

Федеральное агентство по образованию
Государственное образовательное учреждение высшего профессионального
образования «Нижегородский государственный университет
им. Н.И. Лобачевского»

Национальный проект «Образование»
Инновационная образовательная программа ННГУ. Образовательно-научный центр
«Информационно-телекоммуникационные системы: физические основы и
математическое обеспечение»

Флах С.Г., Канаков О.И.

Формирование бризерных структур: приложения к биомолекулам

*Учебно-методические материалы по программе повышения
квалификации «Хранение и обработка информации
в биологических системах»*

Нижний Новгород

2007

*Учебно-методические материалы подготовлены в рамках
инновационной образовательной программы ННГУ: Образовательно-
научный центр «Информационно-телекоммуникационные
системы: физические основы и математическое обеспечение»*

Флах С.Г., Канаков О.И. Формирование бризерных структур: приложения к биомолекулам. Учебно-методический материал по программе повышения квалификации «Хранение и обработка информации в биологических системах». Нижний Новгород, 2007, 100 с.

Аннотация *В последнее десятилетие в теоретической и математической физике возрос интерес к дискретным бризерам — пространственно-локализованным колебательным решениям в нелинейных решеточных системах. Дискретный бризер представляет из себя долгоживущее возбуждение на одном или нескольких узлах решетки, энергия которого существенно превышает среднюю энергию, приходящуюся на узел. Условия, определяющие возможность генерации дискретных бризеров, носят достаточно общий характер, поэтому следует ожидать их существенного влияния на процессы во многих реальных системах, в том числе, в биологических макромолекулах — ДНК, белках и др., что представляет существенный интерес с точки зрения молекулярной биологии. В данном учебно-методическом материале рассматриваются основные общие свойства и методы численного и аналитического исследования бризерных решений в различных решеточных системах.*

Оглавление

Введение	3
0.1 Нелинейность и пространственная дискретность	5
0.2 Периодичность локализованных решений	9
0.3 Примеры дискретных бризеров	11
1 Основные свойства дискретных бризеров	15
1.1 Пространственная локализация	15
1.2 Устойчивость дискретных бризеров	20
1.3 Пороги энергии дискретных бризеров	23
1.4 Дискретные бризеры в диссипативных системах	28
1.4.1 Отыскание бризеров в диссипативных системах	29
1.4.2 Устойчивость бризеров в диссипативных системах	30
2 Получение и исследование дискретных бризеров в численных экс- периментах	33
2.1 Долгоживущие возбуждения и приближение с сокращенным числом степеней свободы	33
2.2 Отыскание дискретных бризеров как точных решений	40
2.2.1 Метод Фурье	40
2.2.2 Метод седловых точек для систем с разделяющимися перемен- ными	45

2.2.3	Метод гомоклинических траекторий отображения в системах с разделяющимися переменными	47
2.2.4	Метод Ньютона в фазовом пространстве	49
2.2.5	Метод наискорейшего спуска в фазовом пространстве	53
2.2.6	Симметрии	54
2.3	Дискретные бризеры в переходных процессах и тепловом равновесии .	55
2.3.1	Дискретные бризеры в переходных процессах	55
2.3.2	Бризеры в тепловом равновесии	59
3	Квантовые бризеры	75
3.1	Понятие квантового бризера	75
3.2	Квантовый димер	80
3.3	Квантовый тример	87
	Заключение	96
	Список литературы	97

Введение

В последнее десятилетие в теоретической и математической физике возрос интерес к дискретным бризерам — пространственно-локализованным колебательным решениям в нелинейных решеточных системах. Дискретный бризер представляет из себя долгоживущее возбуждение на одном или нескольких узлах решетки, энергия которого существенно превышает среднюю энергию, приходящуюся на узел. Условия, определяющие возможность генерации дискретных бризеров, носят достаточно общий характер, поэтому следует ожидать их существенного влияния на процессы во многих реальных системах, в том числе, в биологических макромолекулах — ДНК, белках и др., что представляет существенный интерес с точки зрения молекулярной биологии.

В частности, благодаря возможности возникновения таких высокоэнергетических возбуждений на некоторых элементах решетки вероятность возникновения пространственно-локализованных процессов, зависящих от энергии (например, разрыва химических связей в молекуле), может существенно повыситься по сравнению со случаем без локализации энергии при прочих равных условиях.

В данном учебно-методическом материале рассматриваются основные общие свойства и методы численного и аналитического исследования бризерных решений в пространственно-распределенных дискретных системах, то есть, решетках. Такие системы инвариантны относительно преобразования пространственного сдвига, что подразумевает отсутствие пространственного беспорядка или дефектов. Повседневный опыт подсказывает, что всякое изначально локализованное возмущение с те-

чением времени распространится по всей решеточной системе (подобно тому, как распространяются по всей водной поверхности волны от брошенного в воду камня). Что может помешать процессу такой делокализации? Оказывается, достаточно двух предпосылок. Первая из них — это вышеупомянутая дискретность системы, вторая — нелинейность уравнений динамики системы. При выполнении этих условий возможно существование такого относительно недавно обнаруженного класса решений, как *дискретные бризеры*, также называемые *внутренне-локализованными модами* в физике твердого тела или *дискретными солитонами* в нелинейной оптике. Эти точные решения, существующие в огромном количестве разнообразных нелинейных решеточных моделей, характеризуются периодичностью во времени и локализацией в пространстве, независимо от размера решетки (который, как правило, предполагается большим), от пространственной размерности решетки, и (в широких пределах) независимо от конкретного вида нелинейного взаимодействия в решетке. Хотя обычно говорят о дискретных бризерах в *консервативных гамильтоновых* системах, возможны также обобщения на случаи неавтономных систем с периодической внешней силой, диссипативных систем (этот случай будет рассмотрен в данном пособии), и даже квантовых систем.

Нелинейность присуща математическим моделям многих физических систем. Дискретность также встречается достаточно часто. В качестве примера можно привести кристаллические решетки и полимерные молекулы, а также многие искусственные системы, такие как бозе-эйнштейновские конденсаты в оптических решетках, сети связанных джозефсоновских контактов, связанные нелинейные оптические волноводы, микро- и наномеханические системы — все эти системы обладают решеточной структурой. Таким образом, понимание механизмов локализации энергии в нелинейных решетках весьма актуально с точки зрения различных областей физики, химии, биологии и механики.

Первое упоминание о локализованных возбуждениях в одномерных цепочках свя-

занных ангармонических осцилляторов встречается в работе А.А. Овчинникова [1] 1969 года. По прошествии значительного времени А. Сиверс (A. Sievers) и С. Такено (S. Takeno) вернулись к этой проблеме в 1988 году, обнаружив локализованные возбуждения в знаменитой модели Ферми-Паста-Улама [2, 3, 4]. В начале 1990-х годов большое количество исследовательских коллективов приступили к детальному математическому исследованию таких локализованных решений, благодаря чему за прошедшее время был достигнут значительный прогресс в построении их строгой теории (см., например, обзор [5]). Отметим, что с 1998 года ведутся экспериментальные исследования локализованных возбуждений в физических системах различной природы, которые подтвердили плодотворность идеи о локализации энергии вследствие дискретности и нелинейности. Далее будут рассмотрены основные аспекты проблемы локализации энергии, в том числе, для случая диссипативных систем.

0.1 Нелинейность и пространственная дискретность

Проанализируем характер совместного влияния нелинейности и дискретности на пространственную локализацию дискретного бризера, используя простые оценки. Для этого рассмотрим модель в виде цепочки связанных нелинейных осцилляторов, каждый с одной степенью свободы, которая описывается гамильтонианом

$$H = \sum_n \left[\frac{1}{2} p_n^2 + V(x_n) + W(x_n - x_{n-1}) \right]. \quad (1)$$

Здесь целочисленный индекс n — это номер узла решетки (возможно, бесконечной), а x_n и p_n — это канонически сопряженные координата и импульс для степени свободы, связанной с узлом n . Потенциал осциллятора V и потенциал взаимодействия W удовлетворяют условию $V'(0) = W'(0) = 0$, $V''(0), W''(0) \geq 0$. Тогда точка $x_n = p_n = 0$ — это состояние равновесия типа центр. Уравнения движения системы имеют вид

$$\dot{x}_n = p_n, \quad \dot{p}_n = -V'(x_n) - W'(x_n - x_{n-1}) + W'(x_{n+1} - x_n). \quad (2)$$

Линеаризуя уравнения движения в окрестности состояния равновесия, получим систему связанных линейных дифференциальных уравнений, решения которой имеют вид бегущих гармонических волн малой амплитуды:

$$x_n(t) \sim e^{i(\omega_q t - qn)}, \quad \omega_q^2 = V''(0) + 4W''(0) \sin^2\left(\frac{q}{2}\right). \quad (3)$$

Эти волны характеризуются волновым числом q и соответствующей частотой ω_q . Всевозможные частоты распространяющихся волн заполняют область действительных значений, называемую линейным спектром (иначе говоря, фононной зоной — в физике твердого тела, или полосой пропускания — в радиотехнике). В силу решеточной структуры системы, частота ω_q зависит периодически от q и всегда *ограничена сверху* по абсолютной величине. Наибольшая (дебаева) частота гармонических волн малой амплитуды равна

$$\omega_\pi = \sqrt{V''(0) + 4W''(0)}.$$

Примеры вида дисперсионных кривых ω_q приведены на рис. 1. В зависимости от вида потенциала $V(x)$, они могут иметь характер акустических или оптических (при $V''(0) = 0$ или $V''(0) \neq 0$, соответственно). В первом случае линейный спектр покрывает интервал $-\omega_\pi \leq \omega \leq \omega_\pi$, включающий $\omega_{q=0} = 0$. Во втором случае имеется запрещенная зона $|\omega_q| < \omega_0 = \sqrt{V''(0)}$. Линейные волны характеризуются групповой скоростью v_g и фазовой скоростью v_{ph} . Групповая скорость

$$v_g(q) = d\omega_q/dq$$

— это периодическая функция волнового числа q , определяющая скорость распространения узкополосного волнового пакета с центральным волновым числом q . На краю линейного спектра $v_g = 0$. Групповая скорость ограничена по модулю. Фазовая скорость

$$v_{ph} = \omega/q$$

— это непериодическая колеблющаяся функция q . В случае оптического спектра

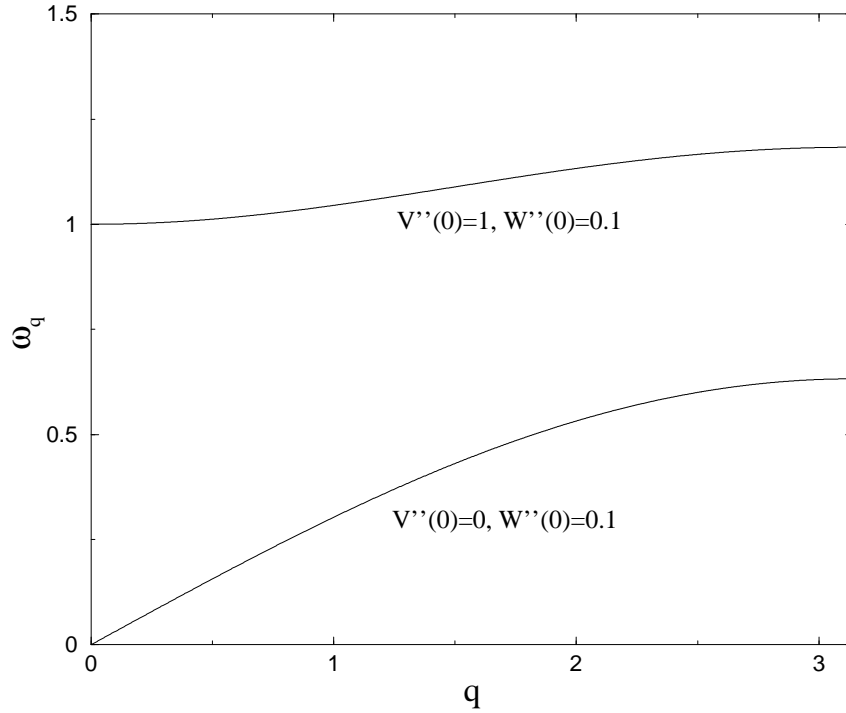


Рис. 1: Дисперсионные кривые гармонических волн малой амплитуды для модели (1).

область значений фазовой скорости занимает всю действительную ось, поскольку $\omega_{q=0} \neq 0$. Для акустического спектра она ограничена по модулю $|v_{ph}| \leq v_g(q=0)$.

Линеаризованные уравнения движения не описывают возмущений большой амплитуды. Подобно случаю одиночного нелинейного осциллятора, частота периодических во времени решений зависит от их амплитуды и, таким образом, может располагаться вне пределов линейного спектра. Допустим, что существует периодическое во времени и локализованное в пространстве решение уравнений (2) — *дискретный бризер* $\hat{x}_n(t + T_b) = \hat{x}_n(t)$, период которого равен $T_b = 2\pi/\Omega_b$. В силу периодичности решения, его можно разложить в ряд Фурье

$$x_n(t) = \sum_k A_{kn} e^{ik\Omega_b t} . \quad (4)$$

Коэффициенты разложения, вследствие предположения, также локализованы по пространственному индексу.

$$A_{k,|n| \rightarrow \infty} \rightarrow 0 . \quad (5)$$

Исследуем асимптотику хвостов дискретного бризера, где амплитуда решения мала. Для этого подставим разложение (4) в уравнения движения (2) и линеаризуем полученные алгебраические уравнения для коэффициентов разложения. Получим тогда следующие линейные алгебраические уравнения:

$$k^2\Omega_b^2 A_{kn} = V''(0)A_{kn} + W''(0)(2A_{kn} - A_{k,n-1} - A_{k,n+1}) . \quad (6)$$

Если $k\Omega_b = \omega_q$, то решения уравнений (6) имеют вид

$$A_{k,n} = c_1 e^{iqn} + c_2 e^{-iqn} .$$

Ненулевые коэффициенты $A_{k,n}$ будут тогда осциллировать по пространственному индексу без спада, что противоречит изначальному предположению. Если, однако,

$$k^2\Omega_b^2 \neq \omega_q^2 \quad (7)$$

для любого целого k , то общее решение уравнений (6) дается выражением

$$A_{k,n} = c_1 \kappa_n + c_2 \kappa_{-n} ,$$

где κ — это действительное число, зависящее от q , Ω_b и k . Такие решения спадают в пространстве по экспоненте в том или другом направлении, в зависимости от того, какой из коэффициентов $c_{1,2}$ отличен от нуля. Чтобы условие (7) могло быть выполнено при любом целом k хотя бы для одного значения частоты Ω_b , необходимо потребовать ограниченности частотного спектра ω_q по модулю. Именно в силу этого требования необходима пространственная дискретность системы. Линейные спектры непрерывных полевых уравнений, как правило, не ограничены. В этом случае неизбежны резонансы высоких гармоник решения с линейным спектром системы. Условие нерезонансности (7) является (почти) необходимым условием существования пространственно-локализованных, периодических во времени решений в гамильтоновых решетках [6, 7].

Приведенный анализ может быть обобщен на другие типы решеточных систем, например, с нелокальными связями, с двумя и более степенями свободы на узел

решетки, двумерные и трехмерные решетки и т. д. Условие нерезонансности (7) носит, таким образом, характер универсального, отражая ключевую роль дискретности и нелинейности для существования дискретных бризеров.

Как и любое правило, условие нерезонансности имеет исключения. В случае непрерывных гамильтоновых систем это возможно, если система или решение обладает дополнительными свойствами симметрии. Хотя это и может представлять интерес для определенных приложений, как правило, требование дополнительных симметрий ограничивает круг возможных решений. В этом случае потеря симметрии приводит к потере локализации, в отличие от нелинейных решеточных систем, где никакие дополнительные требования симметрии не накладываются.

Хотя в нелинейной решетке резонансы решения с линейными волнами устраняются наиболее естественным образом, возможны также и другие варианты. Например, можно рассмотреть уравнения, не содержащие линейных членов, или хотя бы взаимодействие без линейных членов, что приводит к вырожденному линейному спектру — неважно, для решетки или непрерывной системы. В диссипативных системах получение локализованного решения вообще не составляет проблемы, однако при этом необходима подкачка энергии в систему.

0.2 Периодичность локализованных решений

В предыдущем разделе было показано, как совместное действие дискретности и нелинейности приводит к периодическим пространственно-локализованным решениям — дискретным бризерам. Что можно сказать о существовании других видов локализованных решений с динамикой, отличной от периодической во времени? Для квазипериодического решения с N несоизмеримыми частотами $\Omega_1, \Omega_2, \dots, \Omega_N$ нерезонансное условие (7) переходит в [7]

$$\{k_1\Omega_1 + k_2\Omega_2 + \dots + k_N\Omega_N\}^2 \neq \omega_q^2 \quad (8)$$

где k_i — произвольные целые числа. Другими словами, ни какая-либо из основных частот $\Omega_1, \Omega_2, \dots, \Omega_N$, ни какая-либо из их (в том числе, перекрестных) гармоник не должны резонировать с линейным спектром. Однако, любая пара несоизмеримых частот Ω_1 и Ω_2 , что подразумевает иррациональное отношение между ними, породит бесконечное число пар k_1, k_2 , для которых нерезонансное условие (8) будет нарушено [7]. Таким образом, в общем случае пространственно-локализованных квазипериодических решений в безграничных решеточных системах не существует.

Другой вопрос заключается в возможности существования движущихся дискретных бризеров. Достаточно общее определение движущегося дискретного бризера подразумевает локализованное решение, перемещающееся на n пространственных периодов решетки в какую-либо сторону за μ периодов внутренних колебаний, причем μ в общем случае иррационально. В одномерной цепочке такой движущийся дискретный бризер представляет собой решение вида

$$x_n(t) = \phi(\xi, t), \quad \xi = n - Vt \quad (9)$$

$$\phi(\xi, t + T_b) = \phi(\xi, t), \quad \phi(\xi \rightarrow \pm\infty, t) \rightarrow 0. \quad (10)$$

Детальный анализ возможных резонансов для таких решений был проведен в [8, 9]. Анализ показал, что необходимо избежать резонансов скорости V с фазовыми скоростями v_{ph} гармонических возмущений малой амплитуды (спектр которых иногда может отличаться от спектра системы, линеаризованной в окрестности состояния равновесия). Основным результатом заключается в том, что таких резонансов нельзя избежать, а значит, движущихся дискретных бризеров не должно существовать в нелинейных решетках общего вида. Таким образом, существованию движущихся дискретных бризеров препятствуют резонансы с фазовыми скоростями гармонических волн. В случае диссипативных систем соображения о резонансах теряют силу, а значит, можно говорить о квазипериодических и даже движущихся дискретных бризерах.

0.3 Примеры дискретных бризеров

Приведем примеры дискретных бризеров для различных решеточных систем. Рассмотрим цепочку (1) с потенциалами

$$V(x) = x^2 + x^3 + \frac{1}{4}x^4, \quad W(x) = 0.1x^2. \quad (11)$$

Спектр ω_q носит характер оптического и приведен на рис. 2. Дискретные бризеры могут иметь частоты Ω_b , лежащие как выше, так и ниже линейного спектра. В силу симметрии уравнений (2) относительно обращения времени, будем искать дискретный бризер в классе решений, также обратимых во времени. Это означает, что существует момент времени, когда все скорости обращаются в нуль. Примем этот момент за начало отсчета времени. Будем тогда искать координаты частиц $x_n(t=0)$, полагая $\dot{x}_n(t=0) = 0$. Эти значения координат могут быть найдены численно с высокой точностью с использованием метода точечных отображений Пуанкаре (периодическая орбита соответствует неподвижной точке отображения) для заданной наперед частоты решения Ω_b .

Примеры найденных профилей $x_n(0)$ для двух различных частот Ω_b (одна из которых выше, другая — ниже линейного спектра) приведены на врезках на рис. 2. Значения частот отмечены стрелками. Для каждой из частот были найдены два различных решения из бесконечного их количества. Высокочастотные дискретные бризеры ($\Omega_b \approx 1.66$) имеют большую энергию. Соседние частицы в таких решениях двигаются в противофазе. Низкочастотные дискретные бризеры ($\Omega_b \approx 1.26$) имеют меньшую энергию, все частицы двигаются в фазе.

На рис. 3 показаны два дискретных бризера в системе Ферми-Паста-Улама, представляющей из себя цепочку равных масс, связанных нелинейными пружинами: $V(x) = 0$, $W(x) = \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{4}x^4$, спектр которой носит характер акустического. Частота обоих найденных решений $\Omega_b = 4.5$. Снова приводятся значения x_n в момент, когда все скорости обращаются в нуль. На врезке построены графики растяжений пружин

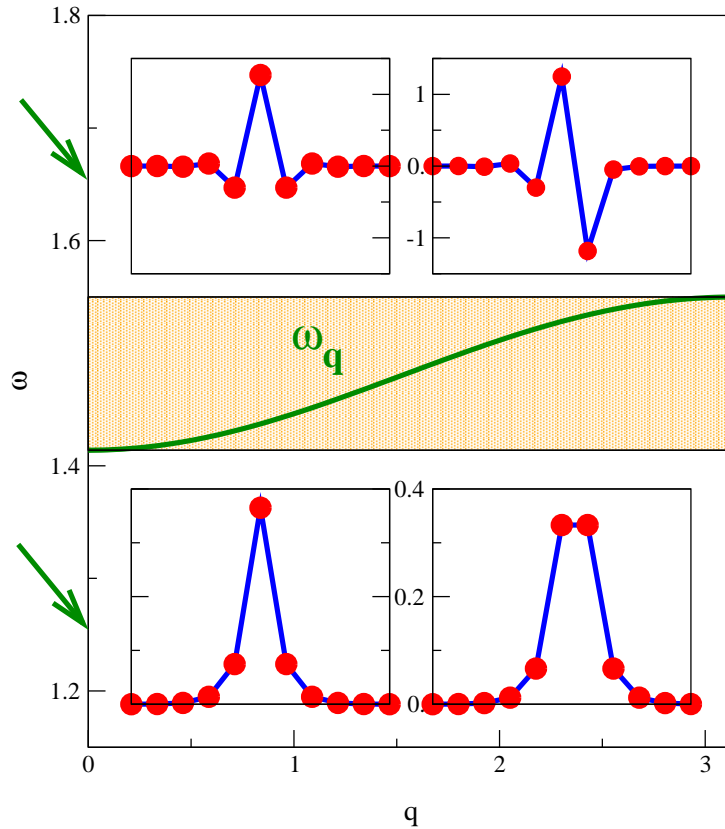


Рис. 2: Дисперсионная кривая линейризованной цепочки осцилляторов с потенциалом (11). Отмечена зона линейного спектра. Частоты найденных дискретных бризеров указаны стрелками и лежат за пределами линейного спектра. На врезках — снимки координат частиц цепочки для найденных дискретных бризеров в момент, когда все скорости обращаются в нуль [10].

$u_n = x_n - x_{n-1}$ в логарифмическом масштабе. Как и предсказывалось, решения локализованы в пространстве экспоненциально.

Наконец, приведем примеры дискретные бризеры в *двумерной* квадратной решетке локально связанных нелинейных осцилляторов. Уравнения движения этой системы имеют вид

$$\ddot{x}_{i,j} = k(x_{i+1,j} + x_{i-1,j} - 2x_{i,j}) + k(x_{i,j+1} + x_{i,j-1} - 2x_{i,j}) - x_{i,j} - x_{i,j}^3 \quad (12)$$

что соответствует потенциалу осциллятора $V(x) = \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{4}x^4$. На рис. 4 приведены координаты осцилляторов в момент, когда все скорости обращаются в нуль, для трех различных частот решения Ω_b при $k = 0.05$ [12]. Во всех трех случаях соседние осцилляторы двигаются в противофазе.

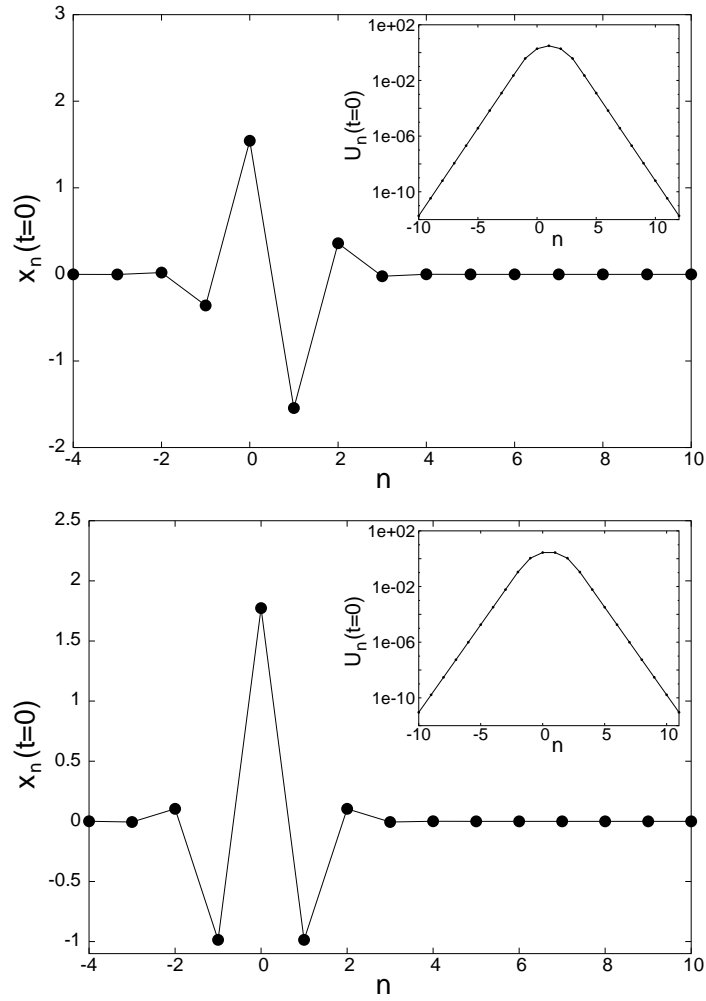


Рис. 3: Дискретные бризеры в цепочке Ферми-Паста-Улама (см. текст) [11].

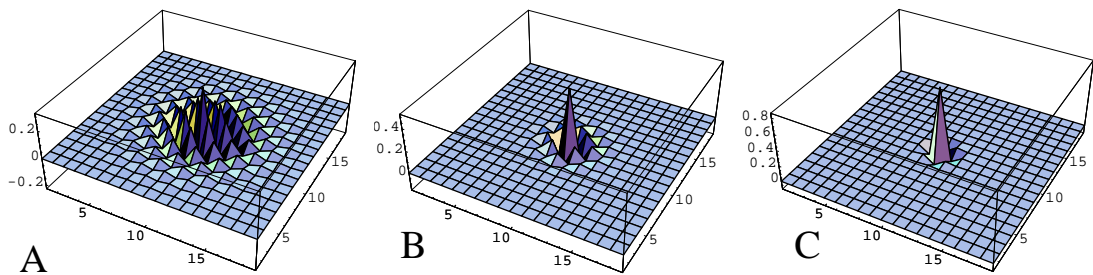


Рис. 4: Снимки координат частиц для дискретных бризеров в двумерной решетке (12) при $k = 0.05$ в момент, когда все скорости обращаются в нуль [12]. (A) $\Omega_b = 1.188$; (B) $\Omega_b = 1.207$; (C) $\Omega_b = 1.319$.

Глава 1

Основные свойства дискретных бризеров

1.1 Пространственная локализация

Дискретные бризеры — типичный класс решений в нелинейных решетках. Вопрос о свойствах их локализации в пространстве разделяется на две проблемы: профиль решения в окрестности его центра и асимптотика спада его хвостов. Первая проблема весьма сложна, поскольку требует исследования исходных нелинейных уравнений. Решение второй проблемы облегчается тем обстоятельством, что амплитуды колебаний в хвостах дискретного бризера малы. Следовательно, асимптотика хвостов должна корректно описываться линейным приближением. Возможен, однако, учет и нелинейных поправок.

Рассмотрим для определенности модель с одной степенью свободы на узел (легко получить и обобщение на более сложные случаи). Гамильтониан системы имеет вид

$$H = \sum_l \left[\frac{1}{2} P_l^2 + V(X_l) + \sum_{l'} W_{l,l'} (X_l - X_{l'}) \right]. \quad (1.1)$$

Система представляет собой гиперкубическую решетку размерности d . Индекс решетки l — это вектор, состоящий из d целочисленных компонент. Потенциал взаимо-

действия обладает свойством $W_{l,l'} = W_{l+m,l'+m}$, то есть, модель инвариантна относительно пространственного сдвига. Потенциальные функции вместе со своими первыми производными обращаются в нуль в начале координат. Благодаря дискретности, спектр частот линеаризованной системы ω_q ограничен по абсолютной величине.

Рассмотрим решение в виде

$$X_l(t) = \sum_k A_{kl} e^{ik\Omega_b t} . \quad (1.2)$$

Здесь номер Фурье-компоненты k - целочисленный скаляр независимо от размерности решетки d . Дискретный бризер локализован в пространстве, что подразумевает

$$A_{k,|l|\rightarrow\infty} \rightarrow 0 . \quad (1.3)$$

Допустим, что потенциальные функции имеют ненулевые вторые производные в начале координат, то есть, $V''(0) = v_2 \neq 0$ и $W_{0,l} = w_{0,l} \neq 0$ для некоторого l . Тогда можно линеаризовать алгебраические уравнения для коэффициентов A_{kl} :

$$k^2 \Omega_b^2 A_{kl} = v_2 A_{kl} + \sum_{l'} w_{l,l'} (A_{kl} - A_{kl'}) . \quad (1.4)$$

Поскольку уравнения для коэффициентов разных гармоник после линеаризации оказываются несвязанными, их можно решать по отдельности. Необходимым условием пространственной локализации k -й Фурье-компоненты является отсутствие резонанса: $k\Omega_b \neq \omega_q$. Спадание k -й компоненты в пространстве задается тогда функцией Грина решетки [13]:

$$G_\lambda(l) = \int_{1.BZ} \frac{\cos(ql)}{\omega_q^2 - \lambda} d^d q , \quad \lambda = k^2 \Omega_b^2 . \quad (1.5)$$

Здесь интеграл берется по первой зоне Бриллюэна во взаимном пространстве волновых векторов q . Напомним, что дисперсионное соотношение ω_q периодически по q , и первая зона Бриллюэна как раз охватывает один его период в многомерном пространстве. Если зафиксировать направление вектора l и менять его абсолютное значение, то уравнение (1.5) даст коэффициенты Фурье для периодической функции

$(\omega_q^2 - \lambda)^{-1}$. Значит, спадание амплитуды k -й гармоники в пространстве характеризуется асимптотикой коэффициентов соответствующего ряда Фурье, а они, в свою очередь, зависят от аналитичности разлагаемой в ряд функции.

Будем называть взаимодействие элементов решетки близкодействующим, если соответствующая дисперсионная характеристика ω_q^2 — аналитическая функция в расширенном пространстве волновых векторов q , то есть, если функция и все ее производные в любой точке q существуют и конечны. Таким свойством обладает, в частности, локальное взаимодействие, а также любое взаимодействие, действующее на конечном расстоянии: $w_{0,l} = 0$ при $|l| > r$, где $r > 0$. Кроме того, к близкодействующим относятся потенциалы взаимодействия, сила которых экспоненциально спадает с расстоянием [14]: $w_{0,l} \sim e^{-|l|/r}$ for $|l| \gg r$. Во всех этих случаях выражение $(\omega_q^2 - \lambda)^{-1}$, входящее в уравнение (1.5) — аналитическая периодическая функция q . Значит, коэффициенты ее ряда Фурье, а следовательно, и хвосты дискретного бримера имеют экспоненциально спадающую асимптотику [15]. Показатель экспоненты зависит от $\lambda = k^2 \Omega_b^2$. Длина локализации будет тем больше, чем ближе частота гармоники $k\Omega_b$ окажется к краю линейного спектра ω_q .

На врезках на рис. 3 продемонстрирован экспоненциальный характер локализации для двух дискретных бримеров в одномерной цепочке Ферми-Паста-Улама с локальным взаимодействием. Сравнение численно найденной длины локализации с теоретическим предсказанием, полученным из (1.5), было проведено для различных одномерных моделей в [7, 16] и обсуждалось также в [5].

Приведем пример дискретного бримера в кубической трехмерной решетке типа дискретного нелинейного уравнения Шредингера с локальным взаимодействием

$$\dot{\Psi}_l = i(\Psi_l + |\Psi_l|^2 \Psi_l + 0.1 \sum_{m \in N_l} \Psi_m), \quad (1.6)$$

где N_l обозначает множество ближайших соседей узла l . Будем искать решение вида $\Psi_l = A_l e^{i\Omega_b t}$. Полученная система алгебраических уравнений может быть решена относительно амплитуд A_l , причем, в силу обратимости искомого решения во времени,

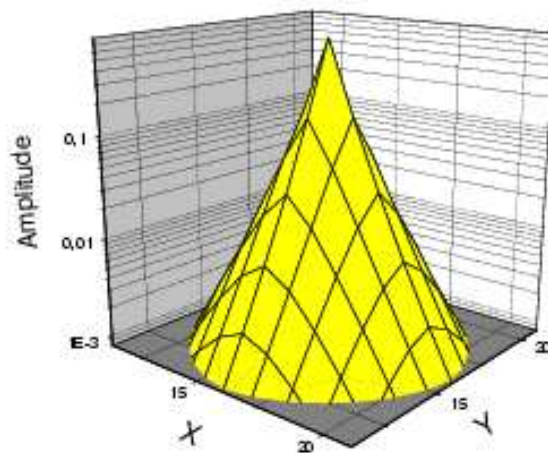
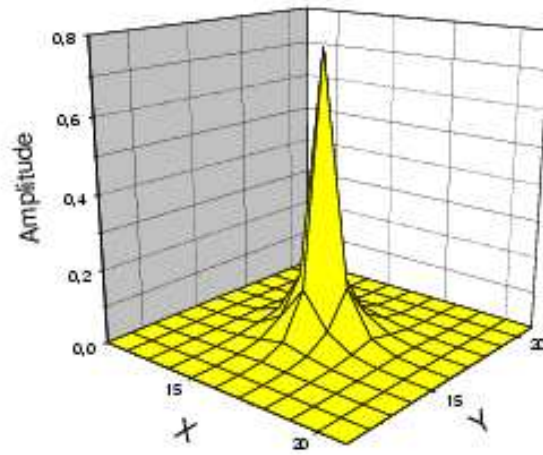


Рис. 1.1: Пространственное распределение амплитуд для дискретного бризера в трехмерной решетке типа дискретного нелинейного уравнения Шредингера (1.6) размера $N = 31 \times 31 \times 31$. Представлено распределение амплитуд на секущей плоскости $(x; y)$, проходящей через центр бризера. Слева — амплитуды в линейном масштабе, справа — то же решение в логарифмическом масштабе [17].

можно ограничиться действительными значениями амплитуд [17]. На рис. 1.1) приведено рассчитанное пространственное распределение амплитуд A_l для дискретного бризера с центром в узле с координатами $l = (16, 16, 16)$ в решетке размера $31 \times 31 \times 31$ (построена зависимость амплитуд от координат x, y в плоскости $z = 16$, содержащей центр бризера).

Отметим, что дискретный бризер сильно локализован на нескольких узлах решетки (рис. 1.1), слева). То же решение, представленное в логарифмическом масштабе (рис. 1.1), справа) дает на графике коническую поверхность, как и следовало ожидать, исходя из предсказанной экспоненциальной локализации в пространстве.

Будем называть взаимодействие дальнедействующим, если соответствующая дисперсионная характеристика ω_q^2 — это неаналитическая функция в расширенном пространстве волновых векторов q , то есть, какие-либо из ее производных в какой-либо точке q не существуют или обращаются в бесконечность. Этот случай имеет место, например, если сила взаимодействия спадает с расстоянием по алгебраическому закону: $w_{0,l} \sim |l|^{-s}$, где s — положительная величина. В системах с таким взаимодействием дискретные бризеры также могут существовать, но не могут быть локализованы в пространстве по экспоненте. Неаналитичность функции ω_q^2 непосредственно приводит к степенной асимптотике коэффициентов Фурье (1.5) и к такой же асимптотике для хвостов дискретного бризера. Как показано в [18], в этом случае имеет место сложный закон спада амплитуд в пространстве, характеризующийся наличием выраженного перехода от экспоненциального спада к степенному на некотором удалении от центра бризера.

В случае чисто нелинейного взаимодействия [19, 20, 7, 21, 22, 23, 24, 25] асимптотика хвостов дискретного бризера является суперэкспоненциальной, то есть,

$$\ln |\ln |A_n|| \approx n \ln(2m - 1) . \quad (1.7)$$

Такие решения иногда называют квазикompактными.

В литературе также имеются исследования, посвященные резонансам с голдсто-

уновскими модами [26] и нелинейным поправкам [16].

1.2 Устойчивость дискретных бризеров

Когда найдено решение, соответствующее дискретному бризеру, возникает важный вопрос о его устойчивости. Проблема заключается в характере эволюции малых возмущений $\epsilon_n(t)$ в окрестности решения $\hat{x}_n(t)$. Вообще говоря, следует ожидать, что динамика возмущения будет носить сложный характер, типичный для неинтегрируемых систем, что означает принципиальную трудность аналитического исследования. Однако, представление о характере эволюции достаточно малых возмущений можно получить, линеаризуя уравнения движения по $\epsilon_n(t)$ в окрестности решения $\hat{x}_n(t)$ [27, 28]:

$$\ddot{\epsilon}_n = - \sum_m \frac{\partial^2 H}{\partial x_m \partial x_n} \Big|_{\{\hat{x}_l(t)\}} \epsilon_m, \quad (1.8)$$

где H — гамильтониан системы.

Отметим, что устойчивость решения в линейном приближении не означает его устойчивости в исходной системе, а предполагает лишь отсутствие экспоненциального роста малых возмущений.

В рамках линейного приближения по возмущению $\epsilon_n(t)$, само решение входит в систему как параметрическое воздействие, периодическое во времени, и линеаризованная задача (1.8) соответствует нестационарному гамильтониану $\tilde{H}(t)$:

$$\tilde{H}(t) = \sum_n \left[\frac{\pi_n^2}{2} + \frac{1}{2} \sum_m \frac{\partial^2 H}{\partial x_n \partial x_m} \Big|_{\{\hat{x}_l(t)\}} \epsilon_n \epsilon_m \right], \quad (1.9)$$

$$\dot{\epsilon}_n = \frac{\partial \tilde{H}}{\partial \pi_n}, \quad \dot{\pi}_n = - \frac{\partial \tilde{H}}{\partial \epsilon_n}. \quad (1.10)$$

Специфическая структура гамильтониана \tilde{H} приводит к закону сохранения $\dot{I} = 0$ [27, 29] для симплектического произведения

$$I = \sum_n [\epsilon_n(t) \pi_n'(t) - \epsilon_n'(t) \pi_n(t)] \quad (1.11)$$

любых двух решений $y = \{\epsilon_n, \pi_n\}$ и $y' = \{\epsilon'_n, \pi'_n\}$. Выражение для \dot{I} может быть записано в виде скалярного произведения

$$I = (Jy, y'), \quad (1.12)$$

где J — матрица размера $2N \times 2N$

$$J = \begin{pmatrix} 0 & I \\ -I & 0 \end{pmatrix}, \quad (1.13)$$

а I — единичная матрица размера $N \times N$. Сохранение симплектического произведения I означает, что матрица эволюции $U(t)$, задающая линейное отображение малых возмущений

$$\begin{pmatrix} \epsilon(t) \\ \pi(t) \end{pmatrix} = U(t) \begin{pmatrix} \epsilon(0) \\ \pi(0) \end{pmatrix}, \quad (1.14)$$

является симплектической:

$$U^T J U = J. \quad (1.15)$$

В силу периодичности во времени всех коэффициентов в правой части уравнения (1.8), характер динамики малого возмущения $\epsilon_n(t)$ определяется матрицей Флоке $\mathcal{F} \equiv U(T_b)$, задающей линейное отображение малых возмущений на одном периоде решения T_b . Таким образом, проблема исследования устойчивости решения в линейном приближении сводится к отысканию собственных чисел и собственных векторов симплектической матрицы Флоке \mathcal{F} .

Условие линейной устойчивости решения предполагает, что все линейные возмущения должны оставаться ограниченными во времени. Это означает, что все собственные числа матрицы Флоке, иначе говоря, мультипликаторы периодической орбиты λ_ν должны располагаться на единичной окружности: $|\lambda_\nu| = 1$ (рис. 1.2, слева).

Все мультипликаторы типичного дискретного бризера могут быть разделены на две группы, соответствующие пространственно-локализованным и пространственно-делокализованным собственным векторам. Так как само решение экспоненциально локализовано, то делокализованные собственные вектора представляют собой

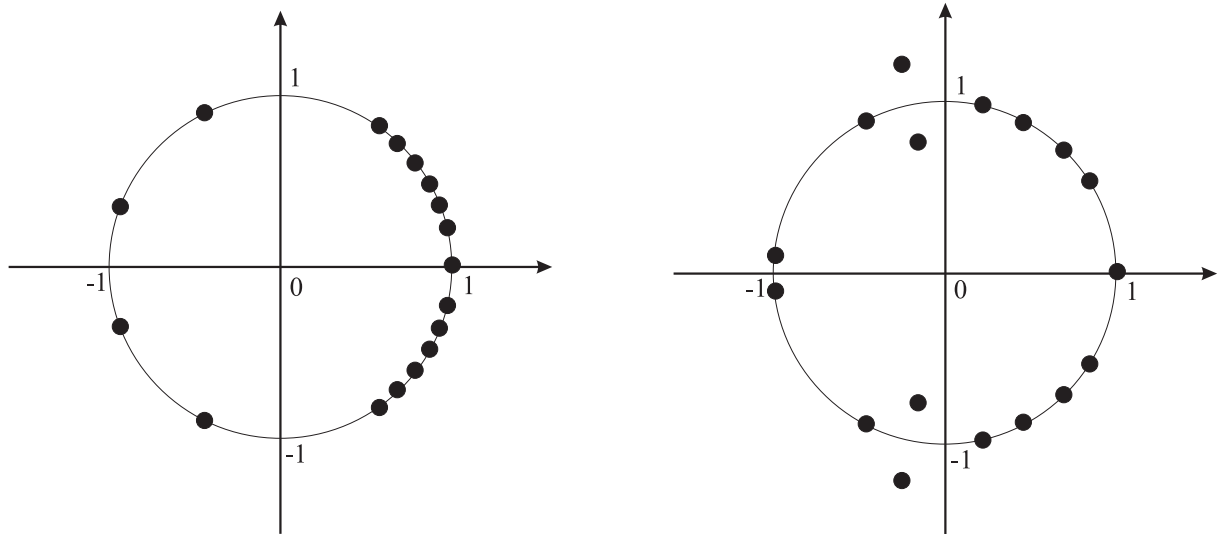


Рис. 1.2: Схема расположения мультипликаторов периодического решения, соответствующего дискретному бризеру в гамильтоновой системе, на комплексной плоскости. Мультипликаторы — закрашенные кружки, сплошная линия — единичная окружность. Слева: бризер, устойчивый в линейном приближении (все мультипликаторы располагаются на единичной окружности). Справа: неустойчивый дискретный бризер (две комплексно сопряженные пары мультипликаторов сошли с единичной окружности, одна из пар больше единицы по модулю). Группа близко расположенных мультипликаторов соответствует спектру возмущений типа гармонических волн (нелокализованных собственных векторов матрицы Флоке), отдельно расположенные мультипликаторы соответствуют локализованным собственным векторам.

локально-деформированные линейные моды решетки (стоячие волны). Их количество пропорционально размеру системы. Наоборот, количество собственных векторов (и собственных чисел), локализованных в пространстве, зависит только от параметров самого дискретного бризера и является конечным даже для бесконечной решетки.

В силу гамильтоновости системы, всегда имеются два мультипликатора, равных $+1$, соответствующих локализованным возмущениям [27, 8]: сдвигу вдоль фазовой траектории и изменению энергии решения (то есть, сдвигу вдоль семейства периодических орбит).

При изменении параметров модели или энергии решения, мультипликаторы непрерывно изменяются, перемещаясь по комплексной плоскости. С единичной окружности мультипликатор может сойти только в результате «столкновения» с другим мультипликатором, тогда решение становится неустойчивым (рис. 1.2, справа).

В заключение заметим, что бифуркации фазовых траекторий, имеющие место при переходе от линейно устойчивого дискретного бризера к неустойчивому, могут быть достаточно сложными, что связано с неинтегрируемостью исследуемых систем.

1.3 Пороги энергии дискретных бризеров

Решения, соответствующие дискретным бризерам, существуют в виде однопараметрических семейств. Параметром может быть амплитуда колебаний (например, на том узле, где она максимальна), энергия E или частота решения Ω_b . Для большинства семейств дискретных бризеров в бесконечных решетках, амплитуда может быть сколь угодно малой. В пределе малой амплитуды, частота бризера Ω_b стремится к краю линейного спектра ω_q . Это происходит, поскольку нерезонансное условие $\omega_q/\Omega_b \neq 0, 1, 2, 3, \dots$ должно выполняться для всех решений семейства. В пределе малой амплитуды, решение должно приближаться к какому-либо решению линеаризованной системы, а значит, частота Ω_b должна приближаться к какой-то из соб-

ственных частот ω_q , но в то же время не должна совпадать ни с одной из них. Это возможно только в том случае, если частота бризера стремится к одной из граничных частот ω_E линейного спектра при стремлении амплитуды к нулю.

Для семейства нелинейных бегущих волн, переходящих в граничную моду линейного спектра в пределе малой амплитуды, зависимость частоты ω от амплитуды A имеет вид

$$|\omega - \omega_E| \sim A^z \quad (1.16)$$

для $A \rightarrow 0$, где показатель z зависит от вида нелинейности в гамильтониане (1.1), и может быть вычислен с использованием асимптотических методов [30].

Далее будем следовать ходу рассуждений, предложенному в [17]. Рассмотрим систему с близкодействующим потенциалом взаимодействия и оценим энергию дискретного бризера в пределе малой амплитуды. Определим амплитуду дискретного бризера как наибольшую амплитуду колебаний в решетке. Обозначим ее A_0 и положим без нарушения общности, что наибольшая амплитуда колебаний имеет место в узле с индексом $l = 0$. Амплитуда колебаний спадает в пространстве с удалением от центра бризера $l = 0$. Асимптотика спадания может быть оценена в рамках приближения сплошной среды для линеаризованной системы. Результат имеет вид

$$A_l \sim C F_d(|l|\delta) ,$$

где $|l|$ полагается большим, δ — показатель пространственной локализации, C — константа порядка A_0 , а F_d — функция, определяемая пространственной размерностью решетки

$$F_1(x) = e^{-x} , \quad F_3(x) = \frac{1}{x} e^{-x} , \quad (1.17)$$

$$F_2(x) = \int \frac{e^{-x\sqrt{1+\zeta^2}}}{\sqrt{1+\zeta^2}} d\zeta . \quad (1.18)$$

Чтобы оценить зависимость показателя пространственной локализации δ от частоты периодического решения Ω_b , которая близка к краю линейного спектра, необходимо установить поведение дисперсионной характеристики линейных волн ω_q вблизи

края спектра. В типичных случаях дисперсионная характеристика вблизи края спектра аппроксимируется квадратичной зависимостью

$$(\omega_E - \omega_q) \sim |q - q_E|^2 ,$$

где $\omega_E \neq 0$ — граничная частота линейного спектра, а q_E — соответствующий волновой вектор.

Аналитически продолжая эту зависимость на комплексную плоскость и заменяя $(q - q_E)$ на $i(q - q_E)$, придем к квадратичной зависимости для δ от частоты решения, лежащей за пределами линейного спектра:

$$|\Omega_b - \omega_E| \sim \delta^2 .$$

Наконец, учтем зависимость частоты бризера (или расстройки $|\Omega_b - \omega_E|$) от его амплитуды. Так как бризер в пределе малой амплитуды делокализуется, то можно использовать для оценки частоты выражение (1.16), изначально полученное для нелокализованных волн. Тогда получаем $|\Omega_b - \omega_E| \sim A_0^z$, откуда находим

$$\delta \sim A_0^{z/2} .$$

Оценим теперь зависимость энергии дискретного бризера от его (малой) амплитуды, заменяя сумму по решетке интегралом:

$$E_b \sim \frac{1}{2} C^2 \int r^{d-1} F_d^2(\delta r) dr \sim A_0^{(4-zd)/2} . \quad (1.19)$$

Это возможно, если бризер существует вплоть до сколь угодно малых амплитуд, и при этом амплитуды на отдельных узлах медленно меняются в пространстве.

Таким образом приходим к выводу, что если $d > d_c = 4/z$, то энергия бризера стремится к бесконечности с уменьшением амплитуды, если же $d < d_c$, то энергия стремится к нулю. Для $z = 2$ находим $d_c = 2$, что согласуется с известным результатом [31], где было продемонстрировано рождение дискретного бризера в результате бифуркации орбиты, соответствующей линейной моде на краю спектра. Отметим, что в случае $d = d_c$ в выражении (1.19) появится логарифмическая зависимость.

Из вышесказанного непосредственно следует, что для $d \geq d_c$ энергия дискретного бризера ограничена снизу некоторой ненулевой величиной. В самом деле, для любой ненулевой амплитуды решения энергия не может равняться нулю, а с приближением амплитуды к нулю энергия стремится к конечному пределу (при $d = d_c$) или к бесконечности (при $d > d_c$). Таким образом, для $d \geq d_c$ существует порог энергии дискретного бризера. Этот новый масштаб энергии определяется комбинацией коэффициентов разложения нелинейных составляющих потенциалов в (1.1).

Для $z = 2$ имеем $|\Omega - \omega_E| \sim \beta A^2$, и если средняя энергия на осциллятор $E \sim gA^2$, а показатель пространственной локализации δ задается соотношением $|\Omega_b - \omega_E| \sim \kappa \delta^2$, то порог энергии дискретного бризера E_{min} имеет порядок $\kappa g / \beta$. Заметим, что для трехмерной решетки бризер, имеющий минимальную энергию, локализован на пространственном масштабе порядка одного периода решетки, независимо от κ , g и β .

Вышеприведенные оценки подтверждаются большим количеством численных результатов. Для d -мерной модели типа дискретного нелинейного уравнения Шредингера (1.6) зависимость энергии дискретного бризера от амплитуды на центральном узле приведена на рис. 1.3 слева. Для $d = 2$ и 3 отчетливо наблюдается порог по энергии [17]. Бризер, соответствующий минимуму энергии при $d = 3$, изображен на рис. 1.1, где видна его сильная локализация в решетке.

Было также обнаружено, что пороги по энергии дискретного бризера имеют место и в одномерных системах, если старший нелинейный член в уравнениях движения имеет достаточно высокую степень. Покажем это на примере модифицированного дискретного нелинейного уравнения Шредингера с одним пространственным измерением $d = 1$:

$$\dot{\Psi}_l = i(\Psi_l + |\Psi_l|^{\mu-1} \Psi_l + C \sum_{m \in N_l} \Psi_m). \quad (1.20)$$

При изменении μ происходит переход от нулевого к ненулевому порогу по энер-

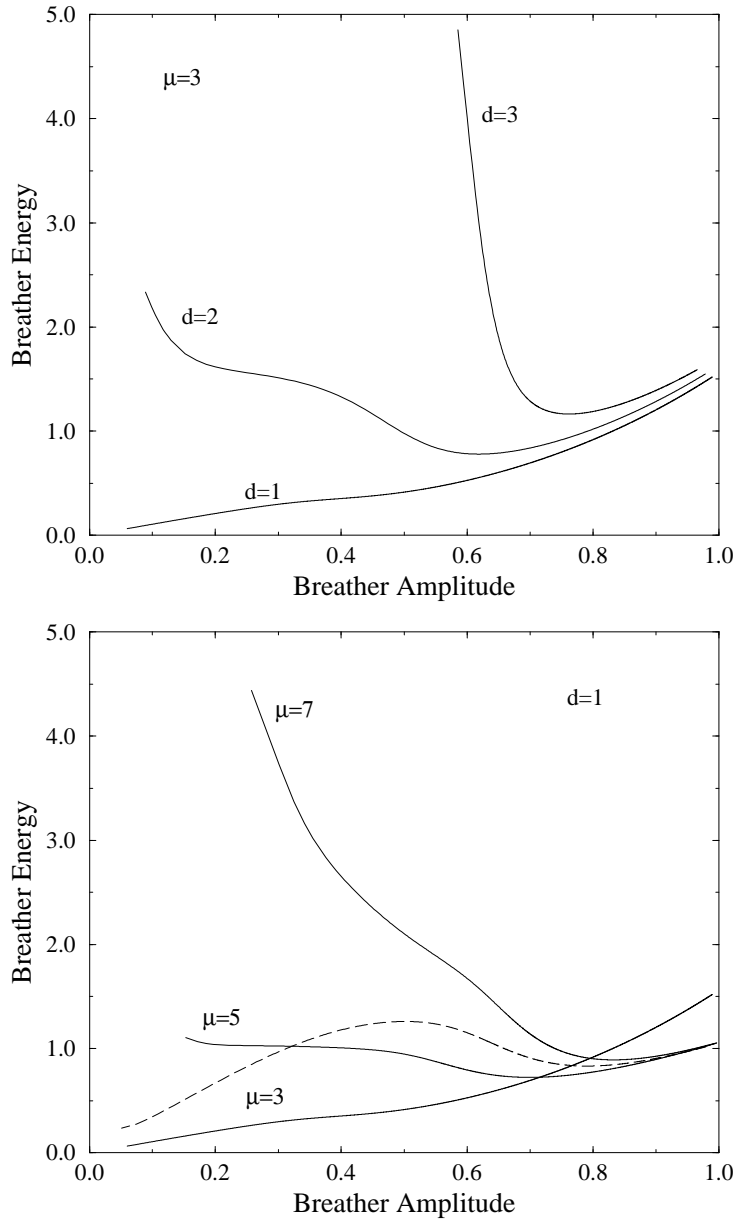


Рис. 1.3: Слева: энергия дискретного бризера в зависимости от амплитуды для дискретного нелинейного уравнения Шредингера для одно-, двух- и трехмерной решеток. Размер решетки для $d = 1, 2, 3$: $N=100$, $N=25^2$, $N=31^3$, соответственно. Справа: энергия дискретного бризера в зависимости от амплитуды для одномерного дискретного нелинейного уравнения Шредингера для трех значений показателя $\mu = 3, 5, 7$ (сплошные линии). Размер системы $N = 100$, параметр $C = 0.1$. Штриховая линия — для модифицированной системы (см. текст). См. тж. [17].

гии. На рис. 1.3 справа изображены численные результаты для $d = 1$ и $\mu = 3, 5, 7$, полностью согласующиеся с вышеприведенными соображениями. Даже одномерные решетки имеют положительный порог энергии дискретного бризера, если $\mu \geq 5$. Строгое исследование для любого μ было проведено в работе [32].

В модифицированной модели с дополнительным нелинейным членом $v_{\mu'} |\Psi_l|^{\mu'-1} \Psi_l$ могут наблюдаться сложные зависимости $E_b(A_0)$. Например, в случае $d = 1$, $\mu = 7$, $\mu' = 3$ и $v_{\mu'} = 0.1$, зависимость $E_b(A_0)$ (штриховая линия на рис. 1.3, справа) почти не отличается от рассмотренного ранее случая $v_{\mu'} = 0$ в области достаточно больших амплитуд A_0 и имеет локальный минимум при некотором ненулевом значении A_0 . Для малых A_0 , однако, энергия дискретного бризера спадает до нуля, и между нулем и минимумом имеется локальный максимум.

Другой пример — двумерная решеточная система (12), размерность которой совпадает с критической $d = d_c = 2$. В работе [12] был проведен расчет порогов энергии дискретного бризера в этой системе. Решения, изображенные на рис. 4, представляют дискретные бризеры с малой амплитудой (А), минимальной энергией (В) и большой амплитудой (С).

1.4 Дискретные бризеры в диссипативных системах

До сих пор обсуждались только дискретные бризеры в гамильтоновых решетках. В любом эксперименте, однако, имеет место некоторая диссипация. Вообще говоря, для наиболее корректного моделирования динамики открытой системы, необходим учет взаимодействия с термостатом, что приводит к стохастическим уравнениям. Однако, в некотором приближении динамику таких систем можно описывать детерминистскими (динамическими) уравнениями, что и приводит к моделям в виде диссипативных динамических систем. Рассмотрим некоторые особенности, с которыми приходится сталкиваться при исследовании бризеров и их свойств в диссипативных системах [22, 33, 34].

1.4.1 Отыскание бризеров в диссипативных системах

Рассмотрим следующую систему уравнений движения:

$$\ddot{x}_l = -\frac{\partial H}{\partial x_l} - \gamma \dot{x}_l - I \quad (1.21)$$

где

$$H = \sum_l [1 - \cos x_l - C(1 - \cos(x_l - x_{l-1}))] . \quad (1.22)$$

В случае $\gamma = I = 0$ эта система гамильтонова и совпадает с моделью связанных маятников Такено-Пейрара [22, 35]. В такой модели существуют колебательные дискретные бризеры (подобные рассмотренным в предыдущих разделах), а также вращательные бризеры, называемые *ротобризерами*.

Если для колебательного бризера $x_l(t + T_b) = x_l(t)$ для всех l , то для ротобризера, в простейшем случае, один из маятников совершает вращательное движение

$$x_0(t + T_b) = x_0(t) + 2\pi m . \quad (1.23)$$

Здесь m — это число вращения, характеризующее ротобризер (в простейшем случае $m = 1$). Такое решение является вращательным предельным циклом в цилиндрическом фазовом пространстве системы. Заметим, что, в отличие от колебательного бризера ($m = 0$), ротобризеры не инвариантны по отношению к обращению времени.

Для ненулевого γ и $I = 0$ диссипация приведет к затуханию любого решения до устойчивого состояния равновесия. Однако, при наличии постоянного $I \neq 0$, ротобризеры могут существовать. Система набирает энергию благодаря внешнему моменту I и рассеивает энергию из-за ненулевого трения γ . Предельный цикл соответствует балансу энергии. Для колебательных бризеров с $m = 0$ такой баланс невозможен.

В отличие от бризеров в гамильтоновых системах, образующих семейства периодических орбит, ротобризеры в диссипативных системах (при условии их устойчивости) являются аттракторами в фазовом пространстве. Аттрактор характеризуется некоторым конечным окружающим его бассейном притяжения. Любая полутраектория, начинающаяся внутри этого бассейна, асимптотически стремится к аттрактору.

Диссипативные бризеры, таким образом, составляют конечное или счетное множество решений.

Для нахождения диссипативного ротобризера, таким образом, достаточно задать начальные условия в области притяжения искомого решения и проинтегрировать уравнения движения до тех пор, пока не будет достигнута желаемая точность. Этот метод очень прост, но недостатками его являются (возможная) медленная сходимость и неизвестная и сложная структура границ бассейна притяжения.

Метод секущих Пуанкаре также может быть применен для отыскания таких решений. Поскольку период решения заранее не известен, следует рассмотреть отображение Пуанкаре плоскости $\pi_1 = \{x_b = 0\}$ на эквивалентную ей плоскость $\pi_2 = \{x_b = 2\pi t\}$, где b — индекс элемента, совершающего вращение. Вращательный предельный цикл соответствует неподвижной точке этого отображения, которая может быть найдена, например, с помощью метода Ньютона. Начальное приближение должно быть выбрано в области определения отображения Пуанкаре (то есть, должно отображаться траекторией системы с плоскости π_1 на плоскость π_2).

1.4.2 Устойчивость бризеров в диссипативных системах

Если диссипативный ротобризер устойчив, то он является аттрактором, имеет конечный бассейн притяжения, и любое решение, отклоненное от него на достаточно малую величину, будет стремиться к нему с течением времени. При изменении параметров системы, ротобризер может потерять устойчивость.

Линеаризуем уравнения движения системы (1.21,1.22) в окрестности ротобризера:

$$\ddot{\epsilon}_l = - \sum_m \frac{\partial^2 H}{\partial x_l \partial x_m} \Big|_{\{x_{l'}(t)\}} \epsilon_m - \gamma \dot{\epsilon}_l. \quad (1.24)$$

По аналогии с тем, как это было сделано в разд. 1.2, можно ввести матрицу \mathcal{R} , отображающую фазовое пространство линеаризованной системы в соответствии с уравнениями (1.24), интегрируемыми на одном периоде бризера [34]. Используя

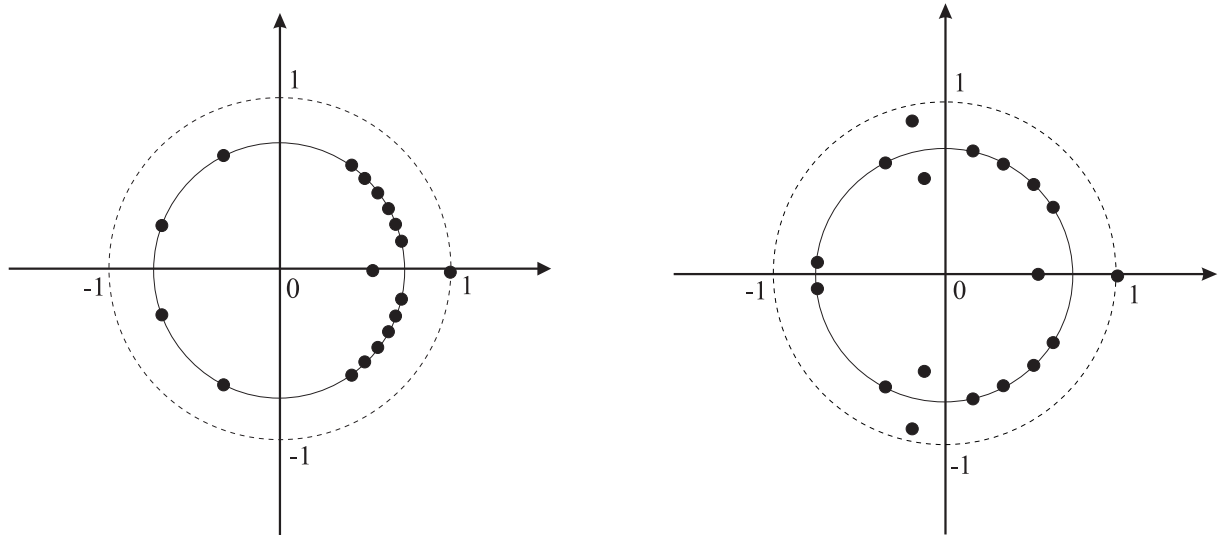


Рис. 1.4: Схема расположения мультипликаторов периодического решения, соответствующего роторизеру в диссипативной системе, на комплексной плоскости. Мультипликаторы — закрашенные кружки, штриховая линия — единичная окружность, сплошная линия — окружность радиуса R (1.27). Слева: устойчивый роторизер (все мультипликаторы располагаются на окружности радиуса R). Справа: устойчивый роторизер вблизи границы устойчивости (пара комплексно сопряженных мультипликаторов приближается к единичной окружности). Группа близко расположенных мультипликаторов соответствует спектру возмущений типа затухающих гармонических волн (нелокализованных собственных векторов матрицы Флоке), отдельно расположенные мультипликаторы соответствуют локализованным собственным векторам.

преобразование

$$\epsilon_l(t) = e^{-\frac{1}{2}\gamma t} \kappa_l(t), \quad (1.25)$$

получим

$$\ddot{\kappa}_l = - \sum_m \frac{\partial^2 H}{\partial x_l \partial x_m} \Big|_{\{x_l(t)\}} \kappa_m - \frac{1}{4} \gamma^2 \kappa_l. \quad (1.26)$$

В этих новых переменных матрица Флоке \mathcal{F} является симплектической и обладает всеми свойствами, обсуждавшимися в разд. 1.2. Делая обратное преобразование, получим, что собственные числа матрицы \mathcal{F} , лежащие на единичной окружности, переходят в собственные числа матрицы \mathcal{R} , лежащие на окружности меньшего радиуса R :

$$R(\gamma) = e^{-\gamma T_b/2}. \quad (1.27)$$

Если μ — собственное число матрицы \mathcal{R} , то также собственными числами являются

$$\mu^*, e^{-\gamma T_b} \frac{1}{\mu}, e^{-\gamma T_b} \frac{1}{\mu^*}. \quad (1.28)$$

Среди собственных чисел по-прежнему имеется число $\mu = 1$, отвечающее сдвигу вдоль траектории. В отличие от гамильтоновых систем, парное ему значение равно $e^{-\gamma T_b}$.

Схема расположения мультипликаторов диссипативного ротобризера на комплексной плоскости приведена на рис. 1.4. Ротобризер теряет устойчивость, когда хотя бы один из мультипликаторов выходит за пределы единичной окружности.

Глава 2

Получение и исследование дискретных бризеров в численных экспериментах

2.1 Долгоживущие возбуждения и приближение с сокращенным числом степеней свободы

Представим потенциалы в (1) в виде разложений в ряд Тейлора:

$$V(z) = \sum_{\alpha=2,3,\dots} \frac{v_\alpha}{\alpha} z^\alpha, \quad W(z) = \sum_{\alpha=2,3,\dots} \frac{w_\alpha}{\alpha} z^\alpha. \quad (2.1)$$

Рассмотрим случай $v_2 = 1$, $v_3 = -1$, $v_4 = \frac{1}{4}$, $w_2 = 0.1$, а все остальные коэффициенты разложения равны нулю. Потенциал осциллятора в этом случае имеет две ямы, разделенные барьером, а потенциал взаимодействия — гармонический. Один из простейших способов получить локализованное возбуждение в численном эксперименте — задать нулевые начальные условия на всех осцилляторах, кроме одного (пусть он имеет индекс $l = 0$), который в начальный момент смещен относительно состояния равновесия:

$$p_l(0) = 0, \quad x_{l \neq 0}(0) = 0, \quad x_0(0) = A$$

Проинтегрируем уравнения движения с этими начальными условиями используя, например, метод Верле. Можно ожидать, что по крайней мере часть энергии начального возмущения распространится по решетке в виде волны. Пусть размер решетки $N = 3000$. Максимальная групповая скорость гармонических волн в этой системе порядка 0.1. Тогда эффекты конечного размера решетки, проявляющиеся вследствие возвращения волн, отраженных от края решетки, должны быть несущественны вплоть до времени $t_{max} = 30000$. Другими словами, рассматриваемая конечная система будет адекватно моделировать поведение бесконечной системы вплоть до времени $t = t_{max}$. Для наблюдения процессов в системе определим дискретную плотность энергии

$$e_l = \frac{1}{2}p_l^2 + V(x_l) + \frac{1}{2}(W(x_l - x_{l-1}) + W(x_{l+1} - x_l)) . \quad (2.2)$$

Сумма этой величины по всем узлам решетки дает полную энергию системы, сохраняющуюся во времени. Если образуется дискретный бризер, то по крайней мере часть энергии начального возмущения должна остаться в окрестности точки начального возмущения.

Пусть $e_{(2m+1)}$ — суммарная энергия узлов в m -окрестности узла начального возмущения:

$$e_{(2m+1)} = \sum_{-m}^m e_l \quad (2.3)$$

Если для некоторого m эта величина спадает достаточно медленно, то можно говорить о наличии возбуждения, локализованного в пределах выбранных $2m + 1$ узлов. Медленность спадания рассматривается в сравнении с характерным масштабом времени, за которое волновой пакет, имеющий максимальную групповую скорость, преодолевает m узлов решетки. Для $m = 2$ этот характерный масштаб составляет величину порядка $t_{min} \approx 20$. Таким образом, в рамках данной постановки численного эксперимента представляют интерес масштабы времени в диапазоне

$$20 \ll t \leq 30000 . \quad (2.4)$$

На рис. 2.1 представлена измеренная зависимость от времени для суммарной энергии пяти смежных узлов $e_{(5)}(t)$ при начальных условиях $x_0(t = 0) = 2.3456$ [36]. Отчетливо наблюдается локализация энергии. После короткого переходного процесса длительностью порядка 100 единиц времени достигается практически постоянное значение $e_{(5)}$. Локализованный объект существует в течение продолжительного времени, излучение энергии из него очень мало. Вообще говоря, данное решение не совпадает с точным дискретным бризером и не является строго периодическим, и потому имеет конечное время жизни. Однако, поскольку это время жизни очень велико (по сравнению с указанными выше масштабами), будем называть это локализованное возбуждение и подобные ему дискретными бризерами в физическом смысле. Распределение энергии по цепочке в окрестности центра бризера приведено на врезке на рис. 2.1. Движение существенно затрагивает только три узла решетки, то есть, данное решение локализовано весьма сильно. В то время как центральная частица совершает колебания с большой амплитудой, амплитуда колебаний ее ближайших соседей мала. Все колебания совершаются в окрестности состояния равновесия $x_l = p_l = 0$. Отметим, что вследствие пространственной четности начальных условий, решение также обладает этой симметрией.

Чтобы получить более подробное представление о динамике данного решения, вычислим преобразование Фурье найденных реализаций $x_0(t)$ и $x_{\pm 1}(t)$ во временном окне $1000 \leq t \leq 10000$, используя алгоритм Филона [36]. Результат представлен на рис. 2.2.

Как видим, в спектре колебаний центральной частицы преобладают две частоты: $\omega_1 = 0.822$ и $\omega_2 = 1.34$. Все остальные пики, видимые в спектре на рис. 2.2, получаются линейной комбинацией указанных частот. Можно заключить, что наблюдаемое долгоживущее локализованное колебательное решение близко к квазипериодическому. Ближайшие соседи центральной частицы, в силу симметрии решения, двигаются одинаково. Спектр их колебаний (см. врезку на рис. 2.2) также носит характер двух-

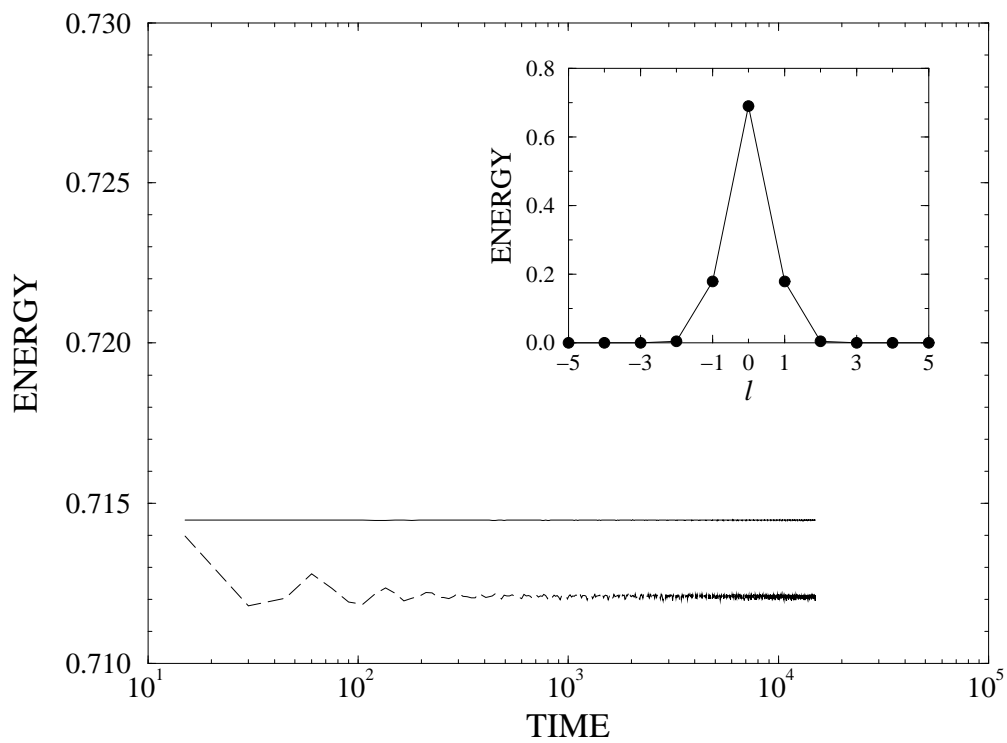


Рис. 2.1: Величина $e_{(5)}$ в зависимости от времени (штриховая линия). Полная энергия системы (сплошная линия). Врезка: распределение плотности энергии e_l по цепочке для того же решения, усредненное по интервалу времени $1000 < t < 1150$.

частотного, причем пик, соответствующий частоте ω_2 , выше пика на частоте ω_1 , в отличие от спектра для центральной частицы. Следуя указанным здесь наблюдениям и пренебрегая движением остальных частиц, будем приближенно описывать динамику рассматриваемого решения в рамках эффективной задачи с двумя степенями свободы.

Полагая нулями координаты и импульсы всех осцилляторов, кроме трех $l = -1, 0, 1$, сведем задачу к трем степеням свободы. Ограничиваясь инвариантным многообразием, состоящим из четных решений $x_{-1} = x_1, p_{-1} = p_1$, получим сокращенную систему с двумя степенями свободы

$$\ddot{x}_0 = -V'(x_0) - 2w_2(x_0 - x_{\pm 1}) , \quad (2.5)$$

$$\ddot{x}_{\pm 1} = -V'(x_{\pm 1}) - w_2(x_{\pm 1} - x_0) . \quad (2.6)$$

Рассмотрим начальные условия, аналогичные рассмотренным ранее для полной системы. Получаемая траектория в самом деле оказывается близкой к проекции траектории полной системы на рассматриваемое фазовое подпространство. Следуя этому подходу, можно детально проанализировать динамику сокращенной системы (2.5,2.6), исследуя отображение Пуанкаре на секущей $\{x_0 = 0, \dot{x}_0 > 0\}$ (см., например, [37]). Аналогичное отображение было исследовано и в полной системе. В обоих случаях было показано существование решений, близких к двумерному тору на временах численного счета. Более того, сечения этих торов в полной и сокращенной системах оказываются практически идентичными [36].

Таким образом, можно сделать два заключения: а) наблюдаемый локализованный объект соответствует траектории (в фазовом пространстве полной системы), которая на временах наблюдения практически встроена в двумерный тор, соответствующий квазипериодическому решению; б) это решение может быть воспроизведено в рамках задачи с сокращенным числом степеней свободы, где все осцилляторы, кроме центрального и двух его ближайших соседей, зафиксированы в состоянии равновесия.

Интуитивно понятно, что ни одна из частот, наблюдаемых в спектре локализо-

ванного решения, не должна резонировать с линейным спектром (3), иначе должно иметь место излучение, что нарушает предположение о локализованности. В действительности, накладываются гораздо более строгие условия, которые обсуждаются ниже. Поскольку сокращенная задача, определенная выше, в общем случае неинтегрируема, можно ожидать, что ее фазовое пространство содержит острова регулярной динамики, заполненные торами, встроенные в «море» хаотических траекторий. Отметим, что эта картина сильно зависит от выбора изоэнергетической гиперповерхности. Хаотические траектории имеют непрерывные частотные Фурье-спектры, которые должны в любом случае пересекаться с линейным спектром бесконечной решетки. Таким образом, хаотические траектории сокращенной задачи не являются кандидатами на роль бризероподобных объектов. Регулярные острова должны быть исследованы на предмет основных частот. Если эти частоты лежат за пределами линейного спектра бесконечной решетки, то можно ожидать, что решение, полученное в бесконечной решетке из тех же начальных условий, будет (на достаточно большом временном масштабе) локализовано в пространстве. Регулярные острова, не удовлетворяющие этому условию, не соответствуют локализованным решениям. Таким образом, исследование динамики сокращенной задачи позволяет сделать оценку множества начальных условий, приводящих к хорошо локализованным решениям в полной решетке. Этот подход был успешно применен в [37].

На рис. 2.3 приведен характерный пример траекторий отображения Пуанкаре для сокращенной системы. На рис. 2.4 показана временная зависимость определенной выше энергии подсистемы из пяти осцилляторов $e_{(5)}(t)$ в цепочке из $N = 3000$ узлов для различных начальных условий, соответствующих различным траекториям сокращенной задачи. Начальные условия, соответствующие регулярным островам 1 и 2 сокращенной задачи приводят к локализованным решениям в цепочке, в то время как начальные условия в регулярном острове 3 и на хаотической траектории, будучи запущены в цепочке, приводят к быстрому спаду энергии $e_{(5)}(t)$ из-за интенсивного

излучения энергии в виде гармонических волн. Интересно отметить, что спад $e_{(5)}(t)$ для этих последних решений останавливается на уровне около $e_{(5)} = 0.35$. Движение системы после этой стабилизации снова хорошо описывается сокращенной задачей (с соответствующей энергией). Как показано в [37], для энергий ниже этого уровня в сокращенной задаче практически исчезают хаотические траектории.

Неподвижные точки отображения Пуанкаре (в центре регулярных островов на рис. 2.3) соответствуют периодическим орбитам. Исследование зависимости $e_{(5)}(t)$ для решений, полученных из этих начальных условий (рис. 2.4), показало, что для каждого из них имеет место излучение энергии, хотя и слабое. Решения, соответствующие периодическим орбитам сокращенной задачи в островах 1 и 2 показали наименьшую скорость спада $e_{(5)}(t)$ [37].

Все приведенные здесь численные наблюдения согласуются с выводами главы 1 о существовании точных периодических локализованных решений — дискретных бризеров в нелинейных решетках.

Модель цепочки, рассмотренная в этом разделе, имеет оптический линейный спектр с отношением ширины спектра к ширине запрещенной зоны порядка $1/10$. Это, однако, не означает, что дискретные бризеры существуют лишь благодаря слабости взаимодействия. Оценка доли энергии дискретного бризера, приходящейся на взаимодействие, составляет величину около 57%. Очевидно, что такое решение никак не может быть адекватно описано, если пренебречь взаимодействием элементов решетки [37].

Поскольку локализованные возбуждения могут быть хорошо описаны в рамках приближенной сокращенной задачи, увеличение размерности решетки не должно оказать на их существование заметного влияния. Это приведет просто к увеличению числа ближайших соседей, то есть, к некоторому изменению параметров сокращенной задачи. В качестве примера, аналогичный подход был применен к двумерному варианту рассмотренной выше системы [38]. Практически все этапы приведенного

здесь исследования воспроизводятся и для двумерной решетки. Аналог рис. 2.1 для случая двумерной решетки приводится на рис. 2.5, где показано распределение энергии дискретного бризера по решетке, а на врезке построена зависимость от времени для энергии подсистемы в окрестности центра бризера $e_{(5)}(t)$.

В двумерном случае использовался другой подход к моделированию динамики бесконечной системы с использованием конечной системы, по сравнению с тем, который применялся ранее в одномерном случае. Была рассмотрена модель решетки размером 20×20 элементов (на рис. 2.5 приведена только часть решетки размером 10×10). Характерное время достижения гармонической волной границы этой решетки имеет порядок $t_{max} \approx 100$. Для того, чтобы отраженные волны не сказывались на динамике бризера, добавим к гамильтоновой решетке диссипативную границу шириной в 10 элементов с каждой стороны, что увеличивает полный размер решетки до 40×40 элементов. Коэффициент трения в этих диссипативных границах подбирается таким образом, чтобы обеспечить максимальную диссипацию энергии набегающих волн (поскольку как нулевое, так и бесконечное трение приведет к полному отражению, существует некое промежуточное оптимальное значение). Профиль коэффициента трения в диссипативных границах задается в виде линейного изменения от минимума на внутренней стороне до максимума на внешней стороне. Параметры линейного распределения оптимизируются на максимальное поглощение энергии набегающих волн [38].

2.2 Отыскание дискретных бризеров как точных решений

2.2.1 Метод Фурье

Как обсуждалось выше, локализованные объекты существуют благодаря отсутствию или слабости резонанса со спектром гармонических волн ω_q . В частности,

могут существовать периодические локализованные решения, время жизни которых бесконечно. Попробуем отыскать такое периодическое решение с периодом $T_b = \frac{2\pi}{\Omega_b}$, обладающее локализацией в пространстве

$$x_l(t) = x_l(t + T_b), \quad x_{|l| \rightarrow \infty} \rightarrow 0. \quad (2.7)$$

В силу предполагаемой периодичности, решение можно разложить в ряд Фурье

$$x_l(t) = \sum_k A_{kl} e^{ik\Omega_b t}. \quad (2.8)$$

Коэффициенты разложения должны быть локализованы в пространстве

$$A_{k,|l| \rightarrow \infty} \rightarrow 0. \quad (2.9)$$

Подставим разложение в уравнения движения (2), которые можно представить в виде

$$\ddot{x}_l = -v_2 x_l - w_2(2x_l - x_{l-1} - x_{l+1}) + F_l^{nl}(x_{l'}). \quad (2.10)$$

Здесь обозначение F_l^{nl} включает в себя все нелинейные члены уравнений движения.

В случае потенциалов (2.1), F_l^{nl} имеет вид

$$F_l^{(nl)} = - \sum_{\alpha=3,4,\dots} [v_\alpha x_l^{\alpha-1} + w_\alpha((x_l - x_{l-1})^{\alpha-1} - (x_{l+1} - x_l)^{\alpha-1})]. \quad (2.11)$$

$F^{nl}(t)$ как функцию времени также можно разложить в ряд Фурье:

$$F_l^{(nl)}(t) = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} F_{kl}^{(nl)} e^{ik\Omega_b t}. \quad (2.12)$$

Таким образом, приходим к системе связанных нелинейных алгебраических уравнений для коэффициентов Фурье A_{kl} , определяющих искомое решение:

$$k^2 \Omega_b^2 A_{kl} = v_2 A_{kl} + w_2(2A_{kl} - A_{k,l-1} - A_{k,l+1}) + F_{kl}^{(nl)}. \quad (2.13)$$

По предположению, все амплитуды в хвостах искомого решения малы. Следовательно, в этих хвостах можно пренебречь нелинейными членами в (2.13). Линеаризованные уравнения, аналогично (6), имеют вид

$$k^2 \Omega_b^2 A_{kl} = v_2 A_{kl} + w_2(2A_{kl} - A_{k,l-1} - A_{k,l+1}). \quad (2.14)$$

Как это уже обсуждалось в разделе 0.1, из (2.14) непосредственно следует необходимое условие существования дискретного бризера — отсутствие резонансов с линейным спектром (7) [6],[7]. В том случае, если это условие выполнено, то в рассматриваемой системе дискретный бризер локализован экспоненциально

$$A_{kl} \sim e^{-\xi_k |l|}, \quad k^2 \Omega_b^2 = v_2 + 2w_2(1 - \cosh \xi_k). \quad (2.15)$$

Построим итерационную схему для отыскания коэффициентов Фурье бризерного решения с требуемой точностью. Этот метод оказался одним из первых опубликованных методов построения дискретных бризеров как точных решений [7],[21].

Перепишем уравнение (2.13) в виде итерационного отображения двумя различными способами: отображение A

$$A_{kl}^{(i+1)} = \frac{1}{k^2 \Omega_b^2} \left[(v_2 + 2w_2) A_{kl}^{(i)} - w_2 (A_{k,l-1}^{(i)} + A_{k,l+1}^{(i)}) + F_{kl}^{(nl)}(A_{k'l'}^{(i)}) \right], \quad (2.16)$$

для которого

$$\lambda_{kl} = \frac{v_2}{k^2 \Omega_b^2}$$

и отображение B

$$A_{kl}^{(i+1)} = \frac{1}{v_2} \left[(k^2 \Omega_b^2 - 2w_2) A_{kl}^{(i)} + w_2 (A_{k,l-1}^{(i)} + A_{k,l+1}^{(i)}) - F_{kl}^{(nl)}(A_{k'l'}^{(i)}) \right], \quad (2.17)$$

для которого

$$\lambda_{kl} = \frac{k^2 \Omega_b^2}{v_2}.$$

Отображение для решетки может быть произвольным образом составлено из выражений (2.16), (2.17) для каждого из коэффициентов A_{kl} . Решение уравнений (2.13) всегда является неподвижной точкой такого итерационного отображения. Возникают два вопроса: сходится ли итерационная последовательность к неподвижной точке, и каково должно быть начальное приближение?

Сначала не будем задаваться вопросом о сходимости. Пусть необходимо отыскать дискретный бризер с частотой Ω_b , локализованный на узле $l = 0$. В качестве начального приближения положим все коэффициенты Фурье равными нулю, кроме $A_{\pm 1,0}$,

для которых выберем малое ненулевое значение. Для коэффициентов $k = \pm 1, l = 0$ выберем отображение (2.16), (2.17), дающее $\lambda_{\pm 1,0} > 1$, а для всех остальных коэффициентов — дающее $\lambda_{kl} < 1$. Таким образом, в начале итерационного процесса коэффициенты $k = \pm 1, l = 0$ будут нарастать, а остальные коэффициенты будут оставаться в окрестности нуля. В случае, если искомое бризерное решение является устойчивой неподвижной точкой итерационного отображения, такая итерационная последовательность должна сойтись к искомому решению.

Если потенциалы задаются полиномами невысокого порядка, то слагаемое $F_{kl}^{(nl)}$, отвечающее за нелинейность, может эффективно вычисляться на каждом шаге итерации согласно выражению

$$F_{kl}^{(nl)} = \sum_{\alpha=3,4,\dots} v_{\alpha} \sum_{k_1, k_2, \dots, k_{\alpha-1} = -\infty}^{+\infty} A_{k_1 l} A_{k_2 l} \dots A_{k_{\alpha-1} l} \delta_{k, (k_1 + k_2 + \dots + k_{\alpha-1})}. \quad (2.18)$$

В других случаях на каждом шаге необходимо вычислить $x_l(t)$, исходя из текущих значений $A_{kl}^{(i)}$. Тогда слагаемое $F_{kl}^{(nl)}$ находится численным интегрированием

$$F_{kl}^{(nl)} = \frac{1}{T_1} \int_{-T/2}^{T_2} F_l^{(nl)}(t) e^{-ik\omega_1 t} dt. \quad (2.19)$$

В численном расчете, естественно, вводится ограничение по номеру Фурье-гармоники k . По окончании итерационного процесса необходимо убедиться в малости найденных значений коэффициентов A_{kl} в окрестности наивысшей учитываемой гармоники.

В качестве условия окончания итерационного процесса можно выбрать, например,

$$\sum_{k,l} |A_{kl}^{(i)} - A_{kl}^{(i-1)}| < \varepsilon. \quad (2.20)$$

Для приведенных ниже примеров было задано значение $\varepsilon = 10^{-10}$.

Приведенные далее примеры были получены описанным выше способом при $\varepsilon = 10^{-10}$ для частоты $\Omega_b = 1.3$ в цепочках из 100 элементов. На рис. 2.6 показаны найденные решения для коэффициентов Фурье дискретного бризера в двух различных системах. Построены абсолютные значения $|A_{kl}|$ в логарифмическом масштабе

в зависимости от номера узла решетки l . Отметки (незакрашенные квадраты), соответствующие одному и тому же номеру Фурье-гармоники k , соединены сплошными линиями. Как и ожидалось, наблюдается экспоненциальный спад коэффициентов Фурье в пространстве, причем показатель спада (угловой коэффициент линии в логарифмическом масштабе) зависит от номера гармоники k . Неожиданный численный результат заключается в том, что найденные значения оказываются верными вплоть до значений порядка 10^{-20} несмотря на то, что для машинного представления вещественных чисел используется тип `double` (16 значащих цифр). Это связано с тем, что амплитуды в хвостах стремятся к нулю с удалением от центра бризера, а ближайшее к нулю значение, допускаемое типом `double`, составляет 10^{-307} .

Сравним показатели локализации найденных решений с оценкой (2.15), полученной в рамках линейной аппроксимации (2.14), для случая, показанного на рис. 2.6(a):

k	числ. результат	оценка
0	-1.3202	-1.3415
1	-0.6904	-0.6898
2	-1.3796	-1.6588
3	-2.0748	-2.1143
4	-2.3957	-2.3951
5	-2.6018	-2.6026
6	-2.7663	-2.7682
\vdots	\vdots	\vdots

Наибольшие отклонения наблюдаются для гармоник $k = 2, 3$. Отметим, что численно найденная локализация оказывается слабее ожидаемой. Причина заключается в том, что для этих гармоник наиболее велики нелинейные поправки, спадающие в пространстве медленнее, чем предсказывает линейное приближение [21]. В рассматриваемом случае эти поправки имеют порядок $\sim A_{1l}^2$ для $k = 2$ и $\sim A_{1l}^3$ для $k = 3$. Оценки показателя локализации с учетом этих поправок были получены в [21] и

составляют $2 \cdot 0.6898 = 1.3796$ для $k = 2$ и $3 \cdot 0.6898 = 2.0694$ для $k = 3$.

Отметим, что нерезонансное условие (7) не зависит от этих поправок. Существенно также, что коэффициенты Фурье для гармоники, обладающей самой слабой пространственной локализацией, всегда корректно описывается линейным приближением в хвостах бризера с удалением от его центра.

Для случая, изображенного на рис. 2.6(б), находим

k	числ. результат	оценка
1	-0.6722	-0.6709
3	-1.9910	-2.1464
5	-2.6103	-2.6133
7	-2.9114	-2.9117
9	-3.1324	-3.1325
\vdots	\vdots	\vdots

Заметное расхождение имеется только для гармоники $k = 3$, и корректная оценка снова получается при учете поправок $\sim A_{1l}^3$: $3 \cdot 0.6709 = 2.0127$.

2.2.2 Метод седловых точек для систем с разделяющимися переменными

Существует подкласс моделей вида (1), допускающий пространственно-временное разделение переменных (см. [19], [16], [20]). Рассмотрим гамильтониан

$$H = \sum_l \left[\frac{1}{2} p_l^2 + \frac{v_2}{2} x_l^2 \right] + POT, \quad (2.21a)$$

где

$$POT = \sum_l \left[\frac{v_{2m}}{2m} x_l^{2m} + \frac{w_{2m}}{2m} (x_l - x_{l-1})^{2m} \right], \quad m = 2, 3, 4, \dots \quad (2.21b)$$

— однородная функция координат. Уравнения движения тогда принимают вид

$$\ddot{x}_l + v_2 x_l = -v_{2m} x_l^{2m-1} - w_{2m} (x_l - x_{l-1})^{2m-1} + w_{2m} (x_{l+1} - x_l)^{2m-1}. \quad (2.22)$$

Такие системы имеют подмножество решений, характеризующихся пространственно-временным разделением переменных:

$$x_l(t) = A_l G(t) . \quad (2.23)$$

Будем искать дискретные бризеры в этом классе решений. Подставляя (2.23) в (2.22), получим

$$\frac{\ddot{G} + v_2 G}{G^{2m-1}} = -\kappa , \quad (2.24)$$

$$-\kappa = \frac{1}{A_l} \left[-v_{2m} A_l^{2m-1} - w_{2m} (A_l - A_{l-1})^{2m-1} + w_{2m} (A_{l+1} - A_l)^{2m-1} \right] . \quad (2.25)$$

Здесь $\kappa > 0$ — параметр разделения, который может быть выбран произвольным образом. Функция G удовлетворяет уравнению нелинейного осциллятора с одной степенью свободы

$$\ddot{G} = -v_2 G - \kappa G^{2m-1} . \quad (2.26)$$

Решение этого уравнения определяет временную эволюцию искомого решения (2.23).

Пространственный профиль решения (2.23) есть решение уравнения

$$\kappa A_l = \left. \frac{\partial POT}{\partial x_l} \right|_{\{x_k = A_k\}} \quad (2.27)$$

или, иначе говоря, стационарная точка функции S :

$$\frac{\partial S}{\partial A_l} = 0 , \quad S = \frac{1}{2} \kappa \sum_l A_l^2 - POT(\{x_k = A_k\}) . \quad (2.28)$$

Обсудим свойства функции S . Эта функция имеет тривиальный минимум $S = 0$ в начале координат $A_l = 0$ (точка $P0$ на рис. 2.7). Если двигаться вдоль выбранного направления в пространстве A_l , начиная от точки $P0$, то S будет сначала возрастать, затем перейдет через точку условного максимума, и далее будет убывать до $-\infty$. Таким образом, множество условных максимумов S вдоль всевозможных направлений из точки $P0$ образует замкнутую гиперповерхность M , окружающую $P0$.

Искомое решение соответствует стационарной точке S . Поскольку бризеры локализованы в пространстве, вариация амплитуд A_l в хвостах бризера в окрестности

нуля приведет к увеличению S . В то же время, S имеет единственный минимум, находящийся в начале координат $P0$. Следовательно, бризерам соответствуют седловые точки функции S .

Опишем метод отыскания седловой точки функции S . Выберем направление в N -мерном пространстве A_l , например, (...0001000...), (...0001001000...) и т. п. Будем двигаться из начала координат $P0$ в выбранном направлении и отыщем условный максимум $P1$, лежащий на гиперповерхности M . Вычислим градиент S (он направлен по касательной к M) и сделаем шаг в обратном направлении. Получим точку $P2$. Теперь отыщем условный максимум на прямой $P0 - P2$ и получим точку $P3$, снова лежащую на гиперповерхности M . Таким образом реализуется итерационная процедура «наискорейшего спуска» на гиперповерхности условных максимумов M , которая повторяется до тех пор, пока не будет найдена с требуемой точностью искомая седловая точка функции S .

Этот метод был применен для отыскания различных типов дискретных бризеров и мультибризеров (решений, характеризующихся большой амплитудой сразу на нескольких узлах решетки). Заметим, что метод может быть легко распространен на двух- и трехмерные решетки [20].

2.2.3 Метод гомоклинических траекторий отображения в системах с разделяющимися переменными

С использованием пространственно-временного разделения переменных, обсуждавшегося в разделе 2.2.2, можно рассматривать дискретные бризеры как гомоклинические траектории некоторого двумерного отображения [16]. В самом деле, можно переписать (2.25) в виде рекуррентного соотношения

$$A_{l+1} = A_l + [v_{2m}A_l^{2m-1} + w_{2m}(A_l - A_{l-1})^{2m-1} - \kappa A_l]^{\frac{1}{2m-1}}, \quad (2.29)$$

позволяющего полностью восстановить профиль амплитуд решения по заданным амплитудам на двух смежных узлах. Вводя двухкомпонентный вектор

$$\mathbf{R}_l = (x_l, y_l) = (A_{l-1}, A_l) , \quad (2.30)$$

перепишем (2.29) в форме двумерного отображения

$$\begin{aligned} x_{l+1} &= y_l \\ y_{l+1} &= y_l + [v_{2m}y_l^{2m-1} + w_{2m}(y_l - x_l)^{2m-1} - \kappa y_l]^{\frac{1}{2m-1}} . \end{aligned} \quad (2.31)$$

Дискретное время отображения соответствует дискретному пространству решеточной системы.

Это отображение имеет неподвижную точку $\mathbf{R}_F = (0, 0)$ типа седло. На рис. 2.8 схематически изображены устойчивое и неустойчивое инвариантные многообразия седла. Любая траектория отображения, лежащая на устойчивом многообразии, стремится к седлу в прямом времени, а лежащая на неустойчивом многообразии — в обратном времени. Устойчивое и неустойчивое многообразия пересекаются. По определению, любая траектория с начальными условиями в одной из точек пересечения многообразий стремится к седлу как в прямом, так и в обратном времени, то есть, является гомоклинической. В то же время, любая гомоклиническая траектория седла \mathbf{R}_F в отображении (2.31) соответствует дискретному бризеру в исходной системе, поскольку стремление амплитуд A_l к нулю при $l \rightarrow \pm\infty$ означает пространственную локализацию решения (2.23).

Отметим, что одной гомоклинической траектории принадлежит бесконечное множество точек пересечения многообразий (как, например, точки пересечения, отмеченные на рис. 2.8), соответствующих, следовательно, одному и тому же бризеру.

Поскольку отображение (2.31) сохраняет площадь в малой окрестности седла \mathbf{R}_F , его инвариантные многообразия имеют подковообразную структуру (см. рис. 2.8). Следствием этого является существование бесконечного количества различных гомоклинических траекторий (а значит, и бризеров). В том числе, возможны много-

обходные гомоклинические траектории, соответствующие мультибризерам (см. тж. [6]).

Благодаря симметрии решетки (2.21a,b) относительно пространственного отражения, что приводит к симметрии отображения (2.31) относительно обращения дискретного времени, всегда существует точка пересечения многообразий на линии $x = y$. Положение этой точки зависит от выбора величины κ . На этом может быть основан простой алгоритм построения гомоклинической орбиты. Например, можно зафиксировать точку $x_0 = y_0$ и подобрать значение κ таким образом, чтобы выбранная точка лежала на гомоклинической орбите [16]. Кроме того, высказанные в этом разделе соображения служат основой строгого доказательства существования дискретных бризеров в системах класса (2.21a,b) [16].

2.2.4 Метод Ньютона в фазовом пространстве

В предыдущих разделах были рассмотрены методы отыскания дискретных бризеров, основанные на решении алгебраических уравнений. В качестве неизвестных выступали параметры искомого решения (коэффициенты разложения Фурье или просто амплитуды колебаний на всех узлах решетки).

Вместо решения алгебраических уравнений, можно искать периодическую бризерную орбиту непосредственно в фазовом пространстве системы. Напомним, что периодическая орбита в фазовом пространстве представляет из себя замкнутую кривую. Как правило, периодические орбиты неинтегрируемых гамильтоновых систем изолированы в том смысле, что в малой окрестности такой орбиты не существует других замкнутых траекторий *с тем же значением энергии* (и других интегралов движения, если таковые есть). Это утверждение может быть несправедливо в особом случае периодических орбит на резонансных торах.

В то же время, как правило, в окрестности периодической орбиты гамильтоновой системы существуют другие периодические орбиты, соответствующие *другим значе-*

ниями интегралов движения.

Таким образом, типичные периодические орбиты гамильтоновых систем, при наличии только одного интеграла движения — энергии — образуют однопараметрические семейства в фазовом пространстве системы (см. рис. 2.9).

При перемещении вдоль такого семейства параметры орбиты изменяются. В частности, орбита может потерять устойчивость. Такая бифуркация сопровождается слиянием двух семейств периодических орбит, как показано на рис. 2.9.

Опишем широко используемый метод отыскания дискретных брызгов — метод Ньютона в фазовом пространстве [22]. Проинтегрируем уравнения движения системы для заданного вектора начальных условий $\tilde{\mathbf{R}}$ с компонентами

$$x_l(t = 0) \equiv X_l, \quad p_l(t = 0) \equiv P_l \quad (2.32)$$

на заданном времени T :

$$x_l(T) \equiv I_l^x(\{X_{l'}, P_{l'}\}, T), \quad (2.33)$$

$$p_l(T) \equiv I_l^p(\{X_{l'}, P_{l'}\}, T). \quad (2.34)$$

Рассмотрим функции невязки

$$F_l^x = I_l^x - X_l, \quad F_l^p = I_l^p - P_l. \quad (2.35)$$

Если $\tilde{\mathbf{R}}$ принадлежит периодической орбите периода T , то

$$F_l^x = F_l^p = 0. \quad (2.36)$$

Применим итерационный метод Ньютона для решения уравнений (2.36) относительно неизвестного вектора $\tilde{\mathbf{R}}$. Поскольку итерационное отображение в методе Ньютона содержит обращение матрицы производных, необходимо, чтобы эта матрица была невырожденной. Однако, если некоторая точка $\tilde{\mathbf{R}}$ принадлежит периодической орбите (а значит, является решением (2.36)), то и все точки в ее окрестности,

получаемые сдвигом вдоль орбиты, также являются решениями (2.36). Чтобы обеспечить изолированность решения уравнений (2.36), уменьшим число неизвестных на единицу, введя дополнительное условие, например,

$$P_M = 0 . \quad (2.37)$$

Тогда, для системы с N степенями свободы, будем искать решение невырожденной системы из $2N - 1$ уравнений относительно $2N - 1$ неизвестных. Дополняя решение условием (2.37), получим полные начальные условия для $2N$ фазовых переменных. Используя закон сохранения энергии, можно убедиться, что для полученных начальных условий имеем $p_M(T) = 0$, а значит, орбита является замкнутой.

Введем обозначения

$$\mathbf{R} = (X_1, X_2, \dots, X_M, \dots, X_N, P_1, \dots, P_{M-2}, P_{M-1}, P_{M+1}, P_{M+2}, \dots, P_N) , \quad (2.38)$$

$$\mathbf{F} = (F_1^x, F_2^x, \dots, F_M^x, \dots, F_N^x, F_1^p, \dots, F_{M-2}^p, F_{M-1}^p, F_{M+1}^p, F_{M+2}^p, \dots, F_N^p) , \quad (2.39)$$

$$\mathbf{F} = \mathbf{R}(T) - \mathbf{R} . \quad (2.40)$$

Обозначим начальное приближение через $\mathbf{R}^{(0)}$. Разложение в степенной ряд до линейного члена дает

$$F_n(\mathbf{R}) = F_n(\mathbf{R}^{(0)}) + \sum_m \frac{\partial F_n}{\partial R_m} \Big|_{\mathbf{R}^{(0)}} (R_m - R_m^{(0)}) , \quad (2.41)$$

$$\mathbf{F}(\mathbf{R}) = \mathbf{F}(\mathbf{R}^{(0)}) + \mathcal{M}(\mathbf{R} - \mathbf{R}^{(0)}) , \quad (2.42)$$

$$\mathcal{M}_{nm} = \frac{\partial F_n}{\partial R_m} \Big|_{\mathbf{R}^{(0)}} = \frac{\partial R_n(T)}{\partial R_m} \Big|_{\mathbf{R}^{(0)}} - \delta_{nm} . \quad (2.43)$$

Один шаг итерационного метода Ньютона дается выражением

$$\mathbf{R} = \mathbf{R}^{(0)} - \mathcal{M}^{-1} \mathbf{F}(\mathbf{R}^{(0)}) . \quad (2.44)$$

Это отображение итерируется до тех пор, пока не будет достигнута заданная точность: $|\mathbf{F}| < \epsilon$ или $\max |F_n| < \epsilon$.

Опишем способ численного отыскания матрицы Ньютона \mathcal{M} . На рис. 2.10 представлена схематическая иллюстрация приведенной ниже процедуры для случая двумерного фазового пространства.

Имея начальное приближение $\mathbf{R}^{(0)}$ и интегрируя уравнения движения на времени T , получим точку $\mathbf{R}^{(0)}(T)$. Если $\mathbf{R}^{(0)}$ не лежит на искомой орбите периода T , то эти точки будут различаться. Теперь введем отклонение от $\mathbf{R}^{(0)}$ по фазовой переменной m на величину Δ :

$$\mathbf{R}^{(0,m)} = \mathbf{R}^{(0)} + \Delta \mathbf{e}_m . \quad (2.45)$$

Здесь \mathbf{e}_m — единичный вектор, соответствующий фазовой переменной m . Интегрируя уравнения движения с новыми начальными условиями $\mathbf{R}^{(0,m)}$ на времени T , получим точку $\mathbf{R}^{(0,m)}(T)$. Тогда элементы матрицы Ньютона выражаются конечно-разностным приближением

$$\mathcal{M}_{nm} = \frac{1}{\Delta} (F_n(\mathbf{R}^{(0,m)}) - F_n(\mathbf{R}^{(0)})) . \quad (2.46)$$

или, с учетом выражения (2.35),

$$\mathcal{M}_{nm} = \frac{1}{\Delta} (R_n^{(0,m)}(T) - R_n^{(0)}(T)) - \delta_{nm} . \quad (2.47)$$

Преимуществом метода Ньютона является легкость его программирования при наличии подходящего интегратора ОДУ. Метод сходится экспоненциально. Кроме того, можно использовать одну матрицу Ньютона для нескольких итераций, что экономит время в случае больших матриц. Недостатки метода Ньютона связаны с необходимостью обращения матриц, что требует относительно большого вычислительного времени порядка $\sim N^2$. Обращение матрицы Ньютона становится невозможным в точке бифуркации, где возникают дополнительные вырождения, приводящие к появлению нулевых собственных чисел матрицы \mathcal{M} . Иногда требуется применение сложных алгоритмов обращения матриц, использующих разложение по сингулярным числам и т. п.

Метод Ньютона чувствителен к выбору начального приближения. Может быть целесообразно предварительно изменить параметры системы до таких значений, при которых решение известно (или легко находится), а затем доводить малыми шагами до требуемых значений, отслеживая решение на каждом шаге изменения параметра. Для нахождения такого стартового опорного решения иногда можно воспользоваться каким-либо другим численным методом, эффективно работающим при выбранных значениях параметров.

2.2.5 Метод наискорейшего спуска в фазовом пространстве

Вместо метода Ньютона можно использовать метод наискорейшего спуска в фазовом пространстве [17]. Введем в рассмотрение неотрицательную функцию

$$g(\tilde{\mathbf{R}}) = \sum_l [F_l^x F_l^x + F_l^p F_l^p] \quad (2.48)$$

и ее градиент с компонентами

$$(\nabla g)_n = \frac{\partial g}{\partial \tilde{R}_n}. \quad (2.49)$$

Зададим начальное приближение в фазовом пространстве, вычислим в этой точке градиент и сместим точку в противоположном направлении. Эта итерационная процедура повторяется до тех пор, пока функция g не станет достаточно близка к нулю, что соответствует периодической орбите.

Преимущества этого метода обусловлены линейным ростом вычислительного времени с ростом размера системы и нечувствительностью к бифуркациям. Недостатки связаны с относительной сложностью программирования, медленной сходимостью по сравнению с методом Ньютона и возможностью сходимости к ненулевому минимуму функции g .

2.2.6 Симметрии

Часто уравнения движения инвариантны относительно некоторых преобразований симметрии, таких например, как сдвиг во времени

$$t \rightarrow t + \tau ,$$

обращение времени

$$t \rightarrow -t , p_l \rightarrow -p_l ,$$

обращение знака

$$x_l \rightarrow -x_l , p_l \rightarrow -p_l ,$$

дискретный пространственный сдвиг решетки или другие дискретные пространственные преобразования на решетке (пространственное отражение и др.).

Каждая дискретная симметрия подразумевает, что любое заданное решение системы отображается на другое решение системы. Если решение отображается на себя, то оно инвариантно относительно данного преобразования.

Дискретный брйзер по определению не инвариантен относительно дискретного пространственного сдвига. Если он, однако, инвариантен по отношению к какому-либо другому преобразованию, это может быть использовано для существенного снижения вычислительной сложности его отыскания [5].

Обратимость искомого решения во времени подразумевает, что начало отсчета времени может быть выбрано таким образом, чтобы выполнялось

$$x_l(t) = x_l(-t) , p_l(t) = -p_l(-t) ,$$

что сохраняет 50% вычислительного времени. При наличии дополнительно инвариантности относительно смены знака, откуда следует

$$x_l(t + T/2) = -x_l(t) , p_l(t + T/2) = -p_l(t) ,$$

может быть сэкономлено 75% вычислительного времени.

Решетки размерности выше единицы могут иметь дополнительные симметрии, например, симметрию относительно перестановки индексов решетки, что также позволяет сократить сложность вычислений.

В то же время, даже при наличии определенной симметрии уравнений, могут существовать бризерные решения, не обладающие такой симметрией. Простейший пример — опять-таки, симметрия относительно дискретного пространственного сдвига. Также может быть нарушена симметрия относительно пространственного отражения (четности). В решетках размерности выше единицы могут существовать бризеры, не инвариантные относительно обращения времени, что означает ненулевой поток энергии [41].

2.3 Дискретные бризеры в переходных процессах и тепловом равновесии

2.3.1 Дискретные бризеры в переходных процессах

Поскольку локализованные состояния легко создать с помощью локального воздействия, можно ожидать, что локализация энергии и формирование дискретных бризеров возможны также в системах с ненулевой плотностью энергии, как-либо распределенной по решетке. Одна из возможностей локализации связана с неустойчивостью равномерного распределения энергии по отношению к малым возмущениям (модуляционная неустойчивость, неустойчивость Бенджамина-Фейра и т. п.). Условия такой неустойчивости можно получить, линеаризуя уравнения движения в окрестности решения вида бегущей волны. Если подобная неустойчивость имеет место, то ее можно наблюдать в численном эксперименте, задавая начальные условия в виде бегущей волны, на которую наложено малое случайное возмущение. Как правило, эволюция системы приводит в этом случае к формированию пространственно-неоднородных распределений энергии, в том числе, дискретных бризеров. Отметим,

что характер динамики на протяжении достаточно длительного переходного процесса может существенно отличаться от ожидаемого характера «теплового равновесия». Формирование дискретных бризеров вследствие модуляционной неустойчивости наблюдалось, например, в работе [39].

Приведем результаты численного моделирования, опубликованные в [40]. Параметры исследуемой модели $v_2 = 1$, $v_4 = 0.25$, $w_2 = 0.1$, остальные коэффициенты равны нулю. Начальные условия для одномерной системы имеют вид

$$x_l(0) = (a + \xi) \cos(ql) , \quad \dot{x}_l(0) = \omega(a + \xi) \sin(ql) , \quad (2.50)$$

где $\omega^2 = \omega_q^2 + 0.75a^2$, волновое число $q = 3\pi/4$, амплитуда $a = 0.5$, а случайное возмущение ξ распределено равномерно на интервале $0 \leq \xi \leq 0.001$. Размер системы $N = 400$, используются периодические граничные условия.

На рис. 2.11 показана эволюция плотности энергии в системе на интервалах времени от $t = 0$ до $t = 5000$ (а) и от $t = 0$ до $t = 5 \cdot 10^{-5}$ (б).

На начальной фазе эволюции модуляционная неустойчивость приводит к формированию волновых пакетов, разделенных равными пространственными интервалами и распространяющихся с групповой скоростью. На следующей стадии, вследствие случайности в начальных условиях, эти пакеты случайным образом взаимодействуют и обмениваются энергией, в результате чего формируются неподвижные высокоэнергетические локализованные объекты — дискретные бризеры, сосуществующие с распространяющимися пакетами меньшей амплитуды. Эти пакеты могут отражаться от бризеров или проходить сквозь них, что в обоих случаях приводит к обмену энергией. Этот обмен приводит к разрушению некоторых бризеров и к дальнейшему повышению энергии других бризеров. Моделирование эволюции системы на больших временных масштабах (рис. 2.11(б)) демонстрирует распад большинства бризеров, сформировавшихся на начальной стадии, однако, энергия нераспавшихся бризеров повышается. Отметим, что масштаб времени (оси ординат) на рисунках 2.11(а) и (б) различается в 100 раз, а масштаб серой шкалы — примерно в 2 раза.

В некоторых случаях эволюция системы приводит к исчезновению бризеров (точнее говоря, вероятность их наблюдения становится пренебрежимо малой), в других случаях формирование бризеров наблюдается и в состоянии, которое считается тепловым равновесием (см. разд. 2.3.2). Результат существенно зависит как от параметров модели, так и от средней плотности энергии (температуры), определяемой начальными условиями.

Модуляционная неустойчивость бегущей волны возможна при сколь угодно низких плотностях энергии. Более того, результаты численных расчетов позволяют предположить, что в достаточно большой системе модуляционная неустойчивость при сколь угодно низкой плотности энергии приводит к формированию бризеров, но характерное время возникновения бризера быстро возрастает с уменьшением средней плотности энергии. Время жизни бризеров в системах с малой плотностью энергии также велико, поскольку мала вероятность их разрушения из-за взаимодействия с фоновыми колебаниями.

Таким образом, малая плотность энергии означает очень большие масштабы времени перехода к режиму «теплового равновесия», и в этом переходном процессе наблюдаются долгоживущие бризеры, однако в «тепловом равновесии» вероятность возникновения бризера становится малой.

Бóльшие значения средней плотности энергии приводят к сокращению времени переходного процесса (и к уменьшению времени жизни бризеров, формирующихся на этой стадии), но вероятность наблюдения бризеров в режиме «тепловом равновесия» (и их время жизни) возрастает.

Отметим, что вклад случайности в начальные условия в рассматриваемой постановке задачи всегда полагается малым.

Аналогичный сценарий наблюдается и в двумерных решетках [40]. На рис. 2.12 (а-г) показаны снимки плотности энергии в моменты времени $t = 400, 450, 500, 5000$ в квадратной решетке размера 80×80 элементов с периодическими граничными

условиями и с теми же параметрами, как и в одномерной системе. Начальные условия задаются в виде слабо зашумленной гармонической волны, распространяющейся вдоль диагонали решетки, для этого в (2.50) аргумент (ql) заменяется на $(q(l+m))$, где l и m — пространственные индексы. Отметим, что масштаб серой шкалы меняется от рисунка к рисунку вследствие возрастания плотности энергии в бризерах.

Рассмотрим другой вариант переходного процесса, в котором также возможно формирование дискретных бризеров. Пусть в начальный момент времени на некотором участке бесконечной решетки заданы ненулевые начальные условия, а все остальные узлы находятся в нулевом состоянии. Тогда можно ожидать, что энергия из возбужденной части будет излучаться в виде волн в окружающую решетку, но при этом в возбужденной части могут остаться долгоживущие дискретные бризеры [42].

Приведем результаты численных экспериментов с решеткой размера 50×50 элементов, по сторонам которой добавлены диссипативные границы (таким образом с помощью конечной системы моделируется охлаждение участка бесконечной решетки) [40]. Параметры модели — те же, что и в экспериментах, описанных выше. Начальные условия для x_{lm} и \dot{x}_{lm} — случайная величина, равномерно распределенная на интервале от $-c/2$ до $c/2$. На рис. 2.13 (а-г) показаны снимки плотности энергии в решетке в моменты времени $t = 0, 4900, 11900, 19900$ для случая $c = 3$. Даже для такой невысокой начальной энергии около 5% полной энергии остается в долгоживущих бризерах — фактически, благодаря флуктуациям в начальных условиях.

Характер процесса охлаждения одномерных цепочек качественно отличается от двумерного случая, описанного выше. Известно [43, 44], что бризеры в одномерных системах эффективно отражают бегущие волны. Следовательно, уже двух бризеров в цепочке достаточно для того, чтобы удерживать заключенную между ними энер-

гию от излучения в цепочку. Кроме того, волны, захваченные на участке между двух бризеров, могут приводить к некоторому взаимодействию между этими бризерами. В то же время, в системах с размерностью $d \geq 2$ бризеры, хотя и могут рассеивать бегущие волны, не могут их захватывать. Поэтому распространяющиеся волны свободно выходят из нагретой области при ее остывании, и оставшиеся в системе бризеры практически не взаимодействуют друг с другом (остается возможным только взаимодействие через экспоненциально спадающие пространственные хвосты).

В самом деле, в аналогичном эксперименте с одномерной системой (параметры — те же, но $c = 2$) наблюдается захват энергии между двумя бризерами большой амплитуды (рис. 2.14, см. тж. [45],[46]). Со временем энергия все-таки постепенно излучается, а взаимодействие между бризерами приводит к их медленному сближению.

2.3.2 Бризеры в тепловом равновесии

Наконец, бризеры могут наблюдаться и в тепловом равновесии [39, 47]. На рис. 2.15 (а-г) показана эволюция плотности энергии в одномерной цепочке с теми же параметрами, как и в предыдущем разделе, на некоторых интервалах времени после установления теплового равновесия. Граничные условия — периодические, а начальные условия равномерно распределены на интервале от $-c/2$ до $c/2$. Отчетливо наблюдаются локализованные возбуждения, причем с увеличением плотности энергии увеличивается их количество и время жизни [40].

Аналогичный эффект наблюдается и в двумерной решетке. Рис. 2.16(а,б) отображает эволюцию плотности энергии в двумерной решетке размера 50×50 на двух различных временных масштабах. Для визуализации используется пороговая обработка: наличие черной точки в проекции трехмерного пространства-времени означает, что на соответствующем узле в соответствующий момент времени плотность энергии превышает установленный порог, в пять раз превышающий величину сред-

ней плотности энергии в системе. Вертикальные черные линии, таким образом, соответствуют долгоживущим локализованным возбуждениям — дискретным бризерам.

Вышеперечисленные результаты подтверждают, что дискретные бризеры достаточно легко могут быть получены в нелинейных решеточных системах, не только путем целенаправленного задания начальных условий на точном решении, но и в переходных процессах или тепловом равновесии. Представляет интерес вопрос о статистических свойствах дискретных бризеров в таких процессах; некоторые результаты по этой проблеме представлены в работе [40].

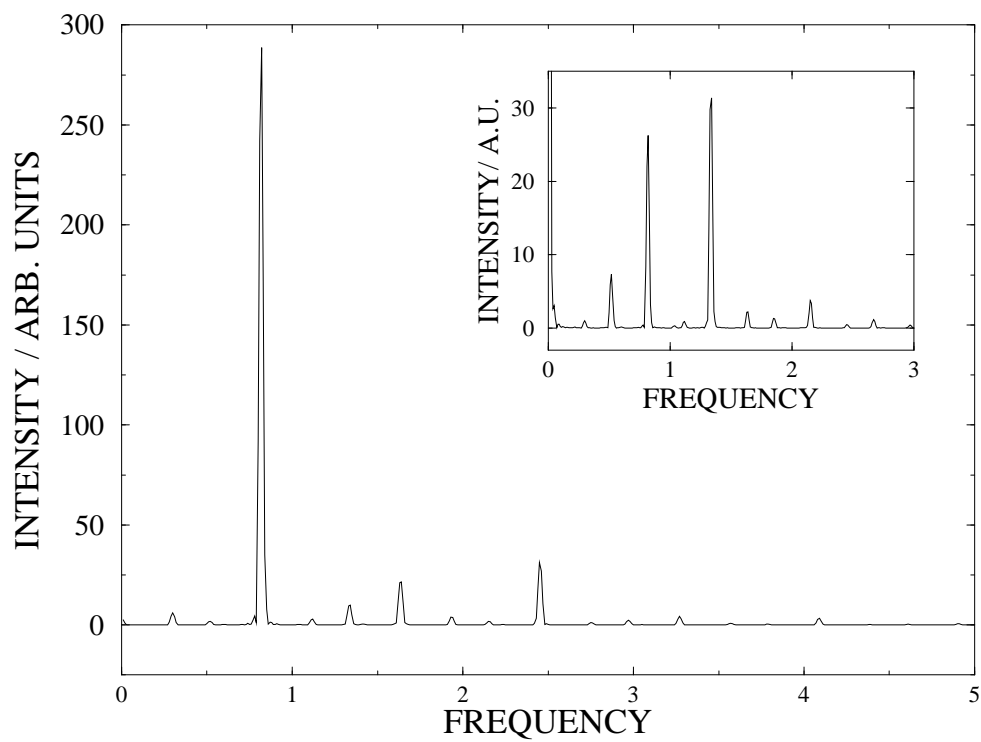


Рис. 2.2: Преобразование Фурье $FT[x_l(t \geq 1000)](\omega)$ решения, показанного на рис. 2.1 для $l = 0$ и $l = \pm 1$ (врезка).

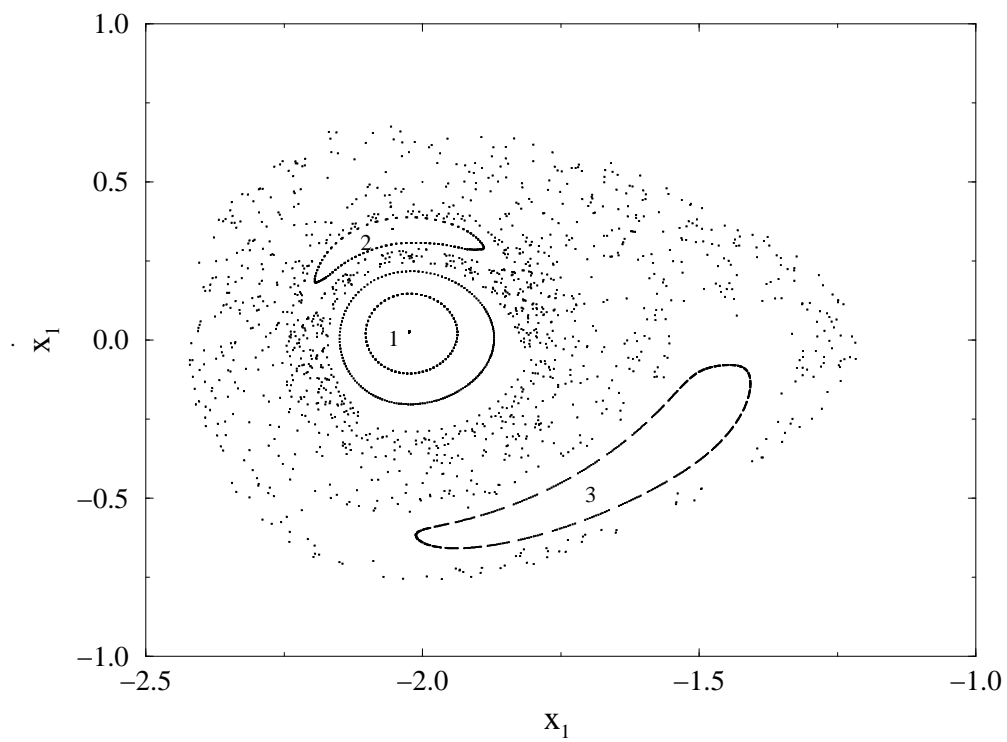


Рис. 2.3: Траектории отображения Пуанкаре на секущей $\{x_0 = 0, \dot{x}_0 > 0\}$ для задачи с сокращенным числом степеней свободы при энергии $E = 0.58$. Проекция на плоскость $\{x_1, \dot{x}_1\}$.

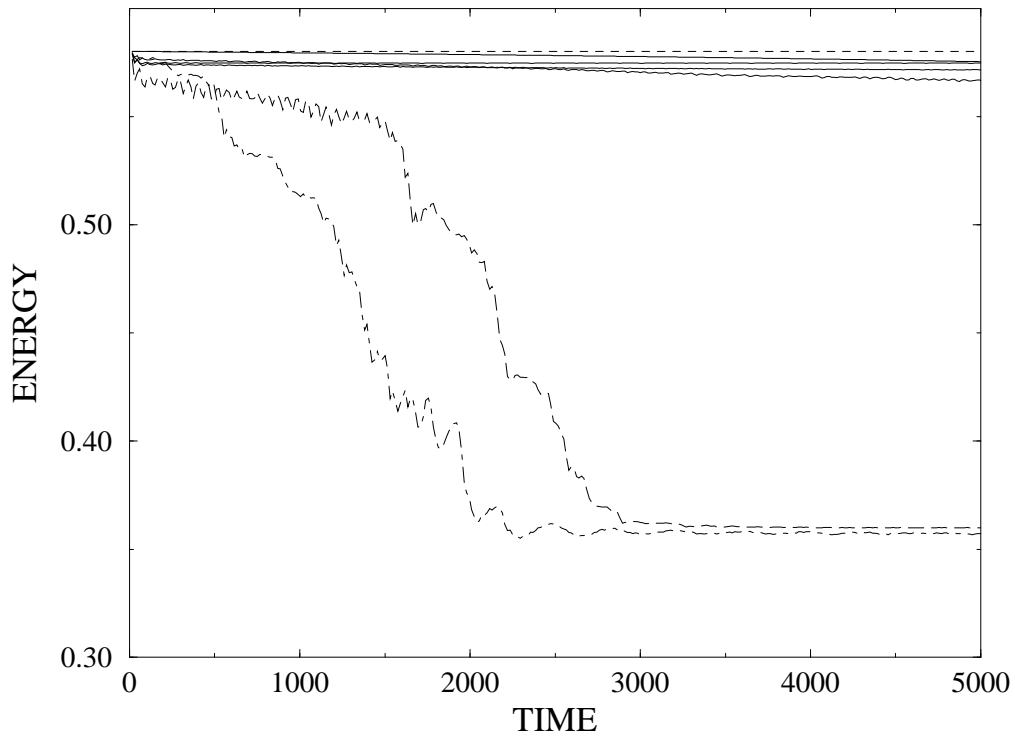


Рис. 2.4: Временная зависимость $e_{(5)}(t)$. Верхняя пунктирная линия — полная энергия. Четыре сплошные линии — для начальных условий, соответствующих неподвижным точкам отображения в островах 1 и 2 (рис. 2.3), большему тору в острове 1 и тору в острове 2 (рис. 2.3). Штриховая линия — для начальных условий, соответствующих тору в острове 3; штрихпунктирная линия — для начальных условий, соответствующих хаотической траектории (рис. 2.3).

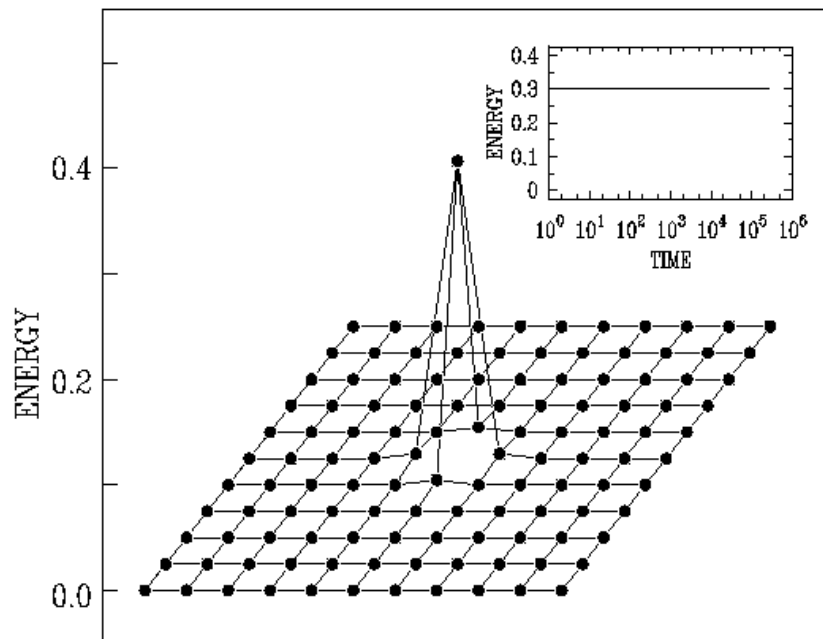


Рис. 2.5: Распределение энергии по решетке для локализованного решения с энергией $E = 0.3$ в момент времени $t = 3000$. Закрашенные кружки отмечают локальную энергию на каждом узле решетки. Врезка: временная зависимость энергии в окрестности центра бризера $e_{(5)}(t)$.

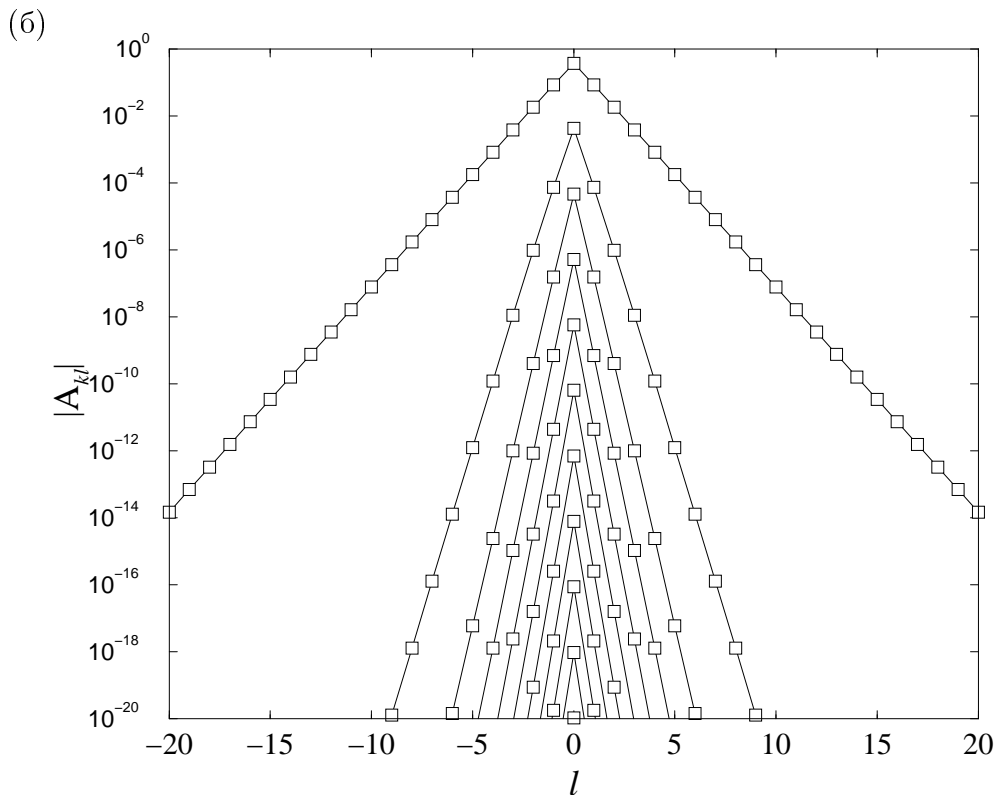
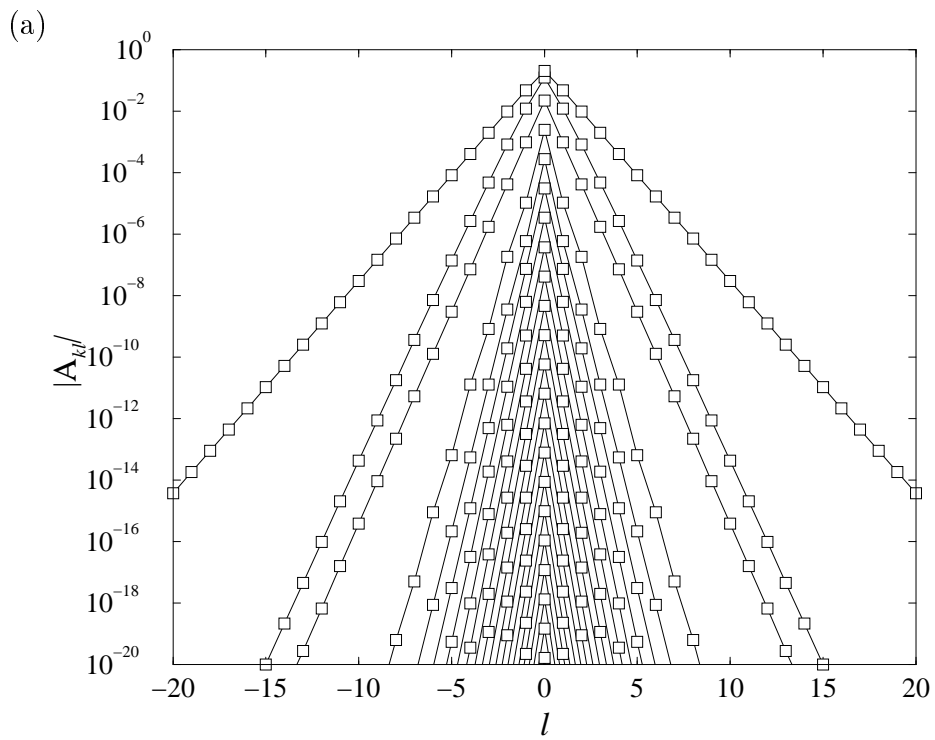


Рис. 2.6: Дискретные бризеры, найденные методом итерации коэффициентов Фурье.
 (а): $v_2 = 2$, $v_3 = -3$, $v_4 = 1$, $w_2 = 0.1$; (б): $v_2 = 1$, $v_4 = 1$, $w_2 = 0.1$. Показан участок цепочки из 100 элементов.

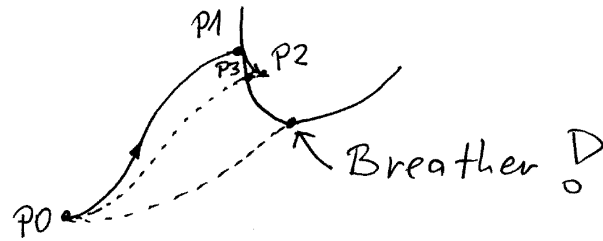


Рис. 2.7: Схематическое представление алгоритма поиска седловой точки функции S (2.28), соответствующей бризерному решению.

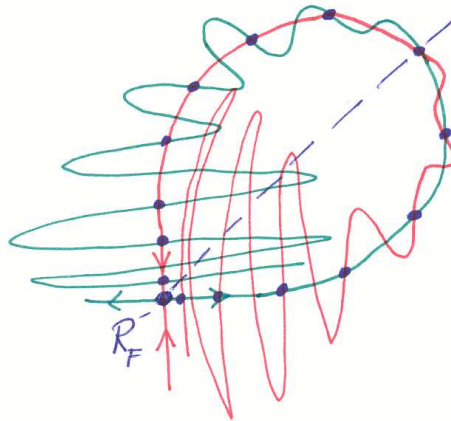


Рис. 2.8: Схема расположения устойчивого и неустойчивого многообразий седловой неподвижной точки отображения (2.31). Точки — гомоклиническая траектория. Штриховая линия — диагональ $x = y$.

Phase Space

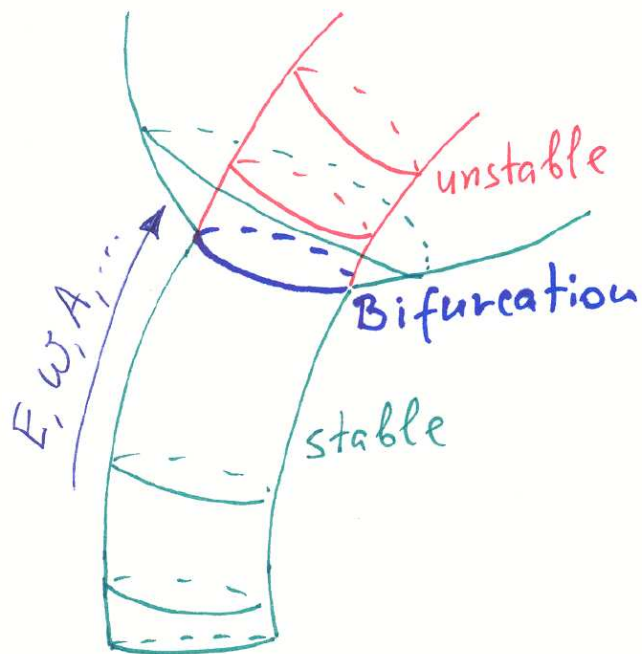


Рис. 2.9: Схематическое изображение семейства изолированных периодических орбит: устойчивые орбиты и неустойчивые, бифуркация.

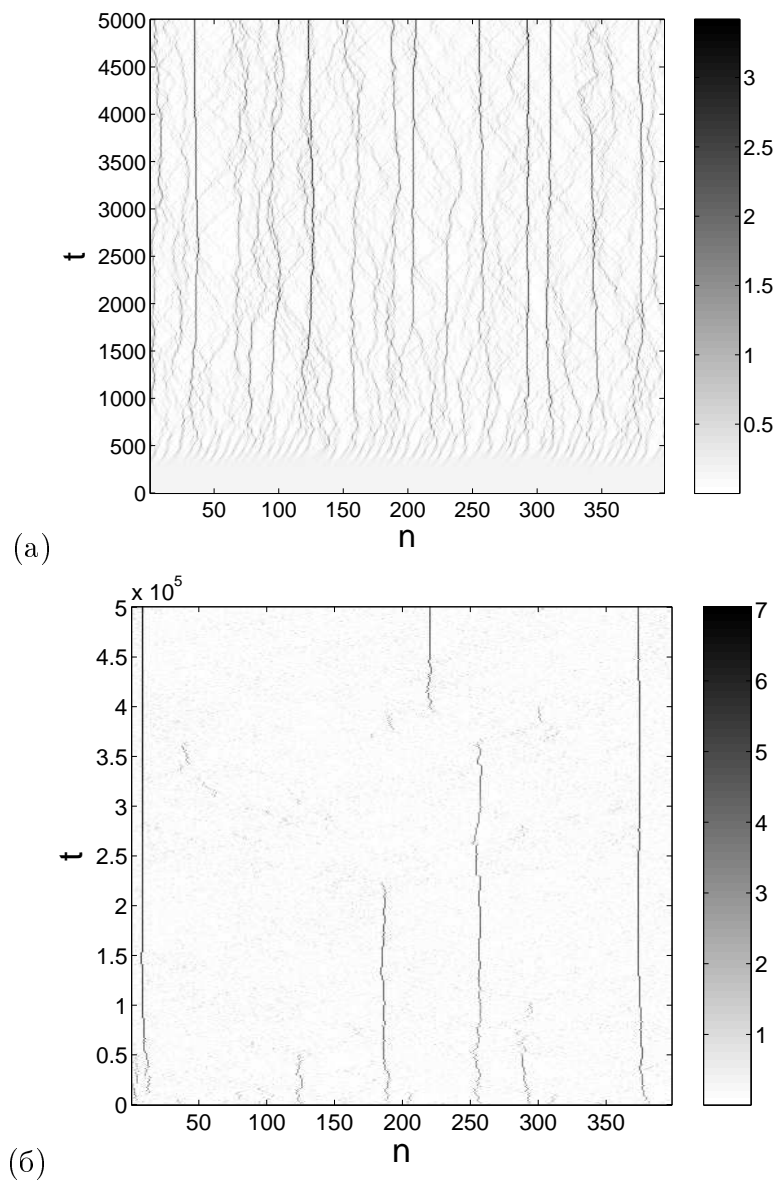


Рис. 2.11: Эволюция плотности энергии в цепочке (параметры указаны в тексте) на двух различных масштабах времени. Ось абсцисс — номер узла, ось ординат — время. Градациями серого отображается величина плотности энергии (белый — нуль, черный — наибольшее наблюдаемое значение).

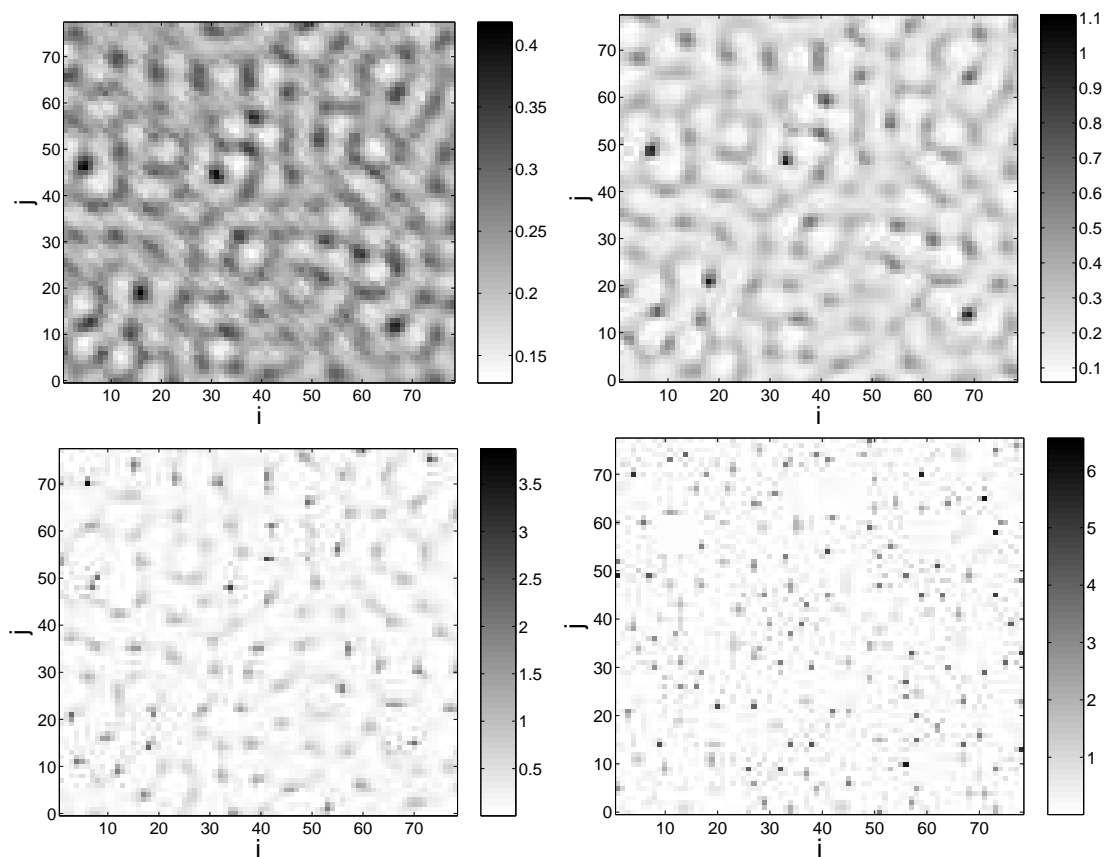


Рис. 2.12: Снимки плотности энергии в моменты времени $t = 400$ (а), 450 (б), 500 (в), 5000 (г) в квадратной решетке с параметрами, указанными в тексте. Плотность энергии отображается градациями серого от белого (нуль) до черного (наибольшее наблюдаемое значение).

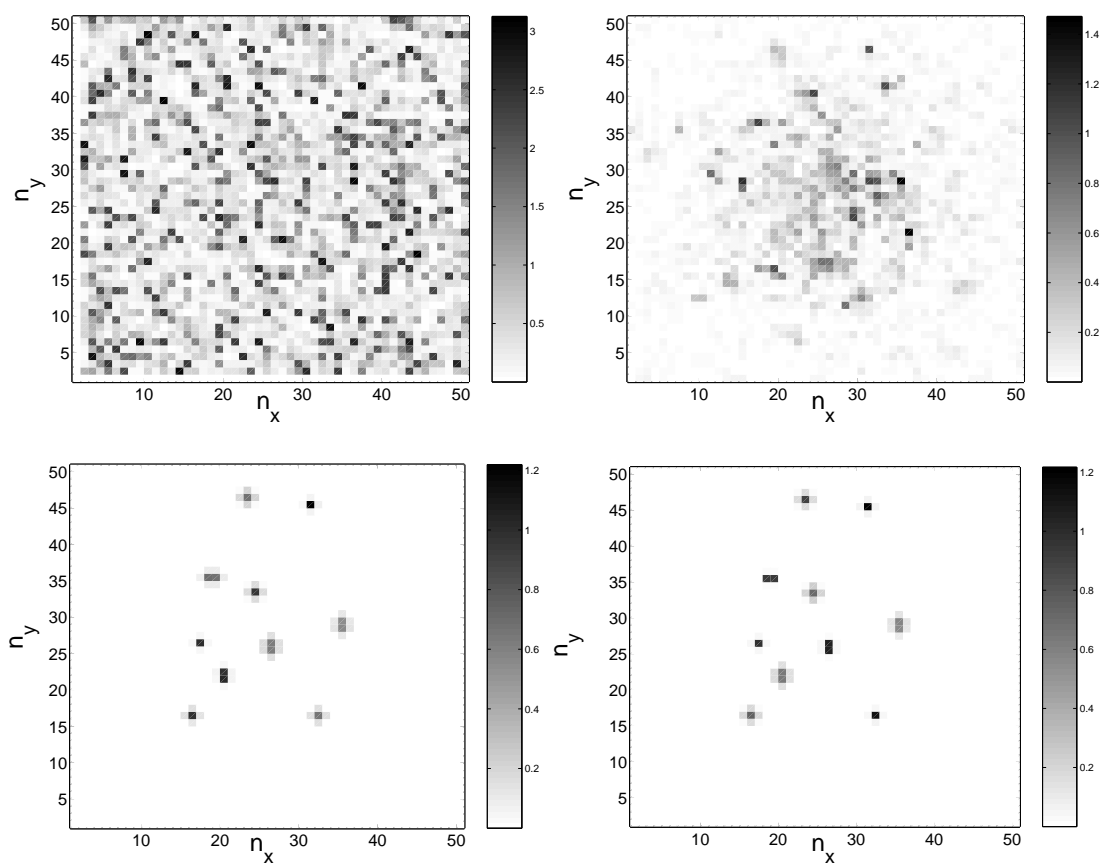


Рис. 2.13: Эволюция плотности энергии в остывающей двумерной решетке (см. пояснения в тексте).

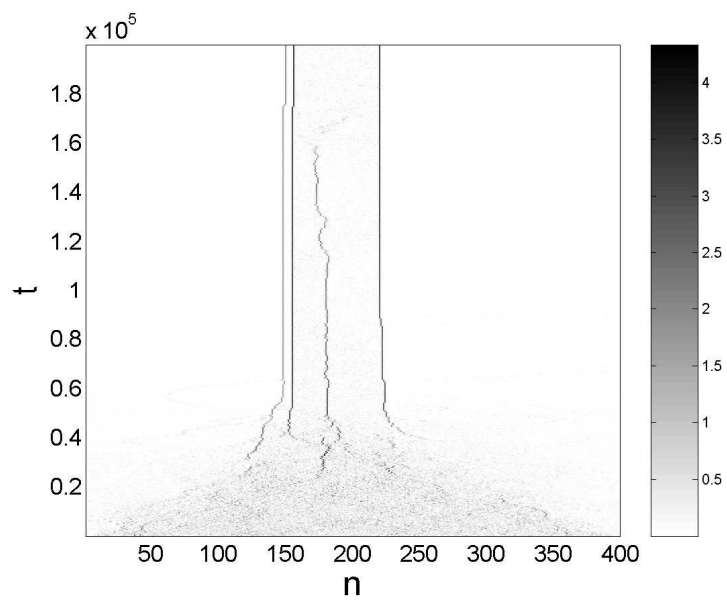


Рис. 2.14: Эволюция плотности энергии в остывающей одномерной решетке (см. пояснения в тексте)

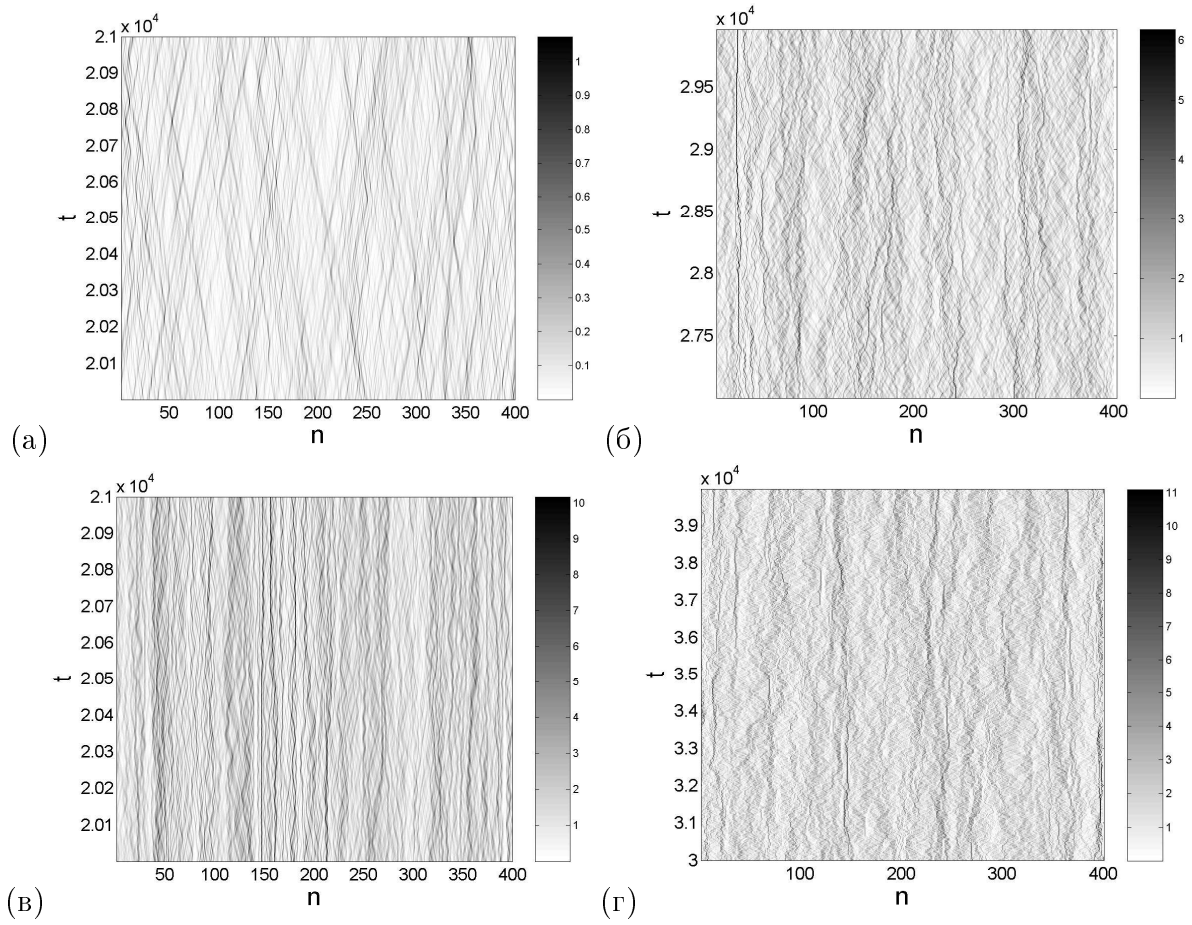


Рис. 2.15: Эволюция плотности энергии в одномерной цепочке после установления теплового равновесия: $c = 1$ (а), $c = 3$ (б), $c = 4$ (в, г).

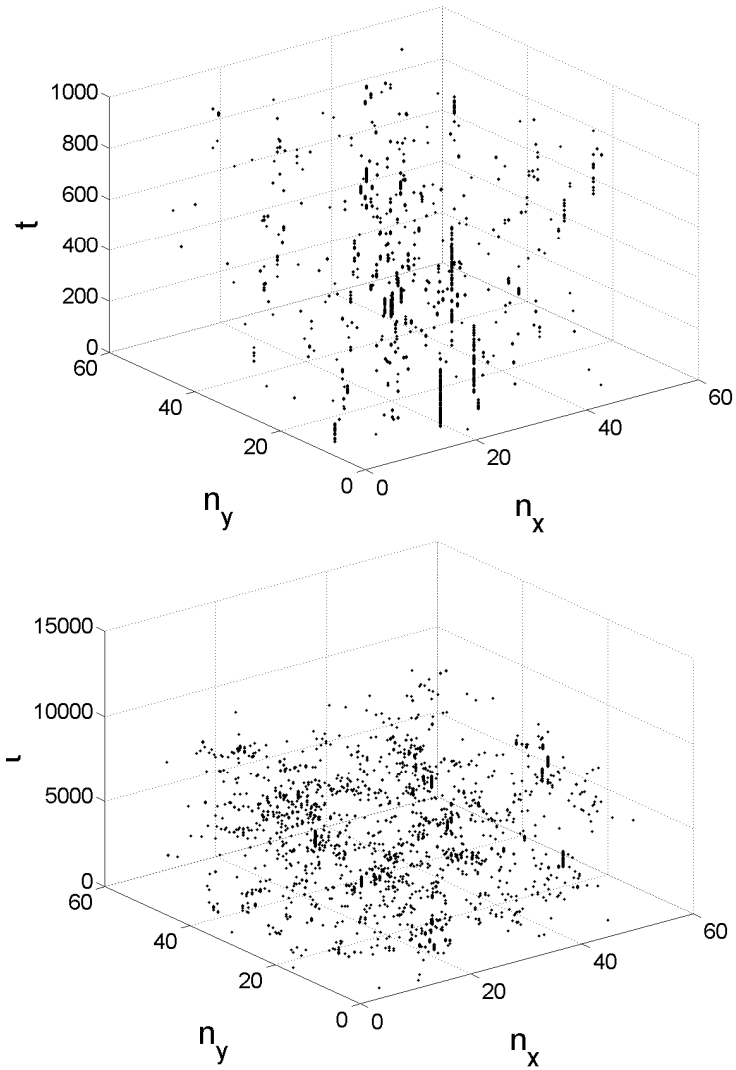


Рис. 2.16: Эволюция энергии в двумерной решетке на двух различных масштабах времени. В обоих случаях $c = 5$.

Глава 3

Квантовые бризеры

3.1 Понятие квантового бризера

В связи с приложениями к задачам молекулярной биологии возникает естественный вопрос, что произойдет с дискретными бризерами, если перейти от классической задачи к соответствующей квантовой [48]. Поскольку уравнение Шредингера линейно и трансляционно-инвариантно, все его собственные состояния удовлетворяют теореме Блоха. Таким образом, собственные состояния решеточного гамильтониана не могут быть пространственно-локализованными (на решетке). С другой стороны, вопрос о соответствии между квантовой задачей о собственных состояниях и классической — об эволюции системы во времени при наличии дискретных бризеров — требует решения.

Концепция туннелирования дает возможность ответить на этот вопрос. Рассуждая «на пальцах», задача состоит в том, чтобы проквантовать семейство периодических орбит, соответствующих дискретным бризерам, локализованным на определенном узле решетки. Заметим, что количество таких семейств равно числу узлов решетки. Квантование (например, по Бору-Зоммерфельду) даст некоторые собственные значения. Поскольку такую процедуру можно применить к любому из семейств бризеров, различающихся лишь точкой локализации, имеет место N -кратное вы-

рождение, где N есть число узлов решетки. За исключением тривиального случая несвязанных узлов, это вырождение снимается, приводя к расщеплению уровней. Следовательно, дискретным бризерам соответствует семейство зон конечной ширины, которые, вообще говоря, могут быть гибридизованы с другими состояниями. Эти зоны будем называть зонами квантовых бризеров. Ширина этих зон имеет смысл обратного времени туннелирования такого полуклассического бризера между соседними узлами решетки.

Таким образом, можно ожидать следующего: если классическая система имеет дискретные бризеры, то ее квантовый аналог (в квазиклассическом пределе) должен характеризоваться узкими зонами собственных состояний, близких к вырождению. Число состояний в каждой зоне равно N , а их волновые функции имеют вид блоховских суперпозиций квазиклассических собственных состояний, получаемых квантованием классических орбит по Бору-Зоммерфельду. Зоны считаются узкими по сравнению с характерным межзонным расстоянием в данной области спектра, а квазиклассический предел предполагает большие значения собственных чисел.

Характерное свойство квантовых бризерных состояний — экспоненциальная локализация пространственных корреляционных функций [49]. В этом смысле квантовые бризеры образуют класс связанных частицеподобных состояний.

Интуитивно понятно, что для больших энергий и количества узлов N плотность состояний также становится высокой. Возникает вопрос, как это повлияет на зоны квантовых бризеров, в частности, приведет ли гибридизация с другими (небризерными) состояниями к делокализации корреляционных функций. Также представляет интерес вопрос, к чему приводит неинтегрируемость большинства классических дискретных систем, имеющих бризерные решения. С позиций квазиклассического подхода (квантование классических траекторий в фазовом пространстве) можно ожидать, что классические хаотические траектории, в типичном случае окружающие бризерную орбиту, могут повлиять на квантовое бризерное состояние.

Численное исследование квантовых бризеров принципиально ограничивается возможностями численного счета ввиду большой вычислительной сложности. В идеале представляет интерес исследование квантовой задачи в области больших энергий (чтобы отследить связь с классическим случаем) и на большой решетке. Это невозможно при доступных в настоящее время вычислительных ресурсах, поскольку решение квантовой задачи требует диагонализации матриц ранга b^N , где b — число состояний на узел, которое должно быть большим для установления связи с классическим случаем. Поэтому имеющиеся к настоящему времени численные исследования квантовых бризерных состояний ограничиваются одномерным случаем с небольшим числом узлов ($N \leq 8$) [49], [50], [51].

Одно из немногих исключений — это квантовое дискретное нелинейное уравнение Шредингера с гамильтонианом [52]

$$H = - \sum_{l=1}^N \left[\frac{1}{2} (a_l^\dagger a_l)^2 + C (a_l^\dagger a_{l+1} + h.c.) \right] \quad (3.1)$$

и коммутационными соотношениями

$$a_l a_m^\dagger - a_m^\dagger a_l = \delta_{lm} , \quad (3.2)$$

где $h.c.$ обозначает эрмитово сопряженное слагаемое, а δ_{lm} — символ Кронекера. В этой системе сохраняется число квантов

$$B = \sum_l n_l , \quad n_l = a_l^\dagger a_l . \quad (3.3)$$

Для b квантов и N узлов число базисных состояний равно

$$\frac{(b + N - 1)!}{b!(N - 1)!} . \quad (3.4)$$

В случае $b = 0$ имеется только основное вакуумное состояние. При $b = 1$ существует N состояний, соответствующих одноквантовым возбуждениям. Эти состояния подобны классическим стоячим волнам. При $b = 2$ задача все еще решается точно, поскольку соответствует задаче двух тел на решетке.

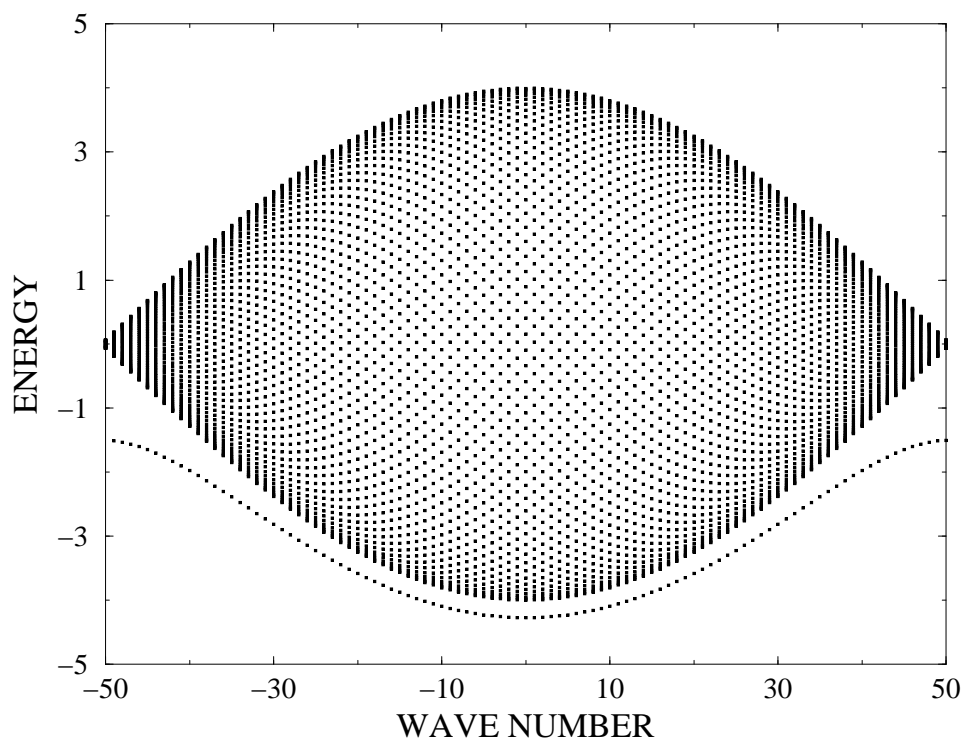


Рис. 3.1: Спектр квантового дискретного нелинейного уравнения Шредингера при $b = 2$ и $N = 101$. Собственные значения энергии построены в зависимости от волнового числа собственного состояния.

Численное решение двухквантовой задачи показано на рис. 3.1 [52]. В спектре выделяются широкая зона «инфинитного» движения двух частиц и изолированная кривая, расположенная ниже. Эта кривая соответствует квазичастичным состояниям, характеризуемым единственным квантовым числом (связанным с волновым числом q). Это — связанные состояния двух частиц. Дисперсионное соотношение для этих состояний имеет вид [52]

$$E = -\sqrt{1 + 16C^2 \cos^2\left(\frac{q}{2}\right)}. \quad (3.5)$$

Любое собственное состояние из этого семейства характеризуется экспоненциальным спаданием пространственных корреляционных функций. Это значит, что вероятность обнаружить частицы на расстоянии в заданное количество узлов решетки (определяемая интегралом перекрытия такого собственного состояния с базисным состоянием, где частицы находятся на заданном расстоянии) спадает экспоненциально с увеличением расстояния. Заметим, что в случае $q = \pm\pi$ связанное состояние является компактным в том смысле, что его проекция на базисные состояния с ненулевым расстоянием между частицами равна нулю (что означает нулевую вероятность обнаружить частицы на разных узлах решетки).

Увеличение числа квантов до $b = 3$ или выше требует численного расчета. Имеется программное обеспечение, использующее пакет `Maple`, позволяющее решать задачи с параметрами вплоть до $b = 4$ и $N = 14$ [53]. Размерность пространства состояний в этом случае составляет около 3000. Такие многоквантовые задачи позволили обнаружить много новых структур в спектрах, однако проблема более систематического исследования остается открытой.

Поскольку квазиклассический предел все еще недостижим для больших систем, рассмотрим в следующих разделах некоторые простые квантовые системы, позволяющие довести значения энергий до квазиклассических значений.

3.2 Квантовый димер

Имеется серия публикаций о свойствах квантового димера [54],[55],[56]. Эта модель описывает динамику бозонов на двух узлах решетки. Система имеет два интеграла движения: число бозонов и энергию, а значит, она полностью интегрируема. Под пространственной локализацией в такой модели можно понимать только нарушение симметрии между двумя узлами.

Классические уравнения движения при наличии нелинейных членов допускают решения, не инвариантные относительно перестановки местами двух узлов. Можно полностью проанализировать фазовое пространство классической системы и выделить изолированные семейства периодических орбит. В определенной области параметров имеются три таких семейства: одно инвариантное и два неинвариантных относительно перестановки.

Исследование квантового димера обнаружило существование пар собственных состояний с близкими энергиями [54]. Можно установить соответствие между структурой фазового пространства классического димера и спектром квантового димера [56].

Гамильтониан классической задачи имеет вид

$$H = \Psi_1^* \Psi_1 + \Psi_2^* \Psi_2 + \frac{1}{2} ((\Psi_1^* \Psi_1)^2 + (\Psi_2^* \Psi_2)^2) + C (\Psi_1^* \Psi_2 + \Psi_2^* \Psi_1) \quad , \quad (3.6a)$$

а уравнения движения

$$\dot{\Psi}_{1,2} = i\partial H / \partial \Psi_{1,2}^* \quad . \quad (3.6b)$$

Эта модель сохраняет норму (или число частиц) $B = |\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2$.

Изолированные семейства периодических орбит удовлетворяют условию

$$\text{grad}H \parallel \text{grad}B \quad .$$

Перейдем в (3.6) к новым переменным

$$\Psi_{1,2} = A_{1,2} e^{i\phi_{1,2}} \quad , \quad A_{1,2} \geq 0 \quad .$$

Тогда для периодических орбит амплитуды $A_{1,2}$ постоянны во времени, а фазы связаны соотношением

$$\phi_1 = \phi_2 + \Delta, \quad \Delta = 0, \pi$$

и нарастают линейно со временем:

$$\dot{\phi}_{1,2} = \omega.$$

Решая алгебраические уравнения для амплитуд периодических орбит, найдем три семейства орбит P_1, P_2, P_3 :

$$P_1 : \quad A_{1,2}^2 = \frac{1}{2}B, \quad \Delta = 0, \quad \omega = 1 + C + \frac{1}{2}B, \quad (3.7a)$$

$$P_2 : \quad A_{1,2}^2 = \frac{1}{2}B, \quad \Delta = \pi, \quad \omega = 1 - C + \frac{1}{2}B, \quad (3.7b)$$

$$P_3 : \quad A_1^2 = \frac{1}{2}B \left(1 \pm \sqrt{1 - 4C^2/B^2} \right), \quad \Delta = 0, \quad \omega = 1 + B. \quad (3.7c)$$

Семейство P_3 соответствует двум решениям эллиптического типа, нарушающим перестановочную симметрию. Семейство P_3 существует при $B \geq B_b$, где $B_b = 2C$, и рождается в результате бифуркации из P_1 . Соответствующее сепаратрисное многообразие однозначно определяется энергией решения P_1 при заданном значении $B \geq B_b$. Это многообразие разделяет три области в фазовом пространстве: две с решениями, нарушающими перестановочную симметрию (каждая из них содержит по ветви семейства P_3), и одну, состоящую из перестановочно-инвариантных решений (содержащую эллиптическую орбиту P_2). Сепаратрисное многообразие содержит гиперболические орбиты P_1 . При $B \leq B_b$ существуют только два семейства периодических орбит — P_1 и P_2 , оба эллиптического типа. Отметим, что система (3.6) не имеет других периодических орбит, других сепаратрис и других бифуркаций, кроме упомянутых.

В завершение анализа классического случая, перечислим энергетические свойства различных областей фазового пространства, разделенных сепаратрисным многообразием. Можно показать, что периодические орбиты (3.7a)-(3.7c) соответствуют максимумам, минимумам и седловым точкам энергии при фиксированном значении

B , причем нет других экстремумов или седловых точек. Соответствующие значения энергии

$$E_1 = H(P_1) = B + \frac{1}{4}B^2 + CB , \quad (3.8a)$$

$$E_2 = H(P_2) = B + \frac{1}{4}B^2 - CB , \quad (3.8b)$$

$$E_3 = H(P_3) = B + \frac{1}{2}B^2 + C^2 . \quad (3.8c)$$

При $B < B_b$ имеем $E_1 > E_2$ (P_1 — максимум, P_2 — минимум). При $B \geq B_b$ получаем $E_3 > E_1 > E_2$ (P_3 — максимумы, P_1 — седловая точка, P_2 — минимум).

Если $B < B_b$, то все траектории перестановочно-инвариантны. Если $B \geq B_b$, то траектории с энергиями $E_1 < E \leq E_3$ не инвариантны, а траектории $E_2 \leq E \leq E_1$ инвариантны относительно перестановки узлов.

Квантовая задача получается заменой комплексных величин Ψ, Ψ^* в (3.6a) на операторы уничтожения и рождения бозонов a, a^+ со стандартными коммутационными соотношениями. Чтобы сохранить инвариантность относительно перестановки $\Psi \Leftrightarrow \Psi^*$, необходимо предварительно заменить произведение $\Psi\Psi^*$ тождественным симметричным выражением $1/2(\Psi\Psi^* + \Psi^*\Psi)$:

$$H = \frac{5}{4} + \frac{3}{2} (a_1^+ a_1 + a_2^+ a_2) + \frac{1}{2} ((a_1^+ a_1)^2 + (a_2^+ a_2)^2) + C (a_1^+ a_2 + a_2^+ a_1) . \quad (3.9)$$

Отметим, что здесь $\hbar = 1$, а значит, собственные числа b оператора $B = a_1^+ a_1 + a_2^+ a_2$ — целые числа. Поскольку B коммутирует с H , можно диагонализировать гамильтониан в базисе собственных функций оператора B . Каждое собственное значение b соответствует подпространству размерности $(b + 1)$ в пространстве собственных функций оператора B . Эти собственные функции представляют из себя прямое произведение состояний с заданным числом бозонов $|n\rangle$ на каждой из степеней свободы и могут быть обозначены символом $|n, m\rangle$, что означает n бозонов на узле 1 и m бозонов на узле 2. При заданном значении b имеем $m = b - n$, а значит, каждое состояние можно идентифицировать одним номером n : $|n, (b - n)\rangle \equiv |n\rangle$.

Следовательно, задача о собственных числах при фиксированном b сводится к диагонализации матрицы

$$H_{nm} = \begin{cases} \frac{5}{4} + \frac{3}{2}b + \frac{1}{2}(n^2 + (b-n)^2), & n = m \\ C\sqrt{n(b+1-n)}, & n = m + 1 \\ C\sqrt{(n+1)(b-n)}, & n = m - 1 \\ 0, & \text{для других } n \end{cases} \quad (3.10)$$

где $n, m = 0, 1, 2, \dots, b$. Отметим, что H_{nm} — это симметричная трехдиагональная матрица. Дополнительная симметрия $H_{nm} = H_{(b-n), (b-m)}$ является следствием симметрии H относительно перестановки узлов.

При $C = 0$ матрица H_{nm} становится диагональной, причем каждое ее собственное значение двукратно вырождено (за исключением случая $|b/2|$ для четных значений b). Классическое фазовое пространство содержит только перестановочно-неинвариантные траектории за исключением орбит P_2 и сепаратрисного многообразия, содержащего P_1 (фактически, в этом пределе сепаратрисное многообразие представляет из себя резонансный тор, содержащий оба семейства орбит P_1 и P_2). Таким образом, за исключением сепаратрисного многообразия, все торы нарушают перестановочную симметрию и образуют две группы, разделенные сепаратрисой. При квантовании они дадут пары вырожденных собственных значений, по одному на каждую группу.

Соответствие между классической и квантовой задачами в случае диагонального ($C = 0$) гамильтониана H_{nm} можно представить следующим образом. Собственные значения $H_{00} = H_{bb}$ соответствуют квантованным орбитам P_3 . С увеличением n , собственные значения $H_{nn} = H_{(b-n), (b-n)}$ соответствуют квантованным торам в окрестности P_3 . Наконец, состояния с $n = b/2$ при четном b или $n = (b-1)/2$ при нечетном b соответствуют торам, ближайшим к сепаратрисе.

Введение ненулевого C приведет к расщеплению всех пар собственных значений. Для малых b эти расщепленные уровни не имеют связи со свойствами классиче-

ской системы. Однако, в пределе большого b система переходит в квазиклассический режим, и, в силу интегрируемости системы, собственные функции должны соответствовать тора́м в классическом фазовом пространстве в соответствии с правилами квантования Эйнштейна-Бриллюэна-Келлера.

При малом, но ненулевом C спектр состоит из пар собственных значений, связанных друг с другом симметрией соответствующих собственных состояний и малой величиной расщепления ΔE_n . Эти величины расщеплений были рассчитаны численно, а также с использованием теории возмущений [54], [56]. В пределе большого b эти расщепления экспоненциально малы для энергий выше энергии классической сепаратрисы (что соответствует классическим траекториям, не инвариантным относительно перестановки узлов). Для энергий ниже энергии классической сепаратрисы величина расщепления быстро нарастает до масштаба среднего межуровневого расстояния.

На рис. 3.2 представлены результаты диагонализации гамильтониана для 600 бозонов ($b = 600$) [56]. На врезке показан график плотности состояний в зависимости от энергии, подтверждающий наличие особенности в точке энергии классической сепаратрисы.

Для вычисления экспоненциально малых расщеплений необходимо использовать программные средства, позволяющие вести расчеты с любой требуемой точностью. Эту возможность предоставляет, например, пакет `Mathematica`. На рис. 3.3 показаны результаты численного расчета расщеплений (была задана точность 512 знаков) вместе с предсказанием теории возмущений. Как и ожидалось, величина расщеплений резко падает, когда энергия становится выше уровня классической сепаратрисы. Следовательно, на больших масштабах времени эти состояния будут следовать динамике классического состояния, нарушающего перестановочную симметрию.

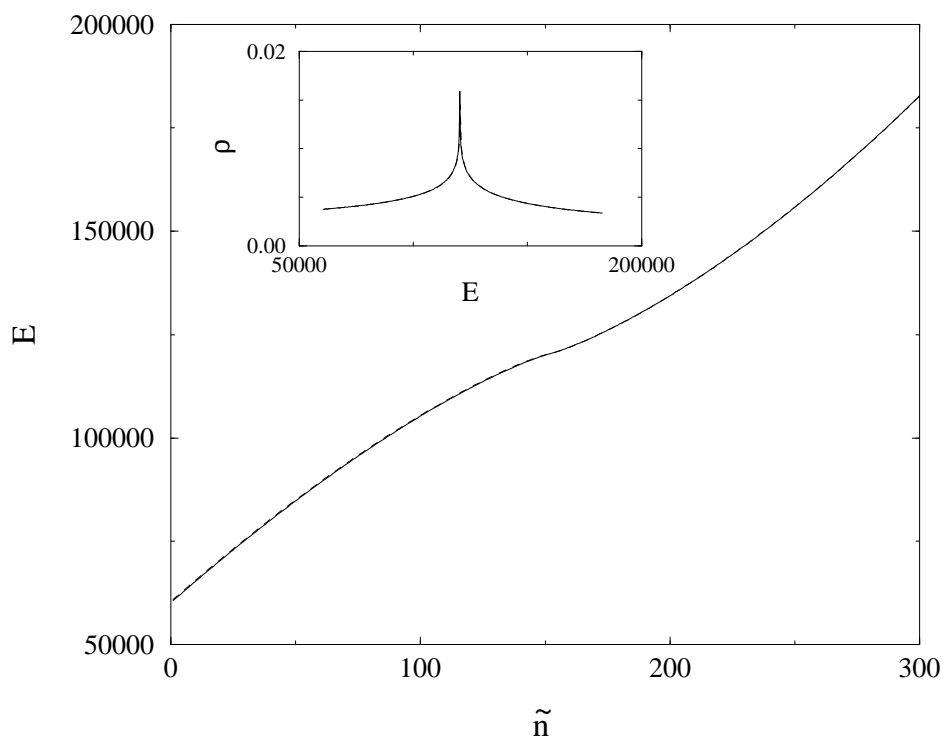


Рис. 3.2: Собственные значения гамильтониана в зависимости от номера состояния \tilde{n} для симметричных и антисимметричных состояний (для обоих типов состояний $0 < \tilde{n} < b/2$). Параметры: $b = 600$, $C = 50$. Врезка: Плотность состояний в зависимости от энергии.

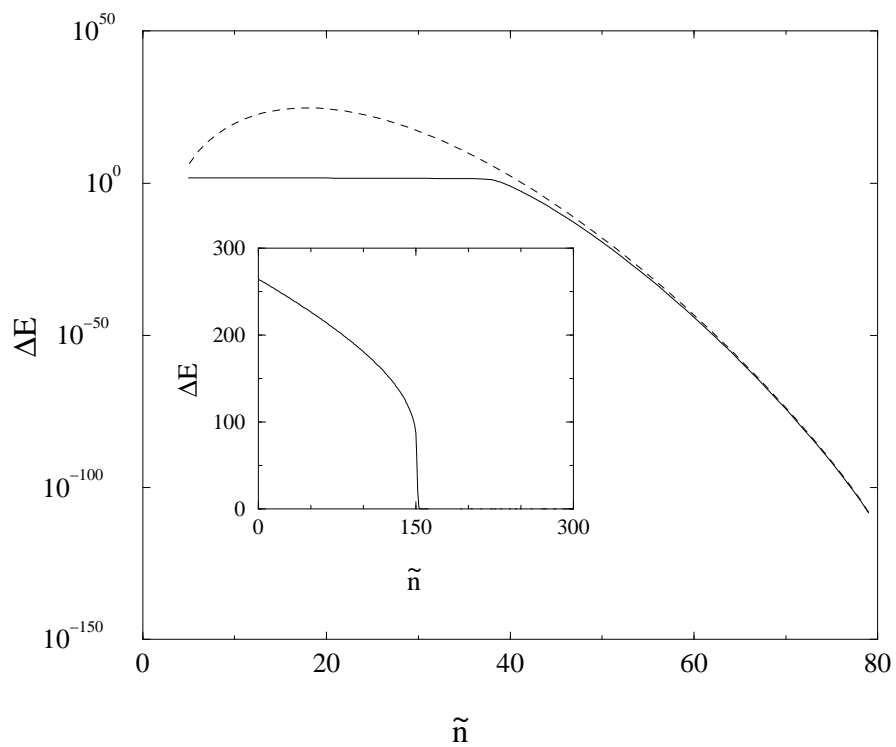


Рис. 3.3: Расщепление уровней в зависимости от \tilde{n} для $b = 150$ и $C = 10$. Сплошная линия — численный результат, штриховая линия — теория возмущений. Врезка: То же для $b = 600$ и $C = 50$ (только численный результат).

3.3 Квантовый тример

Димер, будучи полностью интегрируемой системой, не имеет хаотических решений. В отличие от димера, тример (система с тремя степенями свободы) неинтегрируем, т.к. добавление одной степени свободы не сопровождается появлением нового интеграла движения. В то же время, будучи все еще достаточно простой системой, тример позволяет провести численное исследование квантовой задачи в области больших энергий [57].

Подобно димеру, гамильтониан квантового тримера имеет вид

$$H = \frac{15}{8} + \frac{3}{2}(a_1^\dagger a_1 + a_2^\dagger a_2 + a_3^\dagger a_3) + \frac{1}{2} [(a_1^\dagger a_1)^2 + (a_2^\dagger a_2)^2] + C(a_1^\dagger a_2 + a_2^\dagger a_1) + \delta(a_1^\dagger a_3 + a_3^\dagger a_1 + a_2^\dagger a_3 + a_3^\dagger a_2) . \quad (3.11)$$

Оператор числа квантов $B = a_1^\dagger a_1 + a_2^\dagger a_2 + a_3^\dagger a_3$ снова коммутирует с гамильтонианом, что позволяет диагонализировать (3.11) в базисе собственных функций B . Для каждого конечного собственного значения b оператора B количество состояний конечно и равно $(b+1)(b+2)/2$. Таким образом, бесконечномерное гильбертово пространство разделяется на бесконечное множество конечномерных собственных подпространств оператора B . Элементы пространства состояний представляются в виде прямого произведения состояний с заданным числом квантов $|n\rangle$ на каждой степени свободы. Состояние с n квантами на узле 1, m квантами на узле 2 и l квантами на узле 3 будем обозначать символом $|n, m, l\rangle$.

Для заданного значения b имеем $l = b - m - n$, а значит, каждое состояние идентифицируется двумя числами (n, m) : $|n, m, (b - n - m)\rangle \equiv |n, m\rangle$.

Отметим, что третий узел, добавленный к димеру, не эквивалентен первым двум. На этом узле нет бозон-бозонного взаимодействия. Таким образом, узел 3 служит как бозонный резервуар, добавленный к димеру. Первые два узла в тримере эквивалентны, что приводит к перестановочной симметрии, аналогично случаю димера.

Матричные элементы гамильтониана (3.11) между состояниями с разным числом

квантов b равны нулю. Таким образом, для каждого заданного b задача сводится к диагонализации конечномерной матрицы. Матрица состоит из трехдиагональных блоков, где каждый блок на главной диагонали совпадает с матрицей димера (3.10), а ненулевые блоки вне главной диагонали содержат члены взаимодействия, пропорциональные δ . Поскольку H коммутирует с оператором перестановки узлов 1 и 2 \hat{P}_q , будем рассматривать симметричные $|\Psi\rangle_s$ и антисимметричные $|\Psi\rangle_a$ состояния. Структура соответствующих симметричной и антисимметричной составляющих гамильтониана H подобна структуре самого H .

Рассмотрим случай $b = 40$. Отбросим первые два члена в правой части (3.11), поскольку они приводят лишь к сдвигу спектра энергии на постоянную величину. Для расчета всех собственных чисел и собственных векторов с помощью стандартных процедур (написанных на языке Фортран) требуется время порядка нескольких секунд. На рис. 3.4 изображен участок спектра собственных значений энергии в зависимости от параметра δ при $C = 2$ [57].

Аналогично случаю димера, при $\delta = 0$ гамильтониан распадается на невзаимодействующие блоки, каждый из которых соответствует димеру с количеством бозонов от 0 до b . При $\delta \neq 0$ появляется межблочное взаимодействие, что приводит к определенным особенностям спектра, как, например, исчезновение пересечений. Полный спектр энергии простирается до значений порядка 10^3 , что означает среднее межуровневое расстояние порядка 10^0 . В верхней трети спектра плотность состояний ниже, чем в нижних двух третях.

Соответствие значений энергии и параметров с классическим аналогом задачи дается выражениями $E_{\text{кл}} = E_{\text{кв}}/b^2 + 1$, $C_{\text{кл}} = C_{\text{кв}}/b$ и $\delta_{\text{кл}} = \delta_{\text{кв}}/b$ (значение нормы V в классическом случае равно 1).

Основной результат этого расчета заключается в том, что туннелирующие пары собственных состояний с близкими собственными значениями энергии сохраняются при переходе к неинтегрируемому случаю $\delta \neq 0$. Однако, при определенных (за-

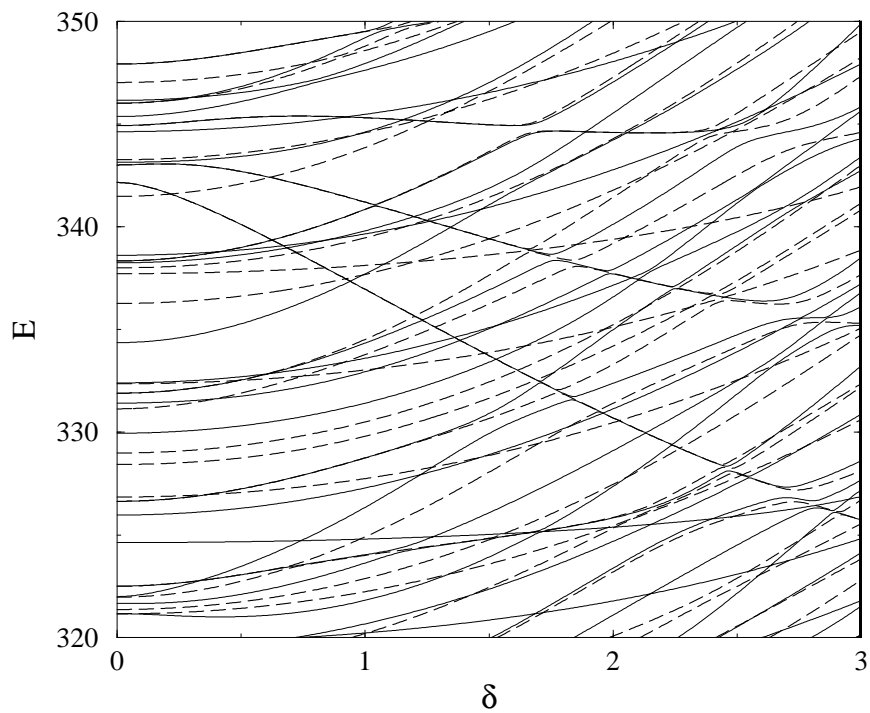


Рис. 3.4: Участок спектра собственных значений энергии квантового тримера в зависимости от δ при $b = 40$, $C = 2$. Каждая линия построена по расчетным точкам для некоторого состояния. Сплошные линии — симметричные состояния, штриховые линии — антисимметричные состояния.

висящих от конкретной пары) значениях δ пара может распасться. Из графиков на рис. 3.4 не видно, как ведут себя величины расщепления уровней в парах. На рис. 3.5 построен график величины расщепления в зависимости от δ для выбранной пары близких уровней (при $\delta = 0$ энергия уровней составляет $E \approx 342$) [58]. В случае $C = \delta = 0$ состояние системы однозначно определяется собственными числами x, y, z операторов числа квантов n_1, n_2, n_3 на каждом из узлов. В случае $C \neq 0, \delta \neq 0$ состояние может быть непрерывным образом отслежено при непрерывном изменении параметров вплоть до значений $C = \delta = 0$, а значит, снова может быть охарактеризовано целыми числами x, y, z (с точностью до перестановки первых двух чисел). В такой системе обозначений выбранная на рис. 3.5 пара уровней характеризуется значениями $(x, y, z) = (26, 0, 14)$ и $(0, 26, 14)$. При силе связи около $\delta \approx 2.67$ пара распадается (см. рис. 3.5), преодолевая перед этим около 30 сближений с другими уровнями.

Из рис. 3.5 видно, что величина расщепления возрастает примерно на 8 порядков при изменении δ от нуля до значения, слегка превышающего 0,5. Затем это быстрое (но, тем не менее, гладкое) нарастание переходит в немонотонную зависимость с резкими скачками (расщепление ΔE изменяется на несколько порядков при изменении δ лишь на единицы процентов). Эти скачки, различные по амплитуде, продолжаются с увеличением δ до тех пор, пока величина расщепления не приближается к среднему межуровневому расстоянию (порядка единицы в рассматриваемом случае). После этого можно считать пару распавшейся, так как ее невозможно различить среди остальных энергетических уровней.

На рис. 3.6 [58] уровнями серого изображены профили квадрата модуля волновых функций симметричного состояния из той же пары, которая рассматривалась выше, для значений параметра $\delta = 0, 0.3, 0.636, 1.0, 1.8$ (эти значения отмечены закрашенными кружками на рис. 3.5).

В качестве базисных выступают состояния с определенным числом квантов на

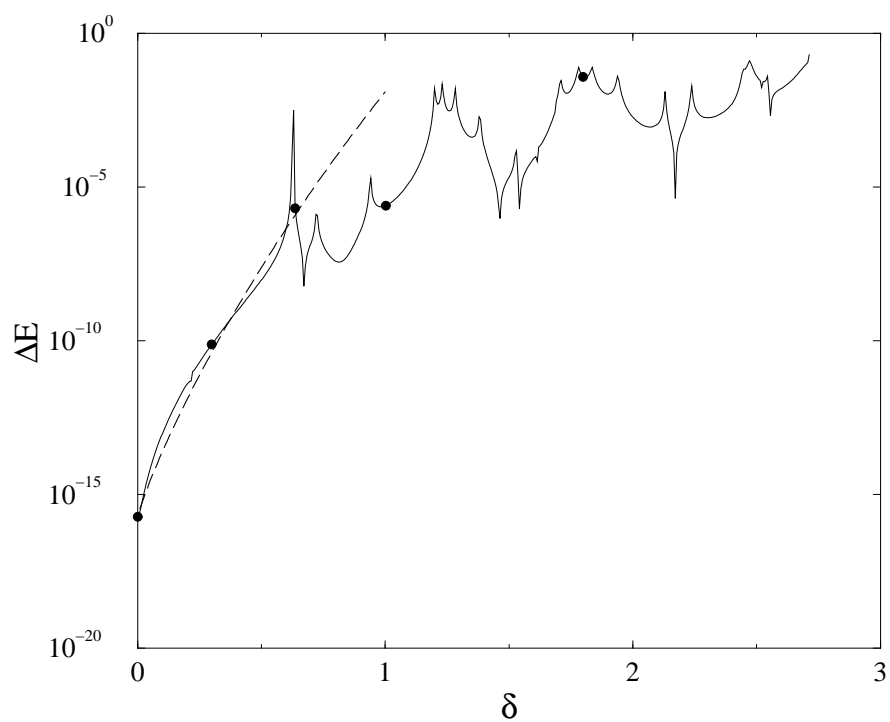


Рис. 3.5: Величина расщепления в зависимости от δ для выбранной пары близких уровней (см. текст). Сплошная линия — численный расчет. Штриховая линия — полуклассическое приближение. Закрашенные кружки — случаи, рассмотренные на рис. 3.6.

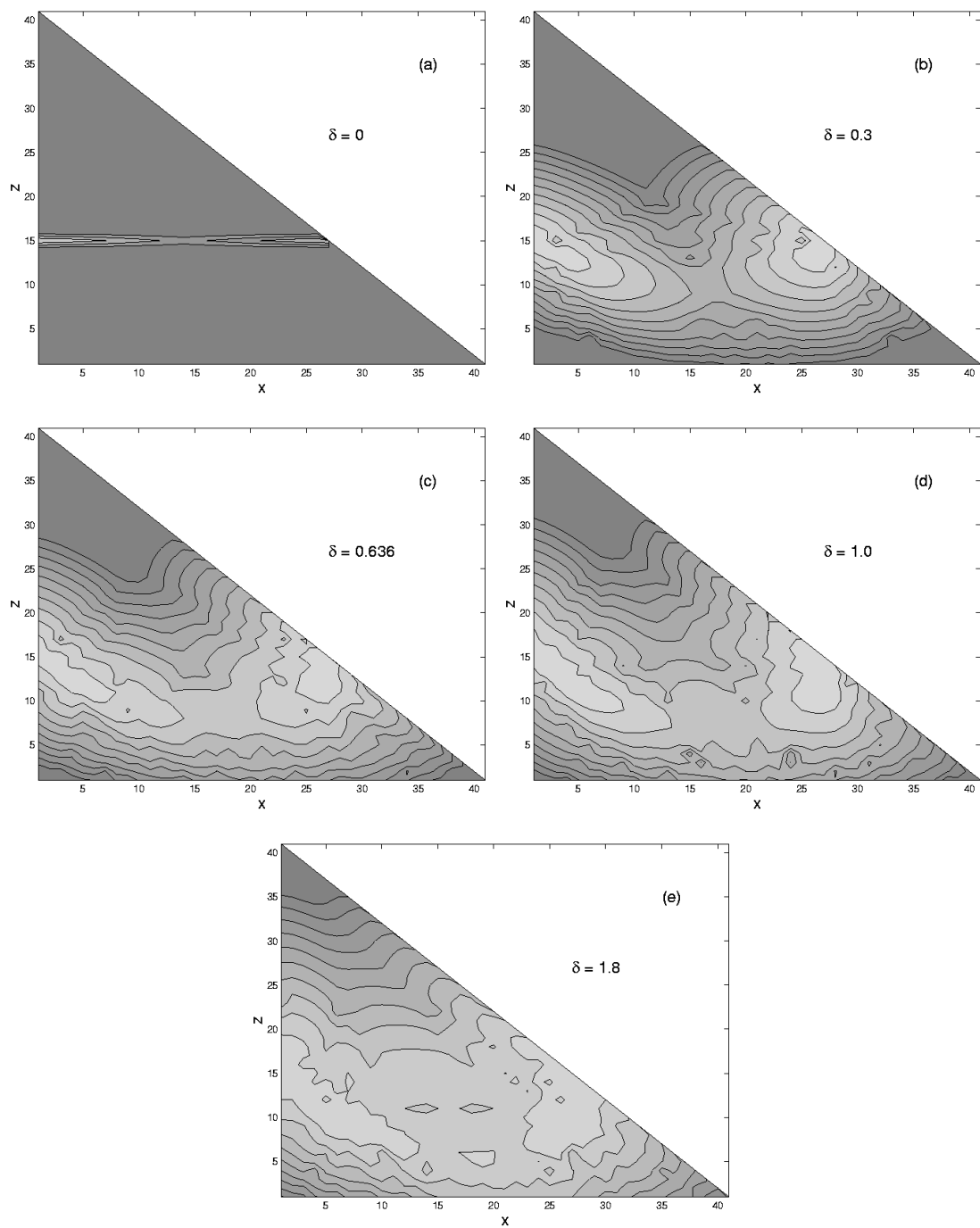


Рис. 3.6: Профили квадрата модуля волновых функций симметричного состояния из выбранной пары состояний для $\delta = 0, 0.3, 0.636, 1.0, 1.8$ (см. рис. 3.5). (a) — три уровня серого, (b-e) — десять уровней серого. Наименьшее значение изображаемой величины порядка 10^{-30} , наибольшее значение порядка 1.

каждом из узлов. Эти состояния обозначаются тройкой $|x, y, z\rangle$, где x, y, z — число квантов на узлах 1, 2, 3, соответственно. Благодаря коммутативности операторов B и H , состояние можно определить, задав полное количество квантов b и любые два из чисел x, y, z . При фиксированном $b = 40$ будем обозначать базисные состояния парой $|x, z\rangle$. На рис. 3.6 по оси абсцисс откладывается x , по оси ординат z . Эти графики дают информацию о ходе процесса туннелирования.

При $\delta = 0$ (рис. 3.6а) узел 3 с 14 квантами на нем изолирован и не участвует в динамике. Единственная возможность для оставшихся 26 квантов — туннелировать между узлами 1 и 2. Поэтому волновая функция компактна в проекции на ось z . Задача при этом сводится к димеру (см. раздел 3.2).

При введении ненулевой связи с третьим узлом, число квантов в димере (на узлах 1 и 2) более не сохраняется. Узел 3 действует как резервуар, который может обмениваться квантами с димером. Благодаря взаимодействию, волновая функция теряет компактность по оси z . Кроме того, с увеличением δ она прогибается в сторону меньших значений z .

Рассмотрим характер процесса туннелирования квантов с узла 1 на узел 2 (переход от больших значений x к малым). Вначале кванты туннелируют на узел 2 одновременно с узлов 1 и 3 (рис. 3.7(а)). Затем они туннелируют с узла 1 одновременно на узлы 2 и 3 (рис. 3.7(б)). С увеличением связи δ структура волновой функции усложняется, что, возможно, отражает информацию о структуре классического фазового пространства системы.

Итак, представляют интерес три основных наблюдения. Во-первых, величина расщепления (определяющая скорость туннелирования) возрастает на 8 порядков при увеличении δ от 0 до 0,5. Это кажется неожиданным, поскольку относительное смещение самих уровней при этом невелико (см. рис. 3.4). Квазиклассическое объяснение этого эффекта приведено в [58].

Второе наблюдение заключается в том, что туннелирование квантов в тримере

начинается с перетекания квантов из резервуара (узел 3) на пустой узел димера одновременно с потоком квантов с заполненного узла на пустой внутри димера. В конце процесса туннелирования изначально заполненный узел димера отдает кванты резервуару. Этот результат снова представляется неожиданным, поскольку это означает, что количество квантов в димере возрастает в процессе туннелирования, что, в соответствии с результатом для изолированного димера, должно снижать скорость туннелирования.

Эти два наблюдения оказываются тесно связанными друг с другом (см. детальное объяснение в [58]).

Третий результат связан с резонансными пиками и провалами на рис. 3.5. Резонансный характер раздвигания и сближения уровней (что означает ускорение и замедление туннелирования) связан со сближениями рассматриваемой пары с другими уровнями. Наличие этих резонансов означает, что малое изменение параметров системы может сильно влиять на скорость туннелирования. Этот эффект может представлять интерес с точки зрения создания спектроскопических устройств. На рис. 3.8 показаны четыре варианта сближения между парой уровней и одиночным уровнем, а также между двумя парами. Представлены графики изменения величины расщепления и самих энергетических уровней в зависимости от δ [58].

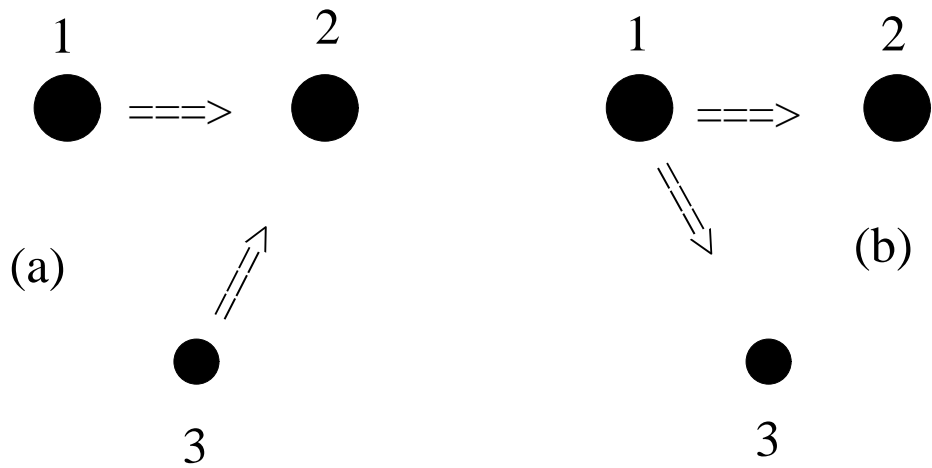


Рис. 3.7: Порядок туннелирования квантов в тримере. Большие кружки — узлы 1 и 2, меньший кружок — узел 3. Стрелками показано направление потока квантов.

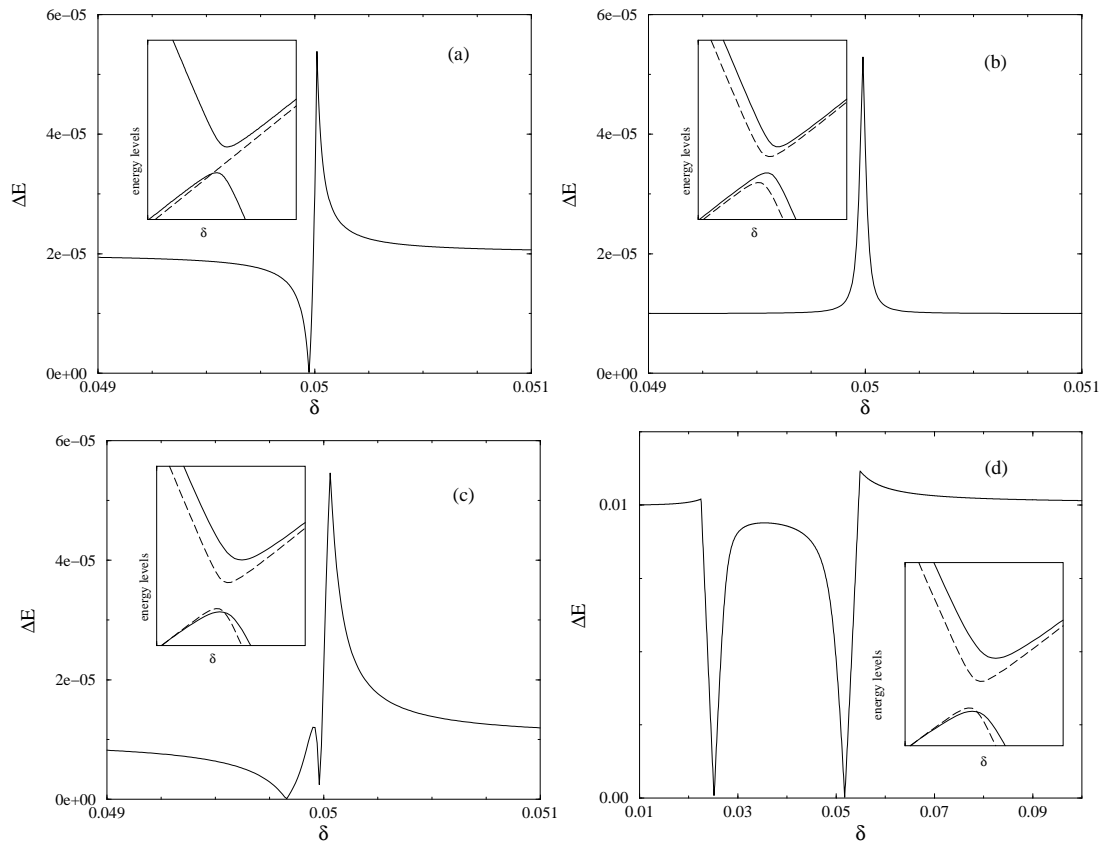


Рис. 3.8: Изменение величины расщепления уровней в окрестности точки сближения рассматриваемой пары уровней с другими уровнями. Врезки: Изменение энергетических уровней, участвующих в сближении. Сплошные линии — симметричные состояния, штриховые линии — антисимметричные состояния.

Заключение

В данном учебно-методическом материале были рассмотрены основные общие свойства бризерных решений, а также методы их численного и аналитического исследования в различных нелинейных решеточных системах.

Указаны условия существования дискретных бризеров, приведены методы оценки их пространственного масштаба локализации и исследования на устойчивость, а также дано обобщение этих методов для вращательных бризерных решений (ротобризеров) в диссипативных системах.

Описаны численные методы получения точных периодических бризерных решений (обладающих бесконечным временем жизни) для различных классов систем. Рассмотрены механизмы, приводящие к генерации бризеров с конечным временем жизни в различных физически реализуемых вариантах постановки численного эксперимента (модуляционная неустойчивость бегущей волны, остывание нагретого участка решетки, тепловое равновесие).

Рассмотрен квантовый вариант задачи о дискретных бризерах. Проанализированы частные случаи квантовых систем с двумя и тремя степенями свободы (димер и тример).

Список литературы

- [1] А. А. Овчинников, *ЖЭТФ* **57**, 263 (1969).
- [2] A. J. Sievers and S. Takeno, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 970 (1988).
- [3] S. Takeno and A. Sievers, *Solid State Commun.* **67**, 1023 (1988).
- [4] S. Takeno, K. Kisoda, and A. J. Sievers, *Prog. Theor. Phys. Suppl.* **94**, 242 (1988).
- [5] S. Flach and C. R. Willis, *Phys. Rep.* **295**, 182 (1998).
- [6] R. S. MacKay and S. Aubry, *Nonlinearity* **7**, 1623 (1994).
- [7] S. Flach, *Phys. Rev. E* **50**, 3134 (1994).
- [8] S. Aubry and T. Cretegny, *Physica D* **119**, 34 (1998).
- [9] S. Flach and K. Kladko, *Physica D* **127**, 61 (1999).
- [10] D. Campbell, S. Flach, and Y. Kivshar, *Physics Today* **57**, 43 (2004).
- [11] S. Flach and A. Gorbach, *Chaos* **15**, 015112 (2005).
- [12] M. Eleftheriou and S. Flach, *Physica D* **202**, 142 (2005).
- [13] E. N. Economou, *Green's Functions in Quantum Physics* (Springer-Verlag Berlin, 1990).
- [14] C. Baesens and R. S. MacKay, *Nonlinearity* **10**, 931 (1997).

- [15] A. Zygmund, *Trigonometric Series* (Cambridge University Press, 1968).
- [16] S. Flach, *Phys. Rev. E* **51**, 3579 (1995).
- [17] S. Flach, K. Kladko, and R. S. MacKay, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 1207 (1997).
- [18] S. Flach, *Phys. Rev. E* **58**, R4116 (1998).
- [19] Y. S. Kivshar, *Phys. Rev. E* **48**, R43 (1993).
- [20] F. Fischer, *Ann. Physik* **2**, 296 (1993).
- [21] S. Flach, *Phys. Rev. E* **51**, 1503 (1995).
- [22] J. L. Marín and S. Aubry, *Nonlinearity* **9**, 1501 (1996).
- [23] A. A. Ovchinnikov and S. Flach, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 248 (1999).
- [24] B. Dey, M. Eleftheriou, S. Flach, and G. Tsironis, *Phys. Rev. E* **65**, 017601 (2001).
- [25] A. Gorbach and S. Flach, *Phys. Rev. E* **72**, 056607 (2005).
- [26] S. Flach, K. Kladko, and S. Takeno, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 4838 (1997).
- [27] S. Aubry, *Physica D* **103**, 201 (1997).
- [28] J. L. Marin and S. Aubry, *Physica D* **119**, 163 (1998).
- [29] В. И. Арнольд, *Математические методы классической механики* (М.: Едиториал УРСС, 2003), 5-е изд.
- [30] A. H. Nayfeh, *Introduction to Perturbation Techniques* (John Wiley and Sons, New York, 1993).
- [31] S. Flach, *Physica D* **91**, 223 (1996).
- [32] M. I. Weinstein, *Nonlinearity* **12**, 673 (1999).

- [33] L. M. Floría, J. L. Marín, P. J. Martínez, F. Falo, and S. Aubry, *Europhys. Lett.* **36**, 539 (1996).
- [34] J. L. Marín, F. Falo, P. J. Martínez, and L. M. Floría, *Phys. Rev. E* **63**, 066603 (2001).
- [35] S. Takeno and M. Peyrard, *Phys. Rev. E* **55**, 1922 (1997).
- [36] S. Flach and C. R. Willis, *Phys. Lett. A* **181**, 232 (1993).
- [37] S. Flach, C. R. Willis and E. Olbrich, *Phys. Rev. E* **49**, 836 (1994).
- [38] S. Flach, K. Kladko and C. R. Willis, *Phys. Rev. E* **50**, 2293 (1994).
- [39] M. Peyrard, *Physica D* **119**, 184 (1998).
- [40] M.V. Ivanchenko, O.I. Kanakov, V.D. Shalfeev, S. Flach, *Physica D* **198**, 120 (2004).
- [41] T. Cretegny and S. Aubry, *Physica D* **113**, 162 (1998).
- [42] A. Bikaki, N. K. Voulgarakis, S. Aubry and G. P. Tsironis, *Phys. Rev. E* **59**, 1234 (1999).
- [43] T. Cretegny, S. Aubry and S. Flach, *Physica D* **119**, 73 (1998).
- [44] S. Flach, A. E. Mirochnishenko and M. V. Fistul, *CHAOS* **13**, 596 (2003).
- [45] G. P. Tsironis and S. Aubry, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 5225 (1996).
- [46] R. Reigada, A. Sarmiento and K. Lindenberg, *Phys. Rev. E* **64**, 066608 (2001).
- [47] S. Flach and G. Mutschke, *Phys. Rev. E* **49**, 5018 (1994).
- [48] R. S. MacKay, *Physica A* **288**, 174 (2000).
- [49] W. Z. Wang, J. T. Gammel, A. R. Bishop and M. I. Salkola, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 3598 (1996).

- [50] S. A. Schofield, R. E. Wyatt and P. G. Wolynes, *J. Chem. Phys.* **105**, 940 (1996).
- [51] P. D. Miller, A. C. Scott, J. Carr and J. C. Eilbeck, *Phys. Scr.* **44**, 509 (1991).
- [52] A. C. Scott, J. C. Eilbeck and H. Gilhoj, *Physica D* **78**, 194 (1994).
- [53] J. C. Eilbeck, in: *Localization and Energy Transfer in Nonlinear Systems*, Ed. L. Vazquez (World Scientific, Singapore, in press).
- [54] L. Bernstein, J. C. Eilbeck and A. C. Scott, *Nonlinearity* **3**, 293 (1990).
- [55] L. Bernstein, *Physica D* **68**, 174 (1993).
- [56] S. Aubry, S. Flach, K. Kladko and E. Olbrich, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 1607 (1996).
- [57] S. Flach and V. Fleurov, *J. Phys: Condens. Matter* **9**, 7039 (1997).
- [58] S. Flach, V. Fleurov and A. A. Ovchinnikov, *Phys. Rev. B* **63**, 094304 (2001).
- [59] J. Dorignac and S. Flach, *Phys. Rev. B* **65**, 214305 (2002).
- [60] S. R. Bickham, S. A. Kiselev and A. J. Sievers, *Phys. Rev. B* **47**, 14206 (1993).
- [61] S. Flach, K. Kladko and S. Takeno, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 4838 (1997).
- [62] O. Bang and M. Peyrard, *Phys. Rev. E* **53**, 4143 (1996).
- [63] M. Eleftheriou, S. Flach and G. P. Tsironis, *Physica D*, **186**, 20 (2003).
- [64] S. Flach, *Phys. Rev. E* **58**, R4116 (1998).