

Ondes solitaires pulsatoires en milieu discret

Y. Sire et G. James

Mathématiques pour l'Industrie et la Physique, UMR CNRS 5640
Département GMM, INSA,
135 avenue de Rangueil, 31077 Toulouse Cedex 4
sire@insa-toulouse.fr

Résumé

Nous montrons l'existence d'ondes solitaires pulsatoires (travelling breathers) dans des chaînes d'oscillateurs non linéaires. Chaque oscillateur est plongé dans un potentiel anharmonique et linéairement couplé à ses premiers voisins. La partie principale de ces solutions est décrite par l'équation de Schrödinger non linéaire. Cependant les solutions exactes admettent en général des oscillations à l'infini, dont l'amplitude ne tend pas vers 0 et est exponentiellement petite par rapport à la taille du centre.

Abstract

We show the existence of pulsating solitary waves (called travelling breathers) in nonlinear oscillator networks. Each oscillator is embedded in an anharmonic potential and linearly coupled to its nearest neighbors. The principal part of these solutions is described by a nonlinear Schrödinger equation. However, the exact solutions generically possess a nondecaying oscillatory tail, whose amplitude is exponentially small compared to central oscillations.

1 Introduction

Le problème de la localisation d'énergie vibrationnelle dans les milieux discrets et de son transport fait l'objet de recherches intensives dans différentes branches de la physique, par exemple en physique du solide [23], en optique non linéaire [20] ou en biophysique (notamment pour la dénaturation de l'ADN [5] et le transport de charge dans les biomolécules [7]). On peut se référer à [8] pour une revue détaillée de ce domaine de recherches, et à [4] pour un aperçu plus récent incluant des résultats expérimentaux.

Des oscillations spatialement localisées, encore appelées "breathers", apparaissent dans des conditions très générales sous l'effet des nonlinéarités et de la nature discrète du milieu (ce phénomène ne doit pas être confondu avec la localisation d'Anderson due au désordre). Ce type d'oscillations a été étudié d'un point de vue mathématique [17, 15, 3] en considérant des oscillations périodiques dans des chaînes infinies d'oscillateurs couplés (principalement pour des systèmes Hamiltoniens). De ce point de vue leur existence est maintenant bien comprise, mais leur importance dans les systèmes réels (en particulier les biomolécules) fait encore l'objet de nombreux débats [5, 7]. D'un point de vue général, des questions fondamentales sont par exemple si ce type d'oscillations peut exister en présence d'un bruit thermique important, et si leur durée de vie, ainsi que leur fréquence d'oscillation leur permettent de jouer un rôle dans des processus physiques spécifiques.

Le problème de la mobilité des breathers dans un milieu discret fait actuellement l'objet de nombreuses recherches au niveau fondamental. Ces aspects ont des conséquences importantes sur le transport d'énergie dans ce type de milieux. Par exemple, la collision de breathers en mouvement peut conduire à la formation d'oscillations localisées de grande amplitude et à leur piégeage [6].

Les breathers mobiles en milieu discret sont couramment appelés “travelling breathers” ou encore ondes solitaires pulsatoires. D’un point de vue mathématique leur existence est restée un problème ouvert jusqu’à récemment [16, 13, 22], mis à part dans certains modèles intégrables [1].

Dans le régime des petites amplitudes, on peut calculer des solutions approchées correspondant à des breathers mobiles, sous la forme d’ondes planes modulées dont l’enveloppe est spatialement localisée et décrite par l’équation de Schrödinger non linéaire [18]. Cependant cette analyse n’est a priori valide que pour des temps finis [11] et pour des enveloppes faiblement localisées.

Dans ce travail nous montrons, pour une classe de modèles couramment utilisés, qu’il existe des solutions *exactes* correspondant aux breathers approchés décrits par l’équation de Schrödinger non linéaire (nous résumons des résultats obtenus dans [16, 22]). Par ailleurs, ces solutions ne sont pas *génériquement* localisées au sens strict du terme, mais sont superposées à l’infini à une queue oscillante, exponentiellement petite par rapport aux oscillations centrales lorsque leur amplitude tend vers 0. Par ailleurs, en continuant numériquement ces solutions dans le régime des grandes amplitudes, nous montrons que des oscillations très localisées peuvent se propager sans dispersion [24, 2].

Le système que nous étudions par la suite est constitué d’un réseau d’oscillateurs non linéaires linéairement couplés à leurs premiers voisins. Chaque oscillateur est plongé dans un potentiel anharmonique V . Plus précisément, on considère le système

$$\frac{d^2 x_n}{d\tau^2} + V'(x_n) = \gamma(x_{n+1} + x_{n-1} - 2x_n), \quad n \in \mathbb{Z} \quad (1)$$

où x_n est le déplacement de la n ème particule par rapport à une position d’équilibre et $\gamma > 0$ une constante de couplage. On suppose que le potentiel anharmonique V est analytique sur un voisinage de 0 et admet le développement de Taylor $V(x) = \frac{1}{2}x^2 - \frac{a}{3}x^3 - \frac{b}{4}x^4 + \text{h.o.t.}$ en $x = 0$. Différentes preuves ont été données pour l’existence d’ondes progressives (solutions satisfaisant $x_n(\tau) = x_{n-1}(\tau - T)$ où T est une constante) dans des réseaux non linéaires (voir [9, 10, 14] et leurs références). Dans ce travail, nous étudions l’existence de solutions plus générales (ondes progressives pulsatoires) vérifiant la condition

$$x_n(\tau) = x_{n-p}(\tau - T), \quad (2)$$

l’entier $p \geq 2$ et $T > 0$ étant fixés. En particulier, les solutions qui vérifient (2) et $\lim_{\tau \rightarrow \pm\infty} x_n(\tau) = 0$ sont appelées *travelling breathers*. Dans cet exposé, nous nous limitons au cas $p = 2$ mais le cas général $p \geq 2$ est traité dans [22]. Le changement de variables $(u_1(t), u_2(t)) = (x_1(\tau), x_2(\tau + T/2))$ avec $\tau = Tt$ conduit au système suivant lorsque $p = 2$

$$\frac{d^2}{dt^2} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \end{bmatrix} + T^2 \begin{bmatrix} V'(u_1) \\ V'(u_2) \end{bmatrix} = \gamma T^2 \begin{bmatrix} u_2(t - \frac{1}{2}) - 2u_1(t) + u_2(t + \frac{1}{2}) \\ u_1(t + \frac{1}{2}) - 2u_2(t) + u_1(t - \frac{1}{2}) \end{bmatrix}. \quad (3)$$

Il s’agit d’un système d’équations différentielles avec termes d’avance et retard.

Le papier s’organise en deux sections: la première est dédiée à l’étude analytique de l’existence des travelling breathers dans le régime des petites amplitudes. La seconde donne des résultats numériques pour les grandes amplitudes.

2 Etude analytique de l’existence de travelling breathers

Dans cette partie, nous considérons des solutions de petite amplitude de (3). A cette fin, nous utilisons une méthode de réduction à une variété centrale initialement introduite par Iooss et Kirchgässner dans le contexte des équations différentielles avec avance

et retard [14]. Afin de pouvoir utiliser ces théorèmes de réduction, on écrit le système (3) sous forme d'un problème d'évolution dans un espace de fonctions. On pose $U = (u_1, u_2, \dot{u}_1, \dot{u}_2, X_1(t, v), X_2(t, v))^T$ où $v \in [-1/2, 1/2]$ et $X_1(t, v) = u_1(t+v), X_2(t, v) = u_2(t+v)$. On définit alors les opérateurs de trace suivants $\delta_{\pm 1/2} X_i(t, v) = X_i(t, \pm 1/2)$ ($i = 1, 2$). Le système (3) s'écrit alors

$$\frac{dU}{dt} = LU + F(U) \quad (4)$$

où la partie linéaire est donnée par

$$LU = (\dot{u}_1, \dot{u}_2, \alpha_1 u_1 + \alpha_2 (\delta_{1/2} + \delta_{-1/2}) X_2, \alpha_1 u_2 + \alpha_2 (\delta_{1/2} + \delta_{-1/2}) X_1, \partial_v X_1, \partial_v X_2),$$

avec $\alpha_1 = -T^2(1 + 2\gamma)$, $\alpha_2 = T^2\gamma$. L'opérateur nonlinéaire F est

$$F(U) = T^2(0, 0, f(u_1), f(u_2), 0, 0)$$

avec $f(u) = au^2 + bu^3 + \text{h.o.t.}$ Les solutions de (4) satisfont $U \in C^0(\mathbb{R}, \mathbb{D}) \cap C^1(\mathbb{R}, \mathbb{H})$, où $\mathbb{H} = \mathbb{R}^4 \times (C^0[-1/2, 1/2])^2$ et $\mathbb{D} = \{U \in \mathbb{R}^4 \times (C^1[-1/2, 1/2])^2 / X_1(0) = u_1, X_2(0) = u_2\}$. L'opérateur L envoie \mathbb{D} dans \mathbb{H} continûment et $F : \mathbb{D} \rightarrow \mathbb{D}$ est analytique avec $F(U) = O(\|U\|_{\mathbb{D}}^2)$. La symétrie R sur \mathbb{H} définie par $R(u_1, u_2, \xi_1, \xi_2, X_1(v), X_2(v)) = (u_1, u_2, -\xi_1, -\xi_2, X_1(-v), X_2(-v))$ satisfait $(L + F)R = -R(L + F)$, l'équation (4) est donc réversible. Notons de plus que la symétrie de permutation $S(u_1, u_2, \xi_1, \xi_2, X_1, X_2) = (u_2, u_1, \xi_2, \xi_1, X_2, X_1)$ commute avec $L + F$ (les solutions ondes progressives sont des points fixes de S). Le problème (4) est mal posé en tant que problème aux valeurs initiales dans \mathbb{D} . Toutefois, il est possible de construire des solutions bornées pour tout $t \in \mathbb{R}$. A l'aide de la théorie des variétés centrales [14], il est possible de réduire localement (4) à un système d'équations différentielles en dimension finie (de dimension 8 dans le régime de paramètres considéré plus bas).

On commence par étudier le problème linéaire, i.e le spectre de L . Il consiste en des valeurs propres isolées de multiplicité finie. Le résolution de $LU = \sigma U$ mène à l'équation de dispersion suivante $N(\sigma, T, \gamma) := (\sigma^2 + T^2(1 + 2\gamma))^2 - 4(\gamma T^2)^2 \cosh^2(\sigma/2) = 0$. Comme L est à coefficients réels et à cause de la réversibilité, le spectre est invariant par réflexions par rapport aux axes. Pour la partie centrale du spectre ($\sigma = iq$), la relation de dispersion s'écrit $(-q^2 + T^2(1 + 2\gamma))^2 = 4(\gamma T^2)^2 \cos^2(q/2)$. On montre que cette équation a un nombre fini de solutions $q \in \mathbb{R}$ (dépendant de (γ, T)). Par ailleurs, le spectre de L est non borné des deux côtés de l'axe des imaginaires. Pour l'étude de l'équation de dispersion, on renvoie le lecteur à [16] où cette étude est menée en détail. On définit Δ comme la courbe dans le plan (γ, T) telle que la partie centrale du spectre est $\Sigma = \{\pm iq_1, \pm iq_2, \pm iq_0\}$, où $\pm iq_0$ est une paire de valeurs propres doubles non semi-simple et $\pm iq_1, \pm iq_2$ deux paires de valeurs propres simples. La courbe Δ se décompose en une union de courbes successives Γ_k définissant des "langues" dans le plan (γ, T) [16]. Les bifurcations d'ondes solitaires pulsatoires que nous décrivons plus loin se produisent au voisinage des courbes Γ_{2k+1} (près de Γ_{2k} bifurquent des ondes progressives). Pour $(\gamma, T) = (\gamma_0, T_0) \in \Delta$, on définit P comme la projection spectrale sur le sous-espace central L -invariant (de dimension 8) associé à Σ et on utilise les notations $\mathbb{D}_h = (\mathbb{I} - P)\mathbb{D}$, $\mathbb{H}_h = (\mathbb{I} - P)\mathbb{H}$, $\mathbb{D}_c = P\mathbb{D}$, $U_h = (\mathbb{I} - P)U$, $U_c = PU$. La propriété de régularité optimale (voir [25], hypothèse (ii) p.127) est remplie dans notre cas et on obtient le théorème de réduction suivant.

Théorème 1 Fixons $(\gamma_0, T_0) \in \Delta$. Il existe un voisinage $\mathcal{U} \times \mathcal{V}$ de $(0, \gamma_0, T_0)$ dans $\mathbb{D} \times \mathbb{R}^2$ et une application $\psi \in C_b^k(\mathbb{D}_c \times \mathbb{R}^2, \mathbb{D}_h)$ telle que l'on ait les propriétés suivantes

pour tout $(\gamma, T) \in \mathcal{V}$ (avec $\psi(0, \gamma, T) = 0, D\psi(0, \gamma_0, T_0) = 0$).

- Si $U : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{D}$ est solution de (4) et $U(t) \in \mathcal{U} \forall t \in \mathbb{R}$, alors $U_h(t) = \psi(U_c(t), \gamma, T)$ pour tout $t \in \mathbb{R}$ et $U_c : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{D}_c$ est une solution de

$$\frac{dU_c}{dt} = P(L + F)(U_c + \psi(U_c, \gamma, T)). \quad (5)$$

- Si U_c est une solution de (5) avec $U_c(t) \in \mathcal{U} \forall t \in \mathbb{R}$, alors $U = U_c + \psi(U_c, \gamma, T)$ est une solution (4).
- L'application $\psi(\cdot, \gamma, T)$ commute avec R et S , et (5) est réversible par R et S -équivariante.

Le problème (4) se ramène donc localement au problème (5) de dimension finie (dimension 8). L'étude de l'équation réduite (5) se fait via une technique de forme normale. Pour ce faire, on exclut de Δ les voisinages de points où $sq_0 + rq_1 + r'q_2 = 0$ pour $s, r, r' \in \mathbb{Z}$ et $0 < |s| + |r| + |r'| \leq 4$ (résonances fortes). On note Δ_0 ce nouvel ensemble. On choisit alors $(\gamma, T) \approx (\gamma_0, T_0)$ ($(\gamma_0, T_0) \in \Delta_0$), de telle sorte que l'opérateur L possède quatre valeurs propres symétriques proches de $\pm iq_0$ et de parties réelles non nulles. On renvoie le lecteur à [16] pour le calcul et une étude complète de la forme normale.

L'existence d'orbites homoclines à 0 pour la forme normale tronquée (en négligeant les termes d'ordre supérieur ou égal à 4 en U_c) est reliée au signe du coefficient α suivant

$$\left(2 - \frac{q_0}{\tan(q_0/2)}\right)\alpha = T_0^2(6b + 8a^2 - \frac{4a^2T_0^2}{2\gamma_0T_0^2 \cos(q_0) - T_0^2(1 + 2\gamma_0) + 4q_0^2}). \quad (6)$$

L'étude précédente de la forme normale (voir [16]) permet d'aboutir au théorème suivant.

Théorème 2 *Supposons $\alpha(T_0, \gamma_0) < 0$ pour $(T_0, \gamma_0) \in \Delta_0 \cap \Gamma_{2k+1}$ fixé et considérons $(\gamma, T) \approx (\gamma_0, T_0)$ de telle sorte que l'opérateur L possède quatre valeurs propres symétriques proches de $\pm iq_0$ et de parties réelles non nulles. Alors l'équation réduite (5) écrite sous forme normale et tronquée à l'ordre 4 admet des solutions réversibles (par R ou RS) de petite amplitude homoclines à des 2-tores.*

Nous conjecturons que les solutions de l'équation (5) tronquée décrites par le théorème 2 correspondent pour le système (1) à des solutions exactes, qui consistent en des ondes solitaires pulsatoires, superposées à une queue quasi-périodique lorsque $n \rightarrow \pm\infty$. Le problème de la persistance de telles orbites pour l'équation réduite *complète* est très délicat. Le cas qui nous concerne, dans lequel les oscillations sont quasi-périodiques à l'infini, est encore ouvert (le cas périodique a été traité par Lombardi [19]). Par ailleurs, il y a *génériquement* non persistance de la solution réversible homocline à 0 [19]. Notons que des phénomènes analogues ont été étudié par Pomeau *et al.* [21] pour l'équation de KdV perturbée par une dérivée spatiale d'ordre 5.

Dans le cas où le potentiel V est pair, on peut donner un résultat pour l'équation réduite complète. En effet, en se restreignant à un sous-espace invariant de l'équation réduite, on élimine une paire de valeurs propres sur l'axe des imaginaires. On peut alors appliquer les résultats de Lombardi [19] concernant ce type de systèmes.

Théorème 3 *Supposons $\alpha(\gamma_0, T_0) < 0$ pour $(\gamma_0, T_0) \in \Delta_0 \cap \Gamma_{2k+1}$ fixé et considérons $(\gamma, T) \approx (\gamma_0, T_0)$ de telle sorte que l'opérateur L possède quatre valeurs propres symétriques proches de $\pm iq_0$ et de parties réelles non nulles. Supposons de plus V pair. Alors l'équation réduite (5) écrite sous forme normale et restreinte à $\text{Fix}(-S)$ admet des solutions réversibles (par R) de petite amplitude homoclines à des orbites périodiques dont l'amplitude est exponentiellement par rapport au paramètre de bifurcation. Ces solutions correspondent*

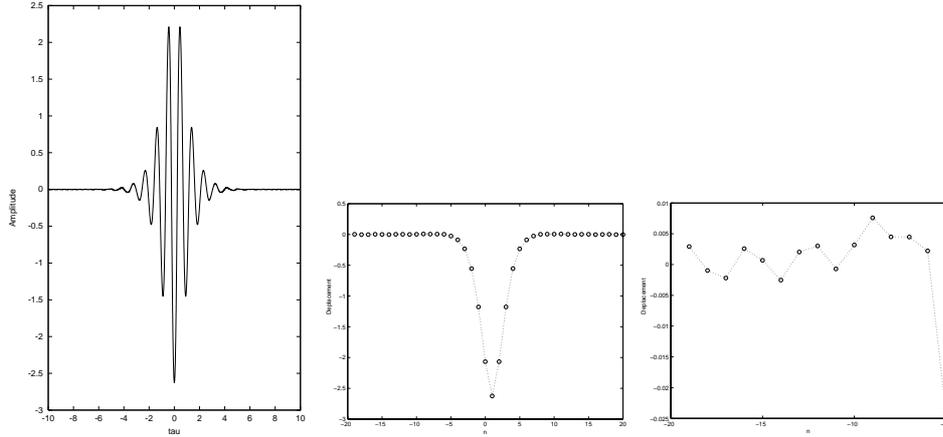


FIG. 1 – *Solution de grande amplitude dans le cas du potentiel pair $V(x) = 1 - \cos(x)$ avec $T = 8.1, \gamma = \gamma_0 \approx 0.9, T_0 \approx 6.63$. La figure de gauche montre les déplacements de la masse $n = 1$ en fonction du temps t . Celle de droite montre les déplacements sur tous les sites du réseau à $\tau = 0$.*

à des solutions *travelling breathers exactes* du système (1), superposées à l'infini à une queue périodique.

Dans la section suivante nous donnons quelques résultats numériques qui illustrent la théorie précédente. Ces résultats montrent également l'existence de solutions de grande amplitude, dont la partie centrale est très localisée.

3 Calcul numérique de travelling breathers

Les calculs numériques présentés ci-après ont été obtenus en discrétisant le système (3) par un schéma différences finies. A partir d'ansatz fournis par l'étude de la forme normale associée à l'équation réduite (5), on calcule des solutions de petite amplitude qui bifurquent près de la courbe Γ . Ces solutions sont alors continuées (à γ fixé) pour des valeurs de T plus éloignées de la courbe. Les résultats qui suivent sont extraits d'une étude numérique plus complète menée dans [24].

On considère d'abord le potentiel trigonométrique $V(x) = 1 - \cos(x)$. Ce potentiel étant symétrique, on se restreint aux solutions vérifiant $x_{n+1}(\tau) = -x_n(\tau - \frac{T}{2})$. Les solutions sont alors déterminées par l'équation suivante

$$\frac{d^2 x_1}{d\tau^2} + V'(x_1) = -\gamma(x_1(\tau + T/2) + x_1(\tau - T/2) + 2x_1(\tau)). \quad (7)$$

Les résultats montrent l'existence de travelling breathers fortement localisés (figure 1). Toutefois, un agrandissement de la solution loin du centre montre la présence d'une queue oscillante (figure 1, à droite). Ces résultats sont en accord avec le théorème 3.

Les calculs suivants concernent le potentiel de Morse $V(x) = \frac{1}{2}(\exp(-x) - 1)^2$ (figure 2). On donne deux solutions pour des périodes T différentes. Notons tout d'abord que les solutions sont translatées de 2 sites après le temps T comme prévu par la condition $x_n(\tau) = x_{n-2}(\tau - T)$. Comme dans le cas précédent, le réseau supporte des oscillations fortement localisées (figure de gauche). En particulier, la queue n'est pas visible à l'échelle

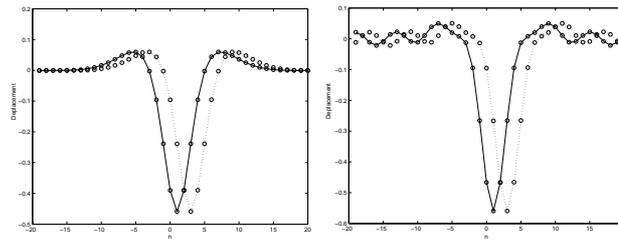


FIG. 2 – *Solution numérique de (1)-(2) pour $T = 7.15$ (gauche), $T = 7.45$ (droite). On a $V(x) = \frac{1}{2}(1 - e^{-x})^2$, $\gamma = \gamma_0 \approx 0.9$, $T_0 \approx 6.63$. La solution est représentée comme une fonction de n , pour $\tau = 0$ (trait continu) et $\tau = T$ (trait en pointillés). Ces figures correspondent aux profils $u_1(t)$ dans (3), le profil $u_2(t)$ étant similaire.*

considérée pour $T = 7.15$. Par contre, sur la figure de droite ($T = 7.45$), on observe bien une queue oscillante.

Références

- [1] M. J. Ablowitz et J. F. Ladik, *J. Math. Phys.*, **17**, 1011-1018 (1976).
- [2] S. Aubry et T. Cretegny, *Physica D*, **119**, 34-46 (1998).
- [3] S. Aubry, G. Kopidakis et V. Kadelburg, *Disc. Cont. Dyn. Syst. B*, 271-298 (2001).
- [4] D.K. Campbell, S. Flach et Yu.S. Kivshar, *Phys. Today*, **57**, 43 (2004).
- [5] T. Dauxois et M. Peyrard, *Phys Rev E*, **47**, 684-694 (1993).
- [6] T. Dauxois, M. Peyrard et C.R. Willis, *Phys. Rev. E*, **48**, 4768-4778 (1993).
- [7] J. Edler et P. Hamm, *J. Chem. Phys.*, **117**, 2415-2424 (2002).
- [8] S. Flach et C.R. Willis, *Physics Reports*, **295**, 181-264 (1998).
- [9] G. Friesecke et R.L. Pego, *Nonlinearity*, **12**, 1601-1627 (1999) .
- [10] G. Friesecke, J.A. Wattis, *Commun. Math. Phys.*, **161**, 391-418 (1994).
- [11] J. Giannoulis, A. Mielke, *Nonlinearity*, **17**, p. 551-565 (2004).
- [12] G. Iooss, *Nonlinearity*, **13**, 849-866 (2000).
- [13] G. Iooss et G. James, to appear in *Chaos*, focus issue on "Studies of Nonlinear Problems. I" by Enrico Fermi, John Pasta, and Stanislaw Ulam", (2004).
- [14] G. Iooss, K. Kirchgässner, *Commun. Math. Phys.*, **211**, 439-464 (2000).
- [15] G. James, *J. Nonlinear Science*, **13** (1), 27-63 (2003).
- [16] G. James et Y. Sire, *Commun. Math. Phys.* (2005). In press (published online).
- [17] R. S. MacKay et S. Aubry, *Nonlinearity*, **7**, 1623-1643 (1994).
- [18] M. Remoissenet, *Phys. Rev. B*, **33** (4), 2386 (1986).
- [19] E. Lombardi, *Lecture Notes in Mathematics*, **1741**, Springer-Verlag (2000).
- [20] J. Meier et al, *Phys. Rev. Lett.*, **92**, 163902 (2004).
- [21] Y. Pomeau, A. Ramani et B. Grammaticos, *Physica D*, **31**, 127-134 (1988).
- [22] Y. Sire, submitted (2004).
- [23] A. J. Sievers et S. Takeno, *Phys. Rev. Lett.*, **61**, 970-973 (1988).
- [24] Y. Sire et G. James, submitted (2004).
- [25] A. Vanderbauwhede et G. Iooss, *Dynamics reported*, **1** (new series), 125-163 (1992).