{y}} = \tilde{J}(t)\mathbf{y}, \quad (65)$$

где матрица $\tilde{J}(t) = SJ(t)S^T$ является *блочной-диагональной*. В результате исходная вариационная система распадается на *независимые подсистемы*.

Пример 1

Для модели (2) линейно-связанных осцилляторов Дуффинга, можно найти следующие подсистемы, соответствующие отдельным неприводимым представлениям группы $G = C_{4v}$.

НП Γ_1 порождает трехмерную подсистему вида:

$$\begin{cases} \ddot{y}_1 + [3c^2(t) + (1 + 2\alpha)]y_1 - 2\alpha y_2 = 0, \\ \ddot{y}_2 - 2\alpha y_1 + [3b^2(t) + (1 + 3\alpha)]y_2 - 2\alpha y_3 = 0, \\ \ddot{y}_3 - 2\alpha y_2 + [3a^2(t) + (1 + 4\alpha)]y_3 = 0. \end{cases} \quad (66)$$

Входящие в уравнения (66) зависящие от времени функции $a(t)$, $b(t)$ и $c(t)$ описывают динамический режим, построенный на инвариантном многообразии $Q_{3 \times 3}^{(1)} = \begin{pmatrix} c & b & c \\ b & a & b \\ c & b & c \end{pmatrix}$. Напомним, что этот режим может быть как периодическим, так и квазипериодическим.

Две *одинаковые* 2×2 подсистемы

$$\begin{cases} \ddot{y}_1 + [3c^2(t) + (1 + 4\alpha)]y_1 - \sqrt{2}\alpha y_2 = 0, \\ \ddot{y}_2 - \sqrt{2}\alpha y_1 + [3b^2(t) + (1 + 5\alpha)]y_2 = 0 \end{cases} \quad (67)$$

соответствуют неприводимому представлению Γ_5 .

Представлениям Γ_3 и Γ_4 отвечают скалярные уравнения вида:

$$\Gamma_3 : \quad \ddot{y} + [3b^2(t) + (1 + 3\alpha)]y = 0, \quad (68)$$

$$\Gamma_4 : \quad \ddot{y} + [3c^2(t) + (1 + 6\alpha)]y = 0. \quad (69)$$

Задание: Проверить приведенные выше результаты расщепления вариационной системы.

В случае инвариантного многообразия $Q_{3 \times 3}^{(1)}$, дискретному бризеру соответствует 18-мерное фазовое пространство, в силу чего при непосредственном применении для исследования его устойчивости метода Флоке, необходимо строить 18×18 матрицу монодромии и исследовать её собственные значения. С другой стороны, после расщепления вариационной системы $\ddot{\delta} = J(t) \cdot \delta$ на независимые подсистемы (66)–(69) меньших размеров, мы можем исследовать устойчивость бризера, анализируя каждую из этих подсистем в отдельности.

Для дискретного бризера с периодом $T = 2$, соответствующего инвариантному многообразию $Q_{3 \times 3}^{(1)}$, при $\gamma = 1$ и начальных условиях $a(0) = 2.35593$, $b(0) = -0.45156$, $c(0) = 0.13152$ для подсистемы 3×3 (66) можно найти следующие показатели Флоке:

$$\begin{cases} -0.74678 \pm 0.66507 \cdot i, \\ 0.26213 \pm 0.99966 \cdot i, \\ 1 \pm 0 \cdot i. \end{cases} \quad (70)$$

Для двумерной подсистемы (67):

$$\begin{cases} -0.60978 \pm 0.79257 \cdot i, \\ 0.61449 \pm 0.78892 \cdot i. \end{cases} \quad (71)$$

Для уравнения (68):

$$-0.53267 \pm 0.84632 \cdot i. \quad (72)$$

Для уравнения (69):

$$-0.55546 \pm 0.83154 \cdot i. \quad (73)$$

Задание: Проверить приведенные результаты.

Все эти значения лежат на единичном круге в комплексной плоскости и, следовательно, соответствующий дискретный бризер является устойчивым.

Для проверки правильности найденной схемы расщепления, целесообразно вычислить показатели Флоке для всего 18-мерного фазового пространства, соответствующего первоначальной вариационной системе $\ddot{\delta} = J(t)\delta$. Легко проверить, что они полностью совпадают с указанными выше значениями этих показателей из уравнений (70)–(73).

Пример 2

Рассмотрим вариационную систему $\ddot{\delta} = J(t)\delta$ для дискретного бризера, построенного на том же инвариантном многообразии $Q_{3 \times 3}^{(1)}$ для модели (1). Заметим, что устойчивость такого бризера в силу однородности потенциала этой модели может быть исследована и без использования метода Флоке (см. раздел 4.4). С помощью той же самой матрицы \mathbf{S} из уравнения (64) найдём следующее расщепление вариационной системы:

$$\Gamma_1 : \begin{cases} \ddot{y}_1 + 3[\gamma c^2(t) + 2\nu(t)]y_1 - 6\nu(t)y_2 = 0, \\ \ddot{y}_2 - 6\nu(t)y_1 + 3[\gamma b^2(t) + \mu(t) + 2\nu(t)]y_2 - 6\mu(t)y_3 = 0, \\ \ddot{y}_3 - 6\mu(t)y_2 + 3[\gamma a^2(t) + 4\mu(t)]y_3 = 0, \end{cases} \quad (74)$$

$$\Gamma_5 : \begin{cases} \ddot{y}_1 + 3[\gamma c^2(t) + 2\nu(t)]y_1 - 3\sqrt{2}\nu(t)y_2 = 0, \\ \ddot{y}_2 - 3\sqrt{2}\nu(t)y_1 + 3[\gamma b^2(t) + \mu(t) + 2\nu(t)]y_2 = 0, \end{cases} \quad (75)$$

(две одинаковых системы вида),

$$\Gamma_3 : \quad \ddot{y} + 3[\gamma b^2(t) + \mu(t) + 2\nu(t)]y = 0, \quad (76)$$

$$\Gamma_4 : \quad \ddot{y} + 3[\gamma c^2(t) + 2\nu(t)]y = 0. \quad (77)$$

Здесь $\mu(t) = [a(t) - b(t)]^2$, $\nu(t) = [b(t) - c(t)]^2$, где $a(t)$, $b(t)$, и $c(t)$ — три зависящие от времени переменные, определяющие исследуемое бризерное решение.

Задание: Проверить приведенные результаты.

Рассмотрим дискретный бризер при $\gamma = 1$ и $m = 4$. После расщепления исходной вариационной системы на независимые подсистемы (74)–(77) мы можем установить каким неприводимым представлениям Γ_j группы $G = C_{4v}$ соответствует каждый из показателей устойчивости Λ_j ($j = 1..9$) из найденных нами в разделе 4.4:

$$\begin{aligned} \Gamma_1 : \quad \Lambda_0 &= 3, \quad \Lambda_1 = 0.12407, \quad \Lambda_2 = 0.02340, \\ \Gamma_3 : \quad \Lambda_3 &= 0.59433, \\ \Gamma_4 : \quad \Lambda_4 &= 0.03707, \\ \Gamma_5 : \quad \Lambda_5 &= \Lambda_6 = 0.59556, \quad \Lambda_7 = \Lambda_8 = 0.03584. \end{aligned} \quad (78)$$

Заметим, что некоторые из этих Λ_j оказываются вырожденными.

В случае *слабой локализации* дискретного бризера необходимо рассматривать фрагменты инвариантных многообразий большего размера. Это приводит к увеличению размерности вариационной системы $\ddot{\delta} = \mathbf{J}(t)\delta$ и расщеплению её на независимые подсистемы *более высокой размерности*. Например, для многообразия $Q_{5 \times 5}^{(1)}$ можно получить следующую схему расщепления

$$1(6 \times 6) \oplus 1(1 \times 1) \oplus 1(3 \times 3) \oplus 1(3 \times 3) \oplus 2(6 \times 6), \quad (79)$$

из которой видно, что эти подсистемы имеют размерности 1, 3 и 6. В выражении (79) они отвечают неприводимым представлениям Γ_1 , Γ_2 , Γ_3 , Γ_4 и Γ_5 , соответственно.

Из сравнения (79) и (47), следует, что расщепление вариационной системы на многообразии $Q_{3 \times 3}^{(1)}$ более эффективно, чем на многообразии $Q_{5 \times 5}^{(1)}$.

Подчеркнем, что все обсужденные нами расщепления вариационной системы справедливы не только для периодических, но и для квазипериодических режимов.

Список литературы

- [1] *Aubry S.* Breathers in nonlinear lattices: existence, linear stability and quantization // *Physica D*. 1997. V. 103. P. 201–250.
- [2] *Flach S., Gorbach A.* Discrete breathers: advances in theory and applications // *Physics Reports*. 2007. V. 467. P. 1–116.
- [3] Д.С. Рябов, Г.М.Чечин. Дискретные бризеры. 2007. Электронный вариант: http://sfedu.ru/www/umr.umr_download?p_umr_id=34111.
- [4] Г.С. Безуглова, Г.М.Чечин. Дискретные бризеры, квазибризеры и метод парной синхронизации. 2007. Электронный вариант: http://sfedu.ru/www/umr.umr_download?p_umr_id=33611.
- [5] *Fischer, F.* Self-localized single-anharmonic vibrational modes in two-dimensional lattices // *Annalen der Physik*. 1993. V. 505. P. 296–307.
- [6] *Butt I.A., Wattis J.A.D.* Discrete breathers in a two-dimensional Fermi-Pasta-Ulam lattice // *Journal of Physics A: Mathematical and General*. 2006. V. 39. P. 4955–4984.
- [7] *Butt I.A., Wattis J.A.D.* Discrete breathers in a two-dimensional hexagonal Fermi-Pasta-Ulam lattice // *Journal of Physics A: Mathematical and General*. 2006. V. 40. P. 1239–1264.
- [8] *Сажненко В.П., Чечин Г.М.* Симметричные правила отбора в нелинейной динамике атомных систем // *ДАН*. 1993, Т. 330, С. 308-310.
- [9] *Сажненко В.П., Чечин Г.М.* Кусты мод и нормальные колебания для нелинейных динамических систем с дискретной симметрией // *ДАН*. 1994, Т. 338, С. 42-45.
- [10] *Chechin G. M., Sakhnenko V. P.* Interactions between normal modes in nonlinear dynamical systems with discrete symmetry. Exact results // *Physica D*. 1998. V. 117, P. 43–76.
- [11] *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.
- [12] *Бокий Г. Б.* Кристаллохимия. М.: Изд-во МГУ. 1960. 357 стр.
- [13] *Ковалёв О. В.* Неприводимые и индуцированные представления и копредставления федоровских групп, М.: Наука, 1986. 368 стр.
- [14] *Аврамов К. В., Михлин Ю. В.* Нелинейная динамика упругих систем. Модели, методы, явления. Том 1. РХД. 2010. 704 стр.
- [15] *Marin J. L., Aubry S.* Breathers in nonlinear lattices: Numerical calculation. from the anticontinuous limit. // *Nonlinearity*. 1998. V. 9. P. 1501–1528.

- [16] Гончаров П.П., Джелаухова (Безуглова) Г.С., Чечин Г.М. Дискретные бризеры в моноатомных цепочках // Известия ВУЗов. Прикладная нелинейная динамика, 6, 2007, с. 57-73.
- [17] Chechin G. M., Zhukov K. G. Stability analysis of dynamical regimes in nonlinear systems with discrete symmetries // Physical Review E. 2006. V. 73. P. 036216–17.
- [18] Петрошень М. И. Применение теории групп в квантовой механике [Текст]: монография / М. И. Петрошень, Е. А. Трифонов. - М.: Наука, 1967. - 308 стр.
- [19] Эллиот Дж., Добер П. Симметрия в физике. Том 1. М. — Мир, 1983, 364 стр.
- [20] Chechin G. M. Computers and group-theoretical methods for studying structural phase transitions // Computers & Mathematics with Applications. 1989. V. 17. P. 255–278.