

Table des matières

INTRODUCTION	5
I Breathers, multibreathers, phonobreathers	7
1 Breathers discrets	9
1.0.1 Contexte historique	9
1.1 Le modèle	10
1.1.1 Modèle FPU	10
1.1.2 Réseau de Klein Gordon	10
1.1.3 Modèle de Schrödinger non-linéaire	12
1.2 Propriétés pour l'existence des breathers	12
1.2.1 Condition de non résonance	13
1.3 Caractéristiques des solutions breathers	14
1.3.1 La limite anti-continue	14
1.3.2 Oscillateur non-linéaire	14
1.3.3 La séquence codant	15
1.3.4 Types de solutions breather	16
1.3.5 Continuation	19
1.4 Analyse de la stabilité linéaire	20
1.4.1 La théorie de Floquet	20
1.4.2 Le spectre de Floquet	21
1.4.3 Instabilité	24
1.5 Analyse des bandes	25
1.5.1 Evolution des bandes	26
1.5.2 Signature de Krein	27
1.6 Construction numérique des breathers	28

2	Pénétration d'une harmonique dans la bande des phonons	31
2.1	Potentiel de Morse	32
2.1.1	Les phonobreathers	33
2.1.2	Résonance avec la première harmonique	45
2.1.3	Les breathers fantômes	47
2.2	Potentiel quartique	60
2.2.1	Construction des phonobreather	61
2.3	Cas des solutions multi-breathers	62
II	Ondes stationnaires	65
3	Description des ondes stationnaires	67
3.1	Approximation de Schrödinger discrète non-linéaire	67
3.2	Ondes stationnaires représentées comme trajectoires	70
3.2.1	L'application symplectique	70
3.2.2	Evolution des trajectoires	74
3.2.3	Transition par brisure de analyticité	75
3.3	Ondes stationnaires comme multibreathers	76
3.3.1	Construction de la séquence codante	79
3.3.2	Costruction de la séquence codant pour un potentiel dur	81
3.4	Stabilité des ondes stationnaires non-linéaires dans l'approximation DNLS	82
3.4.1	Le problème aux valeurs propres	83
3.4.2	Comportement général des valeurs propres	84
3.4.3	Ondes stationnaires commensurables	85
3.4.4	Ondes stationnaires incommensurables	88
3.4.5	Etude par l'analyse des bandes	89
4	Dynamique des solutions	97
4.1	Dynamique d'un breather simple	97
4.1.1	Breathers mobiles	98
4.2	Dynamique des discommensurations	99
4.2.1	Préliminaires à l'étude de la dynamique pour instabilité oscillatoire	99
4.2.2	Dans un modèle de KG avec potentiel de Morse	101
4.3	Dynamique des ondes stationnaires	103
4.3.1	Régime oscillatoire	105
4.3.2	Régime translationnel	105

4.3.3	Régime asymptotique	108
III	Système de KG hors de l'approximation DNLS	113
5	Introduction	115
5.1	Stabilité linéaire pour un system de KG à petits couplages	115
6	Le potentiel quartique	117
6.0.1	Propriétés de symétrie	117
6.0.2	Conditions pour les résonances	118
6.1	Sans résonances	119
6.2	Résonance avec la deuxième harmonique	120
6.3	Résonance avec la troisième harmonique	120
6.3.1	Changement de vecteur d'onde	123
6.3.2	La solution intermédiaire	125
6.3.3	L'onde fantôme	125
6.4	Stabilité pour effet de taille	133
7	The Morse potentiel	135
7.0.1	La transition du premier ordre	136
7.0.2	La limite d'existence	142
7.0.3	Instabilités réelles	142
7.0.4	Inversion à plus petites fréquences	149
7.0.5	Résonance du deuxième ordre	158
A	Techniques numériques	169
A.1	Ondes dans un potentiel quartic	169
	BIBLIOGRAPHIE	171

INTRODUCTION

Intéressant, riche, mystérieux et aussi compliqué est le monde de la physique non-linéaire. Depuis les années de plus en plus des chercheurs, théoriciens et expérimentateurs se sont dédiés à l'étude de la physique non-linéaire, qui a donc énormément progressé depuis son début.

Entre les différents sujets de la physique non-linéaire il y a l'étude des ondes.

Dans ce manuscrit je étudierai le comportement et propriétés d'un particulier type d'ondes existant dans les systèmes périodiques et discrets, qui ont la propriété d'être localisés en espace et périodique en temps, appelés "Breathers Discrets" ou "Mode Intrinsèque Localisées".

Ma présentation sera volontiers riche en explications, figures et détails, avec l'intention de rendre ce manuscrit clair et complet.

Le premier chapitre de cette thèse veut être un résumé détaillé des propriétés des solutions breathers, des méthodes pour étudier leur stabilité et les construire numériquement. Mon intention est de fournir au lecteur physicien étranger au sujet particulier, tous les moyens pour pouvoir comprendre les chapitres suivantes, et au lecteur, pratique déjà expert du sujet, un résumé utile et précis. Pourquoi pas, j'espère que cette partie pourra être utile à un étudiant débutant sa thèse sur ce sujet.

Dans le deuxième chapitre je discuterai du comportement des breathers lorsque leur deuxième harmonique pénètre dans la bande des phonons. Je parlerai donc des solutions phono-breathers et *breathers phantômes*, et de leurs propriétés selon le type de potentiel extérieures.

Dans le troisième chapitre je présenterai un exemple pédagogique avec l'étude d'un petit système de 4 oscillateurs. Il donnera une logique d'introduction au quatrième chapitre où je parlerai des ondes stationnaires, qui, en utilisant une approximation de Schrödinger discrète non-linéaire, seront décrites soit comme des trajectoires d'un système dynamique soit comme multi-breathers, et j'étudierai leur stabilité.

Le cinquième chapitre sera dédié à la discussion sur la validité de l'approximation de Schrödinger utilisée, et donc à l'étude du comportement des solutions hors de ce domaine

de validité. Dans notre cas cela signifiera étudier le comportement des ondes stationnaires à grande amplitude, pour différents types de potentiel.

Dans le sixième chapitre je présenterai la dynamique des ondes stationnaires.

Je souhaite que cette lecture sera agréable non que utile au lecteur, dans l'espoir que ce manuscrit puisse être un petit pierre dans la construction de la connaissance dans le monde de la non-linéarité.

Première partie

Breathers, multibreathers,
phonobreathers

Chapitre 1

Breathers discrets

Un *breather discret* (BD) est une solution exacte, périodique dans le temps et localisée dans l'espace, des systèmes non-linéaires et discrets.

Dans ce premier chapitre nous familiariserons avec les solutions breathers, en présentant les modèles dans lesquelles nous les étudierons, les propriétés indispensables pour leur existence, les méthodes pour les construire numériquement et pour étudier leur stabilité.

1.0.1 Contexte historique

Le concept de breather a été introduit par Ablowitz [14] en 1974 pour l'équation à dérivées partielles de Sine-Gordon :

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \sin u \quad (1.1)$$

qui ...

Pour cette équation ont été trouvées des solutions périodiques en temps et localisées dans l'espace, appelées " breathers ". Les tentatives suivantes de calculer des breathers dans d'autres équations d'onde non-linéaires ont échoué, et la non-existence de breathers pour le potentiel ϕ^4 fut prouvée par Segur et Kruskal [15] en 1993, comme aussi il fut démontré que l'existence de breathers pour équations d'onde non-linéaires est rare [16, 17]. Par contre en 1998 Takeno et al. [18, 19] proposèrent que les versions spatialement discrétisées de beaucoup des équations d'onde non-linéaire puissent avoir solutions breathers. Finalement, dans le 1994, R. MacKay et S. Aubry [13] démontrèrent mathématiquement l'existence de breathers dans les systèmes discrets et non-linéaires pour couplages suffisants faibles (voir chapitre 1.24).

1.1 Le modèle

Les solutions oscillatoires (breathers discrets et leurs combinaisons) que nous étudierons dans ce manuscrit existent dans les systèmes discrets. En effet, pour l'étude de la plupart des phénomènes physiques (on peut penser aux atomes dans les cristaux, aux cellules et protéines dans les systèmes biologiques, aux chaînes de ADN, aux rangées des guides d'ondes pour l'optique, etc.), la nature, à échelle microscopique où macroscopique, est modélisée comme un système discret à une ou plusieurs dimensions. Une description des phénomènes naturels proche de la réalité doit nécessairement considérer leurs aspects non-linéaires qui sont négligés dans une modélisation linéaire moins rigoureuse. En physique et en biologie plusieurs type des modèles ont été créés pour décrire les différents phénomènes. Nous étudierons dans ce manuscrit les solutions type breathers à un dimension. Des réseaux d'oscillateurs seront donc considérés et des potentiels anharmoniques seront imposés au système. Nous allons maintenant décrire les systèmes de type FPU, qui furent étudiés comme premiers dans la recherche sur les breathers. Nous présentons en suite les deux modèles qui seront utilisée pour notre étude, le modèle de Klein Gordon et celui de Schrödinger non-linéaire.

1.1.1 Modèle FPU

1.1.2 Réseau de Klein Gordon

Le réseau de Klein-Gordon (KG) est un modèle de particules couplées entre elles, qui oscillent dans un potentiel de site anharmonique $V(u_n)$. La dimension du système peut être à priori quelconque. Nous considérerons le réseau de KG à une dimension (chaîne d'oscillateurs), avec un couplage harmonique C_K seulement entre sites plus proches voisins (Fig. 1.1). Si on indique avec $\{u_n, p_n\}$ les variables conjugués, position et moment, pour la particule de position n , l'Hamiltonien du système est :

$$H = \sum_{n=1}^N \left[\frac{1}{2} \dot{u}_n^2 + V(u_n) + \frac{1}{2} C_K (u_{n+1} - u_n)^2 \right] \equiv \sum_{n=1}^N H_n \quad (1.2)$$

somme de l'énergie cinétique, du potentiel de site et de l'énergie de couplage. Les équations du mouvement deviennent donc :

$$\ddot{u}_n + V'(u_n) - C_K (u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n) = 0, \quad (1.3)$$

et elles sont appelées *équations de Klein-Gordon discrètes*, car elles sont une version discrétisée des équations de KG de la mécanique quantique : $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = u$. Pour cette raison le modèle décrit par les équations (1.3) est appelé *réseau de KG*.

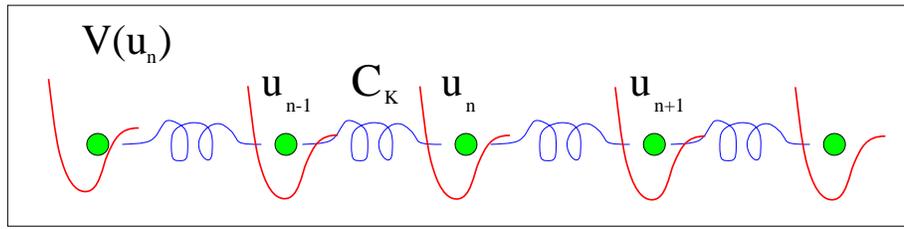


FIG. 1.1 – Réseau de Klein-Gordon d'oscillateurs non-linéaires avec déplacement $\{u_n\}$, couplés par une constante de force C_K .

pour une solution $u_n(t)$, les équations linéarisées (les *équations de Hill*) sont :

$$\ddot{\epsilon}_n + V''(u_n(t))\epsilon_n(t) - C(\epsilon_{n+1}(t) + \epsilon_{n-1}(t) - 2\epsilon_n(t)) = 0 \quad (1.4)$$

où $\epsilon_n(t)$ est un petit déplacement par rapport à la solution $u_n(t)$.

Quand $u_n(t) = 0$, ou plus en générale quand V'' est constante, on obtien les ondes planes harmoniques standard :

$$\epsilon_n(t) = \epsilon \cos(Qn - \omega_l(Q)t) \quad (1.5)$$

avec vecteur d'onde Q et fréquence $\omega_l(Q)$. Si on sositue ces solutions dans les équations (1.4), on obtien la relation de dispersion pour les phonons (harmonics) :

$$\omega_l^2(Q) = 1 + 4C_K \sin^2 \frac{Q}{2} \quad (1.6)$$

valable pour petites amplitudes d'oscillation dans un potentiel générale.

La chois du potentiel de site dépend de la situation physique qu'on veut modéliser. Une approximation linéaire peut être utilisée pour l'explication, par exemple, des propriétés des solides, mais seulement l'introduction des anharmonicités par un potentiel non-linéaire peut expliquer les phénomènes vu expérimentalement et donner donc une description plus réaliste de la nature. Dans ce manuscrit on traitera principalement deux types de potentiel :

– **le potentiel de Morse** :

$$V(u) = \frac{1}{2}(e^{-u} - 1)^2 \quad (1.7)$$

qui est un potentiel mou, cette à dire, l'amplitude d'oscillation diminue si la fréquence d'oscillation augment (Fig. 1.2.a). Ce potentiel a été initialement proposé en 1989 par Peyrard et Bishop [5] pour modéliser la dynamique des paires des bases de ADN, où il représente l'interaction entre les bases d'une paire. En effet sa forme peut bien représenter la situation de bases de ADN liées (dans le minimum du potentiel) et de bases ouvertes (à grandes distances positives). Ce modèle, qui apparaît très simple est pourtant très performante pour décrire des phénomènes de dynamique de l'ADN [10].

Le potentiel de Morse est aussi une bonne modélisation des liaisons hydrogène. Le réseau de KG avec ce potentiel fournit donc un modèle utile pour l'étude des systèmes biologique (comme les macromolécules ou les protéines).

...

– le potentiel quartique :

$$V(u) = a\frac{u^2}{2} + b\frac{u^4}{4} \quad (1.8)$$

qui est un potentiel dur, c'est à dire, l'amplitude d'oscillation augmente avec la fréquence (Fig. 1.2.b). Ce potentiel constitue l'approximante au plus bas ordre d'un générique potentiel symétrique. Il est donc utile, par exemple, lors de la modélisation des systèmes physiques présentant inversion par symétrie (comme beaucoup des cristaux).

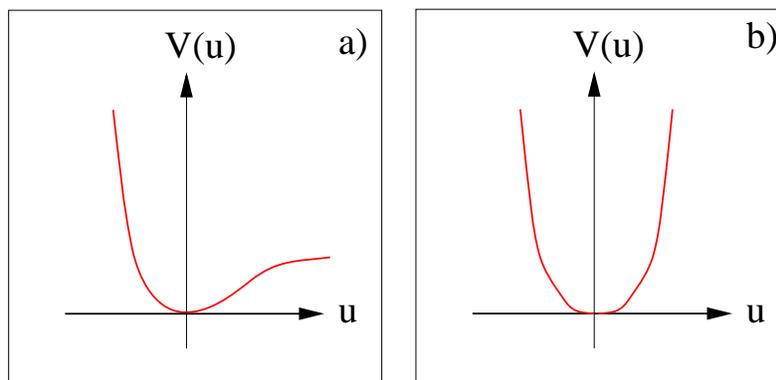


FIG. 1.2 – a) Le potentiel de Morse, mou, et b) le potentiel quartique, dur.

Pendant notre étude nous présenterons les propriétés de comportement des solutions type breathers pour les potentiels mous et durs, en utilisant le potentiel de Morse et le potentiel quartique comme représentant de ces deux classes, et nous remarquerons les différences entre eux.

1.1.3 Modèle de Schrödinger non-linéaire

SCRIVI

1.2 Propriétés pour l'existence des breathers

Comme nous l'avons définie au début du chapitre, les breathers discrets sont des solutions exactes, périodique en temps et localisées dans l'espace, des systèmes discrètes et non-linéaires. Ce type des solutions donc, en absence des perturbations, a un temps de vie

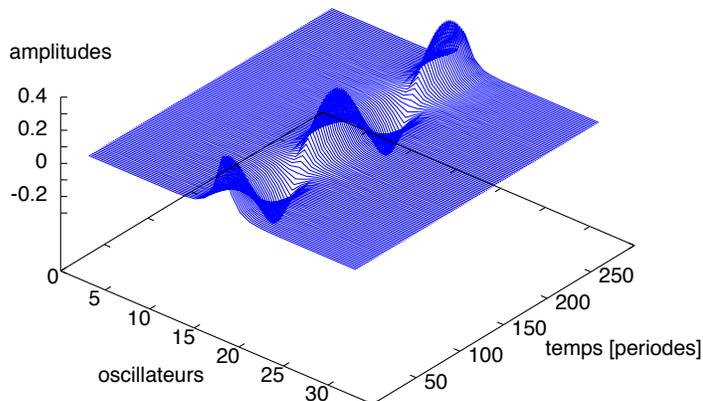


FIG. 1.3 – Amplitude d'oscillation dans le temps d'une solution breather simple.

idéalement infinie, cette à dire l'oscillation initiale persiste sur le site d'origine avec temps de vie infiniment long. Cela signifie donc que l'énergie du breathers reste concentré dans le breathers sans être dispersée dans l'environnement. Pour que cette localisation soit possible, deux propriétés sont indispensables pour le système : la discrétisation et la non-linéarité.

1.2.1 Condition de non résonance

Nous avons dit que, pour que un breather soit une solution localisée, il est nécessaire que son énergie ne soit pas dégagée vers l'extérieur de la solution. En particulier l'énergie du breather ne doit pas être rayonnée par les modes normaux linéaires de vibration du réseau, les phonons. Car dans un système non-linéaire pour un mouvement oscillatoire à fréquence fondamentale ω_b ils existent aussi les harmoniques de fréquences supérieures ($2\omega_b, 3\omega_b, \dots$), il est nécessaire d'éviter les résonances de toutes les harmoniques avec la fréquence des phonons ω_0 . Nous pouvons donc écrire la **condition de non-résonance** pour l'existence d'un breathers comme :

$$p\omega_b \neq \omega_0, \quad \forall p \text{ entières positives} \quad (1.9)$$

Cette condition peut être accomplie pour le fait que :

- le système est non-linéaire : donc la fréquence de mouvement n'est pas fixée, mais dépend de l'amplitude d'oscillation. En utilisant les variables actions I_n (voir paragraphe 1.3.2) associées aux fréquences ω_n du mouvement des oscillateurs, qui sont toutes multiples de la fréquence fondamentale ω_b ($\omega_n = m\omega_b, m \geq 1$), on peut expliciter cette propriété avec :

$$\left. \frac{d\omega}{dI} \right|_{\omega=\omega_n, I=I_n} \neq 0, \quad \forall n \quad (1.10)$$

– le système est discret : donc les phonons ont un spectre de niveaux d'énergie discrète et finie. La fréquence ω_b pourra donc être située à valeurs inférieures où supérieures à la bandes des phonons (on verra la différence de comportement selon le type de potentiel, mou ou dur, dans le chapitre 1.24). Les différentes bandes des phonons sont séparées par des gaps, de plus étroites de plus la taille du système augment. On verra dans le chapitre ?? que des solutions breathers peuvent exister en correspondance de ces gaps. Il est donc possible que la fréquence fondamentale ω_b soit située au dehors des toutes les résonance avec les phonons, en accomplissant la condition (1.9).

1.3 Caractéristiques des solutions breathers

Nous allons maintenant présenter les principales types de solutions breathers, leurs propriétés plus importantes, la méthode pour les caractériser et pour les nommer.

1.3.1 La limite anti-continue

Considérons une chaîne de KG d'oscillateurs couplés par un couplage C_K , avec équations de mouvement (1.3). La limite de couplage très forte entre les oscillateurs ($C \rightarrow \infty$) consiste à effectuer une approximation continue sur le système, et les équations de mouvement deviennent des équations aux dérivées partielles non-linéaires. Cette limite est utile pour la description des phénomènes concernant distances supérieures à la distance entre oscillateurs.

La limite opposée de couplage nulle, $C_K = 0$, correspond à considérer les oscillateurs indépendants. On appelle cette limite, par oppositions au précédente, *limite anti-continue*. Nous rappelons que S. Aubry avait appelé "limite anti-intégrable" la limite de couplage zéro lors de l'étude des applications [12]. Pour le cas d'oscillateurs indépendants, le système à couplage nul est bien intégrable. Aubry même [12] a donc conseillé le nom de "limite semi-anti-intégrable", ou mieux, de limite anti-continue, actuellement universellement utilisé.

1.3.2 Oscillateur non-linéaire

A la limite anti-continue les équations de mouvement (1.3) deviennent

$$\ddot{u}_n(t) + V'(u_n) = 0 \tag{1.11}$$

que on peut intégrer facilement en trouvant des solutions périodiques

$$u(t) = a_\omega(\omega t + \alpha) \tag{1.12}$$

où $a_\omega(x)$ est une fonction de période 2π et de fréquence ω .

Nous rappelons que pour un système Hamiltonien il est utile de utiliser les variables conjugués *angle-action* (θ, I) , plutôt que les variables position-moment (u, p) , pour éviter d'avoir des fonctions à plus valeurs ¹. Cette description est souvent utilisée aussi pour décrire le mouvement d'un oscillateur indépendant non-linéaire.

Dans la représentation avec les variables (θ, I) , l'Hamiltonien du système est indépendante de θ . On peut écrire l'équation de Hamilton :

$$\dot{I} = 0 = -\frac{\partial H}{\partial \theta} \quad (1.13)$$

$$\dot{\theta} = \frac{\partial H}{\partial I} = \text{constante} \quad (1.14)$$

et donc la variable angle augment linéairement avec le temps.

La transformation $(u, p) \rightarrow (\theta, I)$ étant canonique, les aires sont conservées dans l'espace des phases pour les deux représentations. De cette propriété on en déduit la définition de variable action :

$$\oint p \, du = \oint I \, d\theta = 2\pi I \quad (1.15)$$

Donc l'action,

$$I = \frac{1}{2\pi} \oint p \, du \quad (1.16)$$

est l'aire, divisé par 2π , fermée par la trajectoire de l'oscillateurs dans l'espace des phases. Par intégration des équations d'Hamilton (1.14), on obtient :

$$\theta = \frac{\partial H}{\partial I} t + \delta, \quad (1.17)$$

où δ est une constante arbitraire. Comme θ augment linéairement dans le temps, et en particulier de 2π à chaque période t_b , la fréquence angulaire de mouvement est

$$\omega(I) = \frac{2\pi}{t_b} = \frac{\partial H}{\partial I} \quad (1.18)$$

1.3.3 La séquence codant

Les solutions breathers sont des oscillations périodiques spatialement localisées. Pour pouvoir leur donner un nom est donc les identifier, il est nécessaire de décrire l'état de mouvement de chaque oscillateur. Pour cela on considère un système d'oscillateurs indépendantes (à la limite anti-continue) de taille N , symétrique en temps, et on associe à chaque oscillateur

¹Par exemple, pour un système de Hamiltonien $H(u, p) = \frac{p^2}{2} + V(u)$, le moment en fonction de l'énergie E sera $p(u, E) = \pm[2(E - V(u))]^{1/2}$.

un nombre entier décrivant son état. La séquence de N nombres entiers $\{\sigma_n\}$ ainsi définie constitue la *séquence codant*, où *code*, qui individu cette précise solution breather. Choisie la fréquence ω_b pour la solution, avec $\omega_b = \frac{2\pi}{t_b}$ où t_b est la période du breather, et choisie sa phase initiale α , on associe les code :

- $\sigma = 0$: pour un oscillateur à repos ;
- $\sigma = +1$: pour un oscillateur oscillant à la fréquence ω_b et en phase avec la phase α choisie ;
- $\sigma = -1$: pour un oscillateur oscillant à ω_b et en anti-phase avec la phase α ;
- $\sigma = +2$: pour un oscillateur à la fréquence $2\omega_b$ et en phase avec α ;
- $\sigma = -2$: pour un oscillateur à la fréquence $2\omega_b$ et en anti-phase avec α ;
- ...

Le code ainsi construit individu les solutions symétriques en temps. En effet chaque oscillateur peut être en oscillation avec fréquence multiple de la fondamentale ω_b , mais seulement soit en phase (code positif), soit en anti-phase (code négatif) par rapport à la phase choisie. Ce code décrit donc solutions particulières qui ont, pour une opportune chois de la phase initiale, vitesse nulle. Nous verrons dans le paragraphe (1.24) que la chois de solutions symétriques en temps, ayant donc avec vitesse nulle, est très utile pour la construction numérique des breathers.

Nous rappelons que le code est défini seulement à la limite anti-continue. Donc généralement à chaque solution type breather correspond un seul code défini à la limite de couplage nul. Dans le cas particulier de système ayant deux (ou plus) limites anti-continues² une même solution aura donc deux codes différentes. Dans ce manuscrit ce cas particulier ne sera pas traité.

1.3.4 Types de solutions breather

1.3.4.1 Breathers

La solution de *breather simple* correspond, à la limite anti-continue, à la configuration du système avec un seul site en oscillation, tous les autres étant aux repos. La séquence codante correspondante, ...00000100000..., contient un seul code 1 entre une série de zéros. On peut avoir, à la limite anti-continue, plusieurs sites en oscillation avec la même fréquence.

²Si, par exemple, un système à deux paramètres, a et b , est décrite par le seul paramètre $c = c(a, b) = f(a) + g(b)$ (f et g fonctions arbitraires) combinaison des a et b , l'évolution de la valeur de c représente le système pour toutes les possibles valeurs de a et b . Il y aura donc deux valeurs de c , correspondantes l'une à la limite anti-continue de a et l'autre à celle de b . Donc le système d'écrite par c contient deux limites anti-continues.

Cette configuration, correspondant à une combinaison de plusieurs breathers simples et représentée par un code du type ...000100100..., est appelée *multi-breather*.

Ils existent des solutions multi-breathers qui sont similaires à des phonons, et qu'on peut appeler *phonons non-linéaires* vu les propriétés de notre système anharmonique. En particulière la configuration avec séquence codant $\{\sigma_n\} \equiv 1$ correspond au mouvement de tous les oscillateurs en phase, et il peut être donc vu comme un phonon non-linéaire avec vecteur d'onde $q = 0$. Par contre, la séquence codant $\{\sigma_n\} = (-1)^n$ correspond à une chaîne d'oscillateurs où tous les plus proches voisins sont en anti-phase, et peut donc être vu comme un phonon non-linéaire avec vecteur d'onde $q = \pi$.

1.3.4.2 Phono-breathers

Considérons une onde de type phonon non-linéaire comme nous venons de la décrire, et imaginons d'y superposer une solution breather simple (voir chapitre 2). On appelle ces solutions *phono-breathers*. Pour que cette combinaison soit possible il est nécessaire que la fréquence du breather et celle des phonons respectent une précise relation de relative multiplicité qui dépend du type de potentiel, dur ou mou. Pour un potentiel mou, comme les breathers existent normalement au-dessous de la bande des phonons, il est nécessaire qu'ils oscillent à une fréquence multiple de la fréquence du breather, c'est-à-dire, la fréquence des phonons doit appartenir à une harmonique supérieure de la fondamentale. Le site occupé par le breather a donc fréquence ω_b (code ± 1), tandis que tous les autres sites occupés par les phonons non-linéaire oscillent à fréquence multiple $\omega_0 = n\omega_b$, avec n entier ($\omega_0 = 2\omega_b$, code ± 2 , pour phonons de la 2^{me} harmonique, $\omega_0 = 3\omega_b$, code ± 3 , pour la 3^{me} harmonique, etc.). Ces solutions ont donc un code du type : ... + 2 - 2 + 2 - 2 + 2 \pm 1 + 2 - 2 + 2 - 2 + 2... ou ... + 3 - 3 + 3 - 3 + 3 \pm 1 + 3 - 3 + 3 - 3 + 3..., etc.

Par contre, pour un potentiel dur, car les breathers sont au-dessus de la bande des phonons, la fréquence ω_b du breather doit être une multiple de la fréquence ω_0 des phonons ($\omega_b = n\omega_0$, n entière). Ces solutions ont donc un code du type ... + 1 - 1 + 1 - 1 + 1 \pm 2 + 1 - 1 + 1 - 1 + 1..., ... + 1 - 1 + 1 - 1 + 1 \pm 3 + 1 - 1 + 1 - 1 + 1..., où ... + 2 - 2 + 2 - 2 + 2 \pm 4 + 2 - 2 + 2 - 2 + 2...etc.).

Par définition le code d'un phono-breather est tel que toutes les $\{\sigma_n\} \neq 0$ pour tous n . On verra dans le chapitre 2 que pour un phono-breather la condition de non-résonance ($n\omega_b \neq \omega_0$) n'est plus nécessaire, et seulement la propriété de non-linéarité (1.9) ($\frac{d\omega}{dI} \neq 0$ pour $\omega = \omega_b$ et $\omega = 2\omega_b$ (ou $\omega = 3\omega_b$, etc.)) est indispensable pour l'existence de la solution à couplage non nul. On peut avoir plusieurs breathers simples superposés à un phonon non-linéaire, ce qui donne une *phono-multi-breather*.

1.3.4.3 Roto-breathers

Ils existent des solutions breathers qui présentent déjà à la limite anti-continue une configuration plus complexe. On peut en effet imaginer que chaque site peut non seulement osciller mais aussi rotter. Pour permettre le mouvement oscillatoire et rotatoire des sites il est nécessaire de considérer des solutions antisymétriques par rapport au temps. Pour décrire l'état de mouvement de chaque oscillateur il est nécessaire d'associer à chaque site un triple code $(\sigma, \sigma'', \sigma')$ [12]. La figure (1.4) montre dans le plan (u, p) pour les sites en oscillation (lignes vertes) ou en rotation (lignes rouges et bleues) les différentes possibilités de mouvement, décrites par le code.

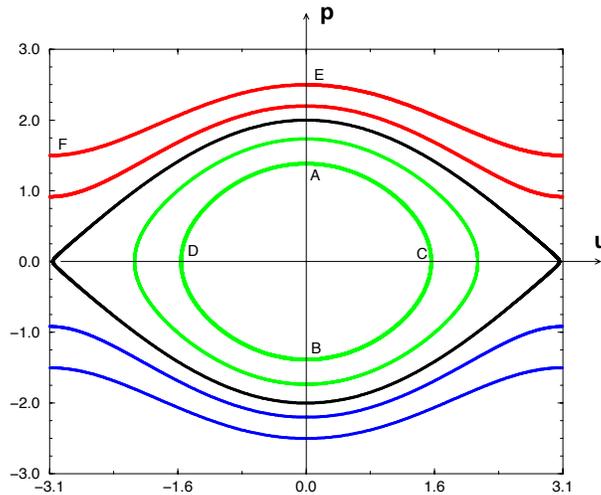


FIG. 1.4 – Mouvements oscillatoires et rotatoires dans le diagramme de phase (position-impulsion).

Le code σ définit l'état rotationnel du rotor. La valeur de $\sigma_n = p$, indique que le site n est en rotation avec vitesse angulaire $n\omega_b$. On peut avoir $p > 0$ ou $p < 0$ selon le sens de la rotation, avec vitesse positive (lignes rouges) ou négative (lignes bleues). Pour les sites qui sont à repos ou en oscillation on a $\sigma = 0$, et dans ce cas il est nécessaire d'expliciter la valeur de σ'' , qui définit l'état d'oscillation du site. Le code σ'' correspond donc à l'unique code $\{\sigma\}$ pour les solutions breathers, multi-breathers ou phono-breathers. Donc, la valeur positive ou négative de σ'' indique la phase de l'oscillateur $\alpha = 0$ ou $\alpha - \pi$ (points respectivement A ou B en figure). Dans le cas des solutions symétriques en temps on a respectivement les points C ou D). Le code σ' définit la phase du mouvement. Choisi un point de départ pour la rotation, par exemple le point E en figure, il indique si le mouvement commence de ce point (phase 0 et $\sigma' = 1$), ou en opposition de phase (phase π et $\sigma' = -1$, le point F en figure). La séparatrice (ligne noire) représente la limite entre le mouvement oscillatoire et rotatoire.

1.3.5 Continuation

Nous avons jusqu'à maintenant définie et décrite les solutions de type breathers dans le cas d'oscillateurs non-linéaires découplés, c'est à dire à la limite anti-continue. Dans ce cas chaque oscillateur, qui a Hamiltonien $H_n = \frac{p^2}{2} + V_n(u_n)$, est intégrable et présente solutions périodiques en temps. A cette limite la construction des solutions localisées et périodiques en temps (breathers) a été assez simple. Il est évidemment nécessaire de considérer l'existence de ces solutions pour valeurs non nulle du couplage, donc dans des chaînes d'oscillateurs couplés.

Il a été démontré mathématiquement en 1994 par R. Mackay et S. Aubry [13] que les solutions breathers, invariantes par renversement du temps et existantes à la limite anti-continue, ont une unique continuation pour couplages non nulles mais suffisamment petits, comme solutions périodiques du même période. Pour que cette continuation soit possible il est nécessaire que la condition de non résonance (1.9) et de non-linéarité (1.24) soient satisfaites par le système. Il a aussi été démontré que ces solutions décroissent exponentiellement en espace. Nous ne présenterons pas ici les détails de cette démonstration, qui sont publiés en [13]. Néanmoins nous rappelons que elle utilise le principe de la limite anti-continue et le théorème des fonctions implicites appliquée dans l'espace des fonctions symétriques par renversement du temps, et décrites par les variables angle-action (θ, I) .

En 1997 S. Aubry a démontré l'existence des breathers en utilisant le théorème des fonctions implicites mais dans le système des coordonnées (u, p) . Il a démontré que il existe une limite supérieure C_M du couplage juste auquel les solutions périodiques $u_n(t)$, breathers, multi-breathers, phono-breathers ou roto-breathers, existantes à la limite anti-continue, ont une unique continuation $u_n(t, C)$ pour $C < C_M$. Cette démonstration est valable pour solutions sans contraintes de phases, donc il ne concerne pas seulement solutions invariantes par renversement du temps. On connaît, en utilisant le théorème des fonctions implicites, que cette limite existe non-nulle et qu'il est uniforme, parce qu'indépendante de la phase, mais sa valeur n'est pas connue. Dans le chapitre ?? nous présenterons le calcul numériquement de cette limite pour différents cas de solutions breathers.

Le schéma de cette démonstration se révèle très utile parce qu'il peut être utilisé comme méthode pour la construction numérique des breathers (voir paragraphe 1.6). Nous verrons que, grâce à ce théorème d'existence, il est possible de construire à l'aide du code les solutions breathers à la limite anti-continue, et de les continuer après pour valeurs finies du couplage. La contrainte d'invariance par renversement du temps ainsi que le principe de continuation à partir de la limite anti-continue, seront utilisés pour la construction numérique des breathers. En plus, la matrice de Newton (voir Appendice ??) utilisée dans le théorème des fonctions implicite en [12] est utilisée pour l'étude de la stabilité linéaire de la solution (voir section

suivante).

1.4 Analyse de la stabilité linéaire

L'analyse de la stabilité linéaire pour les solutions type breathers est effectué à l'aide de la théorie de Floquet.

1.4.1 La théorie de Floquet

Considérons un système d'oscillateurs, invariant par renversement du temps, avec Hamiltonien H (1.2) et équation de mouvement (1.3). Le système soit de taille N finie arbitrairement grande et contenant P breathers. L'étude de la stabilité linéaire d'une solution périodique $u_n(t)$, consiste à étudier l'évolution de petites perturbations $\{\epsilon_n(t)\}$ autour de la solution $u_n(t)$ même. L'équation pour les perturbations $\epsilon = \{\epsilon_n(t)\}$ sont les équations de Hill (1.4) que on peut écrire avec l'opérateur de Newton ³ $N(\vec{u}, C)$

$$N(\vec{u}, C) \cdot \vec{\epsilon} = 0. \quad (1.19)$$

Les équations (1.4) décrivent le mouvement des possibles perturbations pour la solution non-linéaire $u_n(t)$.

Par intégrations des équations (1.4), en utilisant les $\{u_n(t)\}$ de l'équation (1.3), on obtient les vecteurs de perturbation $\vec{\epsilon}_n = \{\epsilon_n, \dot{\epsilon}_n\}$ (N valeurs de position et N valeurs de vitesse). Avec ces perturbations on construit la *matrice de Floquet* (voir le Appendice ??), qui constitue l'application qui, à partir des perturbations initiales $\{\epsilon_n(0)\}$, produit les perturbations $\{\epsilon_n(t_b)\}$ après une période t_b de la solution $\{u_n(t)\}$. En utilisant les variables conjuguées $\Omega(t) = \{\epsilon_i(t), \pi_i(t)\}$, où $\{\pi_i(t)\} = \{\dot{\epsilon}_i(t)\}$, on a donc :

$$\begin{pmatrix} \{\epsilon_i(t_b)\} \\ \{\pi_i(t_b)\} \end{pmatrix} = F_0 \begin{pmatrix} \{\epsilon_i(0)\} \\ \{\pi_i(0)\} \end{pmatrix}. \quad (1.20)$$

F_0 est reliée à la matrice T_0 de transformation pour les positions

$$\begin{Bmatrix} u_n(t_b) \\ \dot{u}_n(t_b) \end{Bmatrix} = T_0 \begin{Bmatrix} u_n(0) \\ \dot{u}_n(0) \end{Bmatrix} \quad (1.21)$$

par la relation $F_0 = \partial T_0$.

³L'opérateur de Newton a été définie dans l'application de théorème des fonctions implicite, pour la démonstration de l'existence des breathers (Appendix ??).

La matrice de Floquet F_0 , qui a dimension $2N \times 2N$, est linéaire et symplectique, c'est-à-dire, pour chaque condition initiale $\Omega^1(0)$ et $\Omega^2(0)$, le produit symplectique

$$\{\Omega^1(t), \Omega^2(t)\} = \sum_n (\epsilon_n^{(1)}(t) \pi_n^{(2)}(t) - \epsilon_n^{(2)} \pi_n^{(1)}(t)) \quad (1.22)$$

est constante. Donc si λ est une valeur propre de F_0 , aussi $\frac{1}{\lambda}$, λ^* , $\frac{1}{\lambda^*}$ sont valeurs propres de F_0 . Par diagonalisation de la matrice de Floquet on obtient $2N$ valeurs propres θ_ν , dites *multiplicateurs de Floquet*, et $2N$ correspondantes vecteurs propres $\epsilon_\nu(t)$, dites *modes de Floquet*, qui sont périodiques en temps avec dépendance harmonique :

$$\epsilon_\nu(t) = e^{i\frac{\theta_\nu}{t_b}t} \quad (1.23)$$

La périodicité est décrite par la matrice de Floquet :

$$\epsilon_\nu(nt_b) = (e^{i\theta_\nu})^n \epsilon_\nu(0) \quad (1.24)$$

Evidemment la fréquence d'oscillation des modes de Floquet est donnée par la relation

$$\omega_\nu = \frac{\theta_\nu}{t_b} \quad (1.25)$$

L'ensemble de tous les multiplicateurs de Floquet constitue le *spectre de Floquet*.

En étudiant le comportement des multiplicateurs de Floquet, on comprend la correspondante évolution à long terme des vecteurs propres $\epsilon_\nu(t)$ et donc la stabilité (linéaire) du système initial (1.3). En effet, une solution $u_n(t)$ du system (1.2) est linéairement stable si et seulement si toutes les petites perturbations $\epsilon_\nu(t)$ restent finie dans le temps, et précisément si elles ne croissent pas exponentiellement avec le temps. Il est donc nécessaire que les valeurs propres θ_ν ayant module égal à 1. En représentant les multiplicateurs de Floquet dans le plan complexe, le système est stable si et seulement si toutes les multiplicateurs de Floquet se situent sur le cercle unitaire (voir Fig. 1.24).

Il est nécessaire de souligner que cette condition implique seulement la stabilité linéaire des solutions et non pas leur stabilité absolue, et qu'elle est donc utilisable pour déduire conclusions sur la stabilité du système seulement dans le cas des perturbations de petite amplitude. Le taux de croissance des perturbations peut en effet être plus lente, par exemple avec dépendance en temps algébrique, ce qui concerne les effets des termes non-linéaire. L'étude de la stabilité non-linéaire, appelée analyse de Nekhhorotchev [11], ne sera pas traité dans ce travail.

1.4.2 Le spectre de Floquet

Les exposants de Floquet correspondent à l'ensemble des fréquences des solutions des équations linéarisées (les équations de Hill (1.4)) qui sont soit exponentiellement localisées

près de la solution breather, soit étendues sous forme des ondes planes loin du centre du breather. A chaque exposant de Floquet correspond un mode de Floquet qui constitue une possible perturbation pour le système. Dans la suite on appellera souvent “modes” les multiplicateurs de Floquet, en se referant, en réalité, à la perturbation $\{\epsilon_n, \dot{\epsilon}_n\}$ correspondante. Le spectre de Floquet, en conséquence, est constituée de deux parties : les modes localisées et les modes étendues.

1.4.2.1 A la limite anti-continue

A la limite anti-continue, un réseau de N oscillateurs contenant P breathers (solution multi-breather) aura P sites (avec code ± 1) en oscillation, et les autres $N - P$ sites (avec code 0) au repos. Dans le spectre de Floquet les P breathers avec code ± 1 correspondent à P couples de multiplicateurs de Floquet avec $\theta = 0$, donc en position 1 sur le cercle unitaire, et à $N - P$ couples de valeurs propres correspondantes aux phonons qui sont dégénérés en deux points symétriques sur le cercle unitaire (voir Fig.(1.4.2.1)).

1.4.2.2 Les modes étendues

En augmentant le couplage les modes des phonons perdent leur dégénérescence et forment deux bandes symétriques à fréquences positives et négatives, et elles constituent les modes étendues (voir Fig.(??)). Chacun de ces exposants de Floquet correspond à une fréquence de phonon avec vecteur q par la relation $\theta = \omega(q)t_b$.

1.4.2.3 Les modes internes

En augmentant le couplage aussi les modes dégénérés en 1 perdent leur dégénérescence en s'éloignant le long du cercle unitaire (et éventuellement aussi hors du cercle le long de l'axe réel pour des solutions instables) en formant les modes localisés. Un seul couple reste toujours en 1, celui correspondant au mode de phase. Ces modes localisés sont aussi appelés *modes internes* parce qu'ils reflètent les oscillations réciproques (internes) entre les breathers de la chaîne. Les modes correspondants agissent directement sur les breathers mêmes en le mettant en oscillation en temps ou en espace.

Les modes internes peuvent aussi provenir des bandes des phonons par séparation depuis les modes étendus des phonons, lors on augment le couplage. Dans le cas du breather simple tous les modes internes, excepté le mode de phase, proviennent nécessairement de la bande des phonons car le seul couple de valeurs propres étant en 1 à la limite anti-continue, doit y rester comme mode de phase.

Mode de phase Ce qu'on appelle solution breather est en effet une famille de solutions toutes avec même période mais différentes phases α , entre 0 et 2π . Une solution breather est donc invariante par translation de phase, ce qui correspond à une symétrie dans le temps pour la solution. Donc le spectre de Floquet contient nécessairement un couple de valeurs propres avec $\theta = 0$ (position 1 du cercle unitaire) qui correspond à cette symétrie. Les vecteurs propres correspondants ont une fréquence $\omega_\nu = \frac{\theta\nu}{t_b} = 0$ et ils imposent à la solution breather un changement de phase, tout en restant du même période t_b . Le mode de phase a donc comme effet de translater le breather en temps, ce qui correspond à passer d'une solution breather à une autre de la même famille (même période t_b , mais différentes vitesses initiales, donc différente phase).

Le mode pinning et mode marginal Le mode de pinning est un mode localisé et anti-symétrique en espace. Les correspondants multiplicateurs de Floquet sont isolés et près de la valeur 1 sur le cercle unitaire. L'effet de ce mode est de donner à la solution breather une oscillation en espace autour du site de breather. Quand nous sommes exactement au point de bifurcation, les multiplicateurs de Floquet se trouvent exactement à la valeur $\theta = 0$, et les correspondantes vecteurs propres deviennent colinéaires. A ce point les équations linéarisées acquiescent une nouvelles solutions dont l'amplitude croît linéairement dans le temps. Il est appelé *mode marginal* et son effet est de donner au breather une translation en espace et non plus une oscillation. . Ces modes sont particulièrement importantes dans les problèmes de mobilité. Le mode de pinning est en effet utiliser pour perturber une solution stable à fin de la mettre en mouvement, tandis que au point exact de bifurcation un breather sera perurbé avec le mode marginal.

Dans le cas de solutions étendues, commes les ondes stationnaires, tous les modes seront étendues dans un syst-ème périodique. Cependant, l'équivalent de ces modes c'est-à-dire qui perturbe la solution en pruduisant le mounvement, est pour les ondes stationnaires analytiques, le *mode de glissement* (ou *sliding mode*).

Breathing mode Ces sont des modes localisées et spatialement symétriques qui agissent sur les breathers en leurs donnant une oscillation à la forme.Le breather, restant localisé sur son site, oscillera entre une forme plus ou moins étroite (Fig.?? .a) ou, avec la même largeur, entre une amplitude plus ou moins élevée (Fig. ?? .b). Pour les effets qu'il produit ce mode est aussi appelé *mode de forme*.

1.4.3 Instabilité

Les multiplicateurs de Floquet représentés dans le plan complexe, se présentent par couples de valeurs propres complexes conjuguées qu'on peut écrire $r_\nu \exp(\pm i\theta_\nu)$ (ou $r'_\nu = 1$ pour le cercle unitaire), et leurs vecteurs propres correspondants sont $\{\epsilon_n^\nu(0), \pi_n^\nu(0)\}$ et $\{\epsilon_n^{\nu*}(0), \pi_n^{\nu*}(0)\}$. On choisit $0 < \theta_\nu < \pi$, et si $\theta_\nu = 0$ ou $\theta_\nu = \pi$ les valeurs propres sont deux fois dégénérées. Nous avons vu dans la section précédente que pour que la solution $\{u_n(0)\}$ d'un système de N oscillateurs soit linéairement stable, les $2N$ valeurs propres de l'opérateur de Floquet doivent être sur le cercle unitaire. Nous avons vu que quand le couplage varie, les multiplicateurs de Floquet se déplacent le long du cercle unitaire. Il est possible que lors de ces déplacements deux paires de valeurs propres $e^{\pm i\theta_\nu}$ et $e^{\pm i\theta_{\nu'}}$ de F_0 deviennent égales. On a donc une collision de valeurs propres et en conséquence ils peuvent sortir du cercle unitaire. La solution périodique devient donc linéairement instable car les vecteurs propres correspondants augmentent exponentiellement en temps.

Pour un système fini ces collisions de valeurs propres sur le cercle unitaire peuvent générer trois types d'instabilité :

- A) collision de deux valeurs propres complexes conjuguées à $+1$. Elle correspond à un couple supplémentaire de valeurs propres en 1, autre que le mode de phase. Cela signifie que le système présente, pour cette valeur exacte des paramètres, deux solutions avec la même période. En faisant varier les paramètres, ces deux solutions auront une continuation indépendante qui bifurque du point d'instabilité. On parle donc de *bifurcation en fourche*. Après la collision à $+1$ les valeurs propres sortent du cercle unitaire le long de l'axe réel.
- B) collision de deux valeurs propres complexes conjuguées à -1 . Elle correspond à une résonance avec une solution de double période. Après l'instabilité deux solutions, l'une avec période initiale t_b et l'autre avec double période $2t_b$, bifurquent du point d'instabilité. Les valeurs propres sortent du cercle unitaire le long de l'axe réel. Cette instabilité est appelée *bifurcation sous-harmonique*.
- C) collision de deux valeurs propres complexes conjuguées en quelques points différents de ± 1 . Elle correspond au changement de stabilité pour la solution. Elle est appelée, et nous en verrons immédiatement la raison, *instabilité de Krein*

1.4.3.1 Théorème de Krein

Le théorème de Krein [20] est très utile pour déterminer la stabilité linéaire de solutions type breathers. La signature de Krein associée à un couple de valeurs propres $e^{\pm i\theta_\nu}$ de

l'opérateur de Floquet F_0 est défini comme le sign du produit symplectique

$$k(\theta_\nu) = \text{sign}(\{\Omega^{\nu(1)}(t), \Omega^{\nu(2)}(t)\}) = \quad (1.26)$$

$$= \text{sign}\left(i \sum_i \epsilon_i^\nu(t) \pi_i^{\nu*}(t) - \epsilon_i^{\nu*}(t) \pi_i^\nu(t)\right) \quad (1.27)$$

où $\epsilon_i^\nu(t) = \epsilon_i^{\nu(1)}(t) + \epsilon_i^{\nu(2)}(t)$ est le vecteur propre complexe associé à la valeur propre $e^{i\theta_\nu}$. Car un produit symplectique est constant, $k(\theta_\nu)$ ne dépend pas du temps et il est donc bien défini. Si $\theta_\nu = 0$ ou π les vecteurs propres correspondants peuvent être choisis réels et la signature de Krein correspondante sera nulle. L'étude de la signature de Krein lors de la collision de valeurs propres peut fournir des informations sur la stabilité linéaire. Le critère de Krein [20] affirme qu'une collision entre deux couples de valeurs propres $e^{\pm i\theta_\nu}, e^{\pm i\theta_{\nu'}}$ produit une instabilité seulement si ces deux couples de valeurs propres ont des signatures de Krein différentes $k(\theta_\nu) \neq k(\theta_{\nu'})$.

Pour les trois types de instabilités decrite dans le paragraphe precedant, dans les cas a) et b) la signature de Krein est nulle. Dans le cas c) $\theta_\nu, \theta_{\nu'} \neq 0, \pi$ et le critère de Krein est applicable.

Nous étudierons dans les chapitres ?? différents types de bifurcation.

1.5 Analyse des bandes

Les équations linéarisées (1.4) (les Hill équations) peuvent être interprétées comme les équations aux valeurs propres pour l'opérateur de Newton $\mathcal{N}(\vec{u}, C)$ définies par :

$$\ddot{\epsilon}_n + V''(u_n) - C(\epsilon_{n+1} + \epsilon_{n-1} - 2\epsilon) = E\epsilon_n \quad (1.28)$$

dans le cas particulier de valeur propre E nul. Les propriétés du spectre de l'opérateur de Newton peuvent fournir des informations sur la stabilité linéaire de la solution correspondante. En effet l'analyse de ce spectre, que on appelle *analyse des bandes*, peut donner une représentation immédiate de l'analyse de Krein et donc illustrer de façon claire les bifurcations qui se produisent dans l'analyse de Floquet.

Les valeurs propres E sont des fonctions périodiques, de période 2π , et continues du paramètre de phase θ , $E(\theta)$. On choisi θ dans l'intervalle $[-\pi, \pi]$, qui correspond à la zone de Brillouin. Un groupe de valeurs propres $E_\nu(\theta)$ pour $-\pi \leq \theta \leq \pi$ est appelé *band* ν avec courbe de dispersion $E_\nu(\theta)$. Car les équations sont invariantes par renversement du temps, les bandes $E_\nu(\theta)$ sont symétriques par rapport à l'axe $\theta = 0$, $E_\nu(\theta) = E_\nu(-\theta)$.

Les coefficient de l'équation étant périodiques en temps, les vecteurs propres correspondantes au valeur propre $E_\nu(\theta)$, suivent le théorème de Block. Donc après un période ils se transforment selon l'équation :

$$\epsilon_n(\theta, t_b) = e^{i\theta\nu(E)}\epsilon_n(\theta, 0) \quad (1.29)$$

De la valeur $\theta = 0$ en (1.29), on obtien que les vecteurs propres sont périodiques avec période t_b .

L'analyse de la stabilité linéaire est obtenue en posant, dans les équations (1.28) $E = 0$. En effet les multiplicateurs de Floquet θ sont les $\theta_\nu(0)$, c'est-à-dire qu'ils sont l'intersection des bandes $E(\theta)$ avec l'axe $E = 0$ (voir Fig. ??).

Nous avons vu que un système de N oscillateurs contenant une solution breather est stable si et seulement si tous les $2N$ valeurs propres sont sur le cercle unitaire. Pour l'analyse des bandes [12] une solution breather est linéairement stable si et seulement si les bandes $E_\nu(\theta)$ coupent l'axe $E = 0$ en $2N$ points (contées avec leurs moltepllicité).

1.5.1 Evolution des bandes

A la limite anti-continue, pour un système de N oscillateur contenant P breathers, les équations aux valeurs propres deviennent :

$$\ddot{\epsilon}_n + V''(u_n)\epsilon_n = E\epsilon_n \quad (1.30)$$

Pour les $N - P$ oscillateurs au repos, $u_n = 0$, on a $V''(u_n) = \omega_0^2$, donc :

$$\ddot{\epsilon}_n + \omega_0^2\epsilon_n = E\epsilon_n, \quad (1.31)$$

qui donne

$$\epsilon(t) = e^{i\sqrt{\omega_0^2 - E} t} \quad (1.32)$$

Les bandes de (1.31) sont simplement des arcs de parabole

$$E = \omega_0^2 \pm \frac{\theta_\nu^2}{t_b^2} \quad \nu = P + 1, \dots, N \quad (1.33)$$

dégénérées $N - P$ foix (courbes rouges en Fig. (1.24). Par la relation de Block on trouve que la valeur de θ est definie mod 2π .

Les équations (??) sont des équations de Schrodinger independantes du temps, connues en mathematiques commes les équations aux valeurs propres de Sturm-Louville. Leur spectre est donc borné superieurement mais sans limite inferieure. Les valeurs propres forment des bandes $E_\nu(\theta)$, qui sont P foix dégénérés (bandes vertes en Fig. ??). Les intersections des bandes avec l'axe $E = 0$ donnent les multiplicateurs de Floquet correspondantes aux modes périodiques.

Si on augmente le couplage beaucoup de dégénérescence sont enlevées. En effet les bandes $(N - P)$ fois dégénérées correspondantes aux oscillateurs aux repos, se ouvrent en un groupe continue de bandes qui, à l'intersection avec l'axe $E = 0$, détermine les deux branches des phonons, comme on trouve le long du cercle unitaire (courbes rouges en Fig. ??).

De la même façon les P bandes dégénérées s'ouvrent en formant P bandes discrètes. Il existe toujours une bande qui reste tangente à l'axe $E = 0$ en $\theta = 0$. Elle correspond au mode de phase, et il n'est autre que le mode $\epsilon(t) = \dot{u}(t)$, qui est anti-symétrique en temps. La courbure de la bande tangente à $E = 0$ à $\theta = 0$ dépend du potentiel. Pour potentiel mou la bande est convexe et se trouve donc au dessus de l'axe $E = 0$, tandis que pour potentiel dur elle est située au-dessous de cet axe.

Dans les points de symétrie pour la zone de Brillouin, $\theta = 0, \pi$, les vecteurs propres $\{\epsilon_n''(t)\}$ peuvent être choisis réels et ils peuvent être symétrique ($\epsilon_n''(t) = \epsilon_n''(-t)$) ou anti-symétriques ($\epsilon_n''(t) = -\epsilon_n''(-t)$) en temps. Pour une solution périodique et symétrique en temps $\{u_n(t)\}$ le spectre de l'équation (1.30) est composé seulement des valeurs propres correspondantes aux vecteurs propres $\{\epsilon_n(t)\}$ symétrique en temps et de période t_b .

1.5.2 Signature de Krein

Dans l'analyse de bandes la signature de Krein d'un couple de valeurs propres conjuguées et non dégénérées $e^{i\theta_\nu}$ de T_0 sur le cercle unitaire a une simple interprétation géométrique. Elle représente [12] le signe de la pente négative de la bande à l'intersection avec l'axe $E = 0$:

$$\mathcal{K}(\theta_\nu) = -\text{sign} \left(\frac{dE_\nu(0)}{d\theta} \right) \Big|_{\theta_\nu} \quad (1.34)$$

Spiega meglio : vedi articolo di George

Donc, selon le critère de Krein, les instabilités de Krein sont causées seulement par croisement des bandes ayant différentes pentes.

Nous pouvons maintenant analyser comment les instabilités, qui nous avons précédemment détectées par l'analyse de Krein, apparaissent dans l'analyse de Floquet.

A Nous avons vu que lors de deux valeurs propres $e^{i\theta_1}$ et $e^{i\theta_2}$ de T_0 collident sur le cercle unitaire pour $\theta \neq 0, \pi$, on a une instabilité de Krein. Dans l'analyse des bandes la condition nécessaire et suffisante pour avoir cette instabilité est que θ_1 et θ_2 soient deux zéros de la même bande $E_\nu(\theta)$, qui a en θ_1 et θ_2 des pentes opposées. Évidemment, car les bandes sont symétriques par rapport à θ , on aura le même comportement en $-\theta_1$ et $-\theta_2$, ce qui correspond aux valeurs propres complexes conjuguées sur le cercle unitaire.

Quand, en variant un paramètre du système, les bandes se déplacent vers le haut du plan $(E_\nu(\theta), \theta)$, les deux zéros θ_1 et θ_2 (et $-\theta_1$ et $-\theta_2$) se rapprochent jusqu'à ce qu'ils se

identifient en $\theta_1 \equiv \theta_2$ ($-\theta_1 \equiv -\theta_2$), quand la bande devient tangente à $E = 0$. Etant la pente $\frac{dE_\nu(\theta)}{d\theta}$ opposée en θ_1 et θ_2 , le critere de Krein est verifié et une bifurcation apparait. Au dela de ce point la bande perde les intersections avec l'axe $E = 0$ et la solution est donc unstable (voir Fig. 1.5.2).

Par contre, si les valeurs propres θ_1 et θ_2 sont les zeros de deux bandes differentes et qui ont differentes symetrie, les deux valeurs propres qui se croisent sur l'axe $E = 0$, ne causent pas d'instabilités. Pour l'analyse de Floquet cela correspond aux valeurs propres se croisentent le long du cercle, mais qui ne sortent pas du cercle unitaire (voir Fig. 1.5.2)

- b Une collision de valeurs propres à 1 sur le cercle unitaire correspond à une collision à $\theta = 0, E = 0$, donc au point de tangence pour les bandes (voir Fig. 1.5.2)
- c Une collision à -1 sur le cercle unitaire correspond aux collisions, sur la bande tangente à $E = 0$, pour $\theta = \pm\pi$ (voir Fig. 1.5.2)

1.6 Construction numérique des breathers

La méthode proposée par R. Mackay et S. Aubry [1, 2] pour prouver l'existence des breathers (section 1.3.5) suggère directement des méthodes numériques pour les construire. En effet en suivant la même logique de partir des solutions breathers à la limite anti-continue, on les continue par un processus itératif, comme la méthode de Newton, en augmentant le couplage par petits pas dC . A chaque itération la solution de l'itération précédente est utilisée comme solution initiale. Une telle continuation du breather par la méthode de Newton peut être implémentée soit en augmentant le couplage à fréquence fixée, soit en augmentant la fréquence à couplage fixé, soit en variant autres paramètres du modèle, comme l'action ou l'énergie.

En considérant une système de N oscillateurs avec positions u_n et vitesses \dot{u}_n , pour chaque itération la méthode de Newton [36] consiste à trouver un vecteur à $2N$ composants $\delta\mathbf{X} = \{\delta u_i, \delta \dot{u}_i\}$ qui ajouté à la solution initiale (qui est une solution d'essai pour la première itération depuis la limite anti-continue, sinon qui est la solution de l'itération précédente) $\mathbf{X} = \{u_i, \dot{u}_i\}$ donne le vecteur solution pour l'itération courante $\mathbf{X}^{new} = \{u^{new}, \dot{u}^{new}\}$,

$$\mathbf{X}^{new} = \mathbf{X} + \delta\mathbf{X} \tag{1.35}$$

Pour un problème sans constraints de dépendance et périodicité en temps, la résolution

consisterai dans l'annulation de N fonctionnels avec N variables, $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = 0$, $\leftrightarrow \{f_i(\{x_j\})\} = \{0\}$, pour $i, j = 1, \dots, 2N$. Par la méthode de Newton-Raphson on développe en série de Fourier au premier ordre le fonctionnel $\mathbf{f}(\mathbf{x})$ près de \mathbf{x}

$$\{f_i(\{x_j + \delta x_j\})\} = \left\{ f_i(\{x_j\}) + \sum_{j=1}^N \frac{\partial f_i}{\partial x_j} \delta x_j \right\} \quad (1.36)$$

qui en forme compacte on peut écrire

$$\mathbf{f}(\mathbf{x} + \delta \mathbf{x}) = \mathbf{f}(\mathbf{x}) + \mathbf{J} * \delta \mathbf{x} \quad (1.37)$$

où \mathbf{J} est le Jacobian.

Donc on trouve le vecteur $\delta \mathbf{x}$, pour lequel $\mathbf{f}(\mathbf{x})$ soit zéro, en résolvant le système d'équations linéaires :

$$\left\{ \sum_{j=1}^N \frac{\partial f_i}{\partial x_j} \delta x_j \right\} = -\{f_i(\{x_j\})\} \leftrightarrow \mathbf{J} * \delta \mathbf{x} = -\mathbf{f}(\mathbf{x}). \quad (1.38)$$

La correction $\{\delta x_i\}$ est ajoutée à la vieille solution $\{x_i\}$

$$\{x_i^{new}\} = \{x_i + \delta x_i\} \quad (1.39)$$

et le processus est itéré jusqu'à arriver à une convergence [4]. Par contre les solutions $\{u_i, \dot{u}_i\}$ que nous cherchons maintenant sont périodiques en temps avec période $T_b = \frac{2\pi}{\omega_b}$, et il est donc nécessaire de conserver cette dépendance temporelle pendant le processus itératif, en modifiant la méthode de Newton. Ces solutions doivent satisfaire les équations de mouvement (??). En intégrant ces équations sur un période T_b on obtient l'application non-linéaire $y = T_0 \cdot x$ qui, a partir de la condition initiale $x = \{u_i(0), \dot{u}_i(0)\}$, produit les solutions après un période T_b , $y = \{u_i(T_b), \dot{u}_i(T_b)\}$. Pour trouver $\delta x = \{\delta u_i(0), \partial \dot{u}_i(0)\} = \{\delta \epsilon_i(0), \delta \dot{\epsilon}_i(0)\}$, on considère les conditions périodiques $\{u_i(T_b), \dot{u}_i(T_b)\} = \{u_i(0), \dot{u}_i(0)\}$:

$$T_0(X + \delta X) = X + \delta X, \quad (1.40)$$

et on expande autour de X

$$T_0(X + \delta X) = T_0(X) + F_0 \cdot \delta X + \delta X \quad (1.41)$$

où la matrice $F_0 = \partial T_0$ est la matrice de Floquet (appelée aussi matrice tangent), qui est calculée par intégration des équations de Hill (??) avec $2N$ conditions initiales indépendantes $\{\epsilon_i(0), \dot{\epsilon}_i(0)\}$. On obtient donc

$$(1 - F_0) \cdot \delta X = T_0(X) - X \implies \delta X = (1 - F_0)^{-1} \cdot (T_0(X) - X) \quad (1.42)$$

et la nouvelle solution pour l'itération de Newton est

$$X^{new} = X + (1 - F_0)^{-1} \cdot (T_0(X) - X) \quad (1.43)$$

car la matrice de Floquet est symplectique et a donc toujours la valeur propre 1 avec vecteur propre $\{\epsilon_i(0), \dot{\epsilon}_i(0)\} = \{\dot{u}_i(0), \ddot{u}_i(0)\}$, la matrice $(I - F_0)$ est non invertible et donc la méthode de Newton n'est pas utilisable.

Pour éviter cette inconvénient il est possible de enlever la valeur propre 1 de F_0 par réduisons de la dimensionalité de l'espace des solutions. On se restreint donc seulement à solutions périodiques en temps, donc avec vitesse initiale nulle :

$$X = \{u(0), 0\} \quad (1.44)$$

L'application obtenu par l'équation (1.4) est maintenant $T : R^N \rightarrow R^{2N}$, $Y = T \cdot X$, où T est une matrice $2NxN$, X est un vecteur $Nx1$ et $Y = 2Nx1$:

$$\begin{Bmatrix} \{u_i(t_b)\} \\ \{\dot{u}_i(t_b)\} \end{Bmatrix} = T \begin{Bmatrix} \{u_i(0)\} \\ \{\dot{u}_i(0)\} \end{Bmatrix} \quad (1.45)$$

L'application tangente $F = \partial T$ est donc elle aussi une matrice $2NxN$ et elle est constituée de N vecteur colonne, dont le i -ème est $\{\epsilon_j^i(t_b)\}$ obtenu par l'intégration, sur un période T_b , de équations de Hill (1.4) avec N conditions initiales $\epsilon_j^j(0) = 1$ et $\epsilon_j^i(0) = 0$ pour $i \neq j$. Le système d'équations pour calculer le vecteur δX devient :

$$X^{new} = X + \delta X = (I - F)^{-1}(T(X) - X) \quad (1.46)$$

est constituée de $2N$ équations avec N inconnues δX_j et donc le système est overdeterminé. Nous recherchons la solution de (1.46) par minimisation du carré de la norme

$$\|T(X) + D \cdot \delta X - (X + \delta X)\|^2 \quad (1.47)$$

qui produit donc l'algorithme modifié de Newton :

$$(1 - F)^T(1 - F) \cdot \delta X = (1 - F)^T \cdot (T(X) - X) \quad (1.48)$$

Ce set de N équations a toujours solution parce que la matrice $(1 - F)^T(1 - F)$, qui est NxN , est invertible quand la solution breather est continuable

Chapitre 2

Pénétration d'une harmonique dans la bande des phonons

Dans ce chapitre nous étudierons les propriétés d'une solution breather simple lors de la pénétration de sa fréquence fondamentale ω_b ou d'une de ses harmoniques $n\omega_b$ (n entier) dans la bande des phonons. En effet nous avons bien expliqué dans la Section 1.2.1 que, pour l'existence des breathers, il est indispensable de ne pas avoir de résonance entre chacune des harmoniques et la fréquence des phonons. Cependant, puisque dans le cas des systèmes de taille finie le spectre des phonons constitue un ensemble discret et non pas continue de valeurs, nous pouvons imaginer que des régions permises à l'existence des solutions breathers peuvent exister en correspondance des gaps entre les valeurs propres discrètes. Nous chercherons donc de pénétrer dans la bande par une continuation depuis la limite anti-continue, pour tester l'éventuelle présence des solutions breathers dans la bande.

Dans le cas du potentiel mou de Morse, la fréquence fondamentale du breather est au-dessous de la bande des phonons ($\omega_b < 1$ à $C_K = 0$). Il est donc possible de opérer de façon que soit la fréquence fondamentale, soit une harmonique supérieure pénètre dans la bande.. En effectuant une continuation numérique précise, nous observons que le breather simple, par résonance avec le phonon de bord de bande $Q = \pi$, devient un phonobreather. Par contre, par une continuation qui utilise des grandes pas numériques, nous pouvons sauter les résonances et trouver à l'intérieure de la bande des solutions qui sont très proches aux breathers, et qui nous appellerons *breathers fantômes*. Nous verrons comme chaque breather fantôme, dans des conditions particulières, peut effectuer une résonance avec un phonons et devenir un phonobreather.

Par contre, dans le cas de potentiel dur quartique, puisque déjà la fréquence fondamentale du breather est au-dessus de la bande des phonons ($\omega_b > 1$ à $C_K = 0$), le même sera pour tous les harmoniques supérieures $n\omega_b$. Donc nous ne pourrons pas rentrer dans la bande avec

aucune des harmoniques du breather simple car, dès qu'il arrive au bord de bande il diverge en taille en rejoignant l'amplitude nulle du phonon $Q = \pi$. Des solutions phonobreaters existent bien sur aussi dans les potentiels dur. Nous analyserons comment il est possible de les calculer et quelque caractéristique de lors formation.

Allons maintenant étudier ces phénomènes : nous analyserons en détail le cas du potentiel de Morse, et en suite, mais plus brièvement le potentiel dur quartique.

2.1 Potentiel de Morse

Considérons une chaîne de N oscillateurs dans un model de KG avec potentiel mou de Morse. Nous allons construire un breather simple de fréquence ω_b , de code [...00001000...], à la limite anti-continue (donc $\omega_b < 1$), et nous voulons le continuer jusqu'à ce que la deuxième harmonique $2\omega_b$ rentre dans la bande des phonons. Des différents chemins pourraient être utilisées pour pénétrer dans la bande, en variant des paramètres différents. Nous choisissons d'operer dans le plan (ω_b, C_K) , où nous entrerons dans la bande par sa limite supérieure ($Q = \pi$) par deux possibles chemins, qui nous considerons particulièrement significatives, illustrés par les lignes A-B-D et A-B-C en Fig. 2.1 (a). Avec la première A-B-D nous pourrions étudier le comportement le long de la traversé totale de la bande (depuis $\omega_b = \frac{1}{2}\sqrt{1+4C_K}$ jusqu'à $\omega_b = +1$), et en suite à $\omega_b < 0.5$ redescendre à $C_K = 0$ pour contrôler le code de la solution. Avec le deuxième chemin A-B-C, nous pourrions encore analyser la rentrée en bande, mais en plus étudier le comportement de la solution vers grands couplages et grandes amplitudes.

Nous pouvons aussi illustrer ces scénarios avec une *description* que nous appellerons *alternative*. En effet, plutôt que de représenter la bande des phonons $1 < \omega_b < \sqrt{1+4C_K}$ et les différentes harmoniques ($n\omega_b$ avec n entier) de la fréquence fondamentale, nous pouvons représenter uniquement la fréquence fondamentale ω_b et plusieurs bandes de phonons ($\frac{1}{n}\sqrt{1+4C_K}$, avec n entier correspondant à l'harmonique qui doit être représentée), comme montré en Fig. 2.1 (b). Cette dernière représentation est équivalente à la première, puisque l'harmonique n -ième $n\omega_b$ rencontre la bande $\sqrt{1+4C_K}$ à la même valeur de couplage à laquelle la fréquence fondamentale ω_b rencontre la bande $\frac{1}{n}\sqrt{1+4C_K}$, comme montré pour $n = 2$ et $\omega_b = \omega_1$ en Fig. 2.1 (b). Cette deuxième représentation s'avérera souvent très utile, le long de notre étude, ainsi que plus explicite que la première.

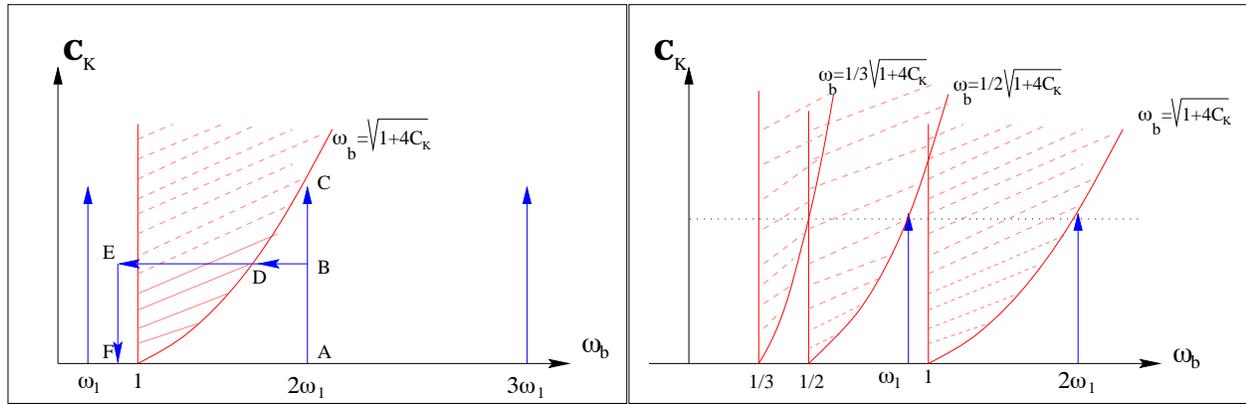


FIG. 2.1 – Représentation de la bande des phonons linéaires et des harmoniques de la fréquence ω_b d'une solution breather, dans le plan (ω_b, C_K) . En (a) est représenté le scénario réel de la bande des phonons ($1 < \omega_b < \sqrt{1+4C_K}$) avec les harmoniques de la fréquence fondamentale ω_1 . En (b), nous illustrons notre représentation alternative avec plusieurs bandes ($\frac{1}{n}\sqrt{1+4C_K}$) et la fréquence fondamentale $\omega_b = \omega_1$.

2.1.1 Les phonobreathers

Nous allons présenter dans cette section le scénario de formation d'un phonobreather depuis un breather simple. Le point de rentrée dans la bande de la deuxième harmonique correspond au point où les phonons apparaissent et donc où le phonobreather se forme. Cependant, nous verrons comment la taille N finie du système influence ce phénomène.

Nous allons explorer la formation d'un phonobreather le long des deux chemins choisis, illustrés en Fig. 2.1 (a).

2.1.1.1 Pénétration par diminution de la fréquence

Nous commençons notre étude en considérant par le premier le cas de pénétration dans la bande par diminution de la fréquence. Dans un système de N oscillateurs, construisons un breather simple à la limite anti-continue, avec fréquence $0.5 < \omega_b < 1$, par exemple à $\omega_b = 0.6$. Augmentons le couplage jusqu'à une certaine valeur, par exemple $C_K = 0.08$, d'où nous diminuons la valeur de la fréquence.

Formation d'un phonobreather Lors de la rentrée de la deuxième harmonique de la fréquence du breather dans la bande des phonons, à une valeur particulière de ω_b ($\omega_b = \frac{1}{2}\sqrt{1+4C_K} \approx 0.57445$) nous observons que les cotés du breathers, qui normalement, décroissent à zéro de façon exponentielle avec la distance du breather (chapitre 1), acquièrent des oscillations qui vont s'amplifier plus on pénètre dans la bande, comme montré en Fig. 2.2 (a). La solution breather simple, en ce point rentre en résonance avec le phonon $Q = \pi$, et

les oscillations dans les amplitudes signalent l'apparition des phonons et donc la formation du phonobreather.

Comme nous avons présenté à la Section 1.3.4.2, la solution *phonobreather* obtenue comme effet final de la résonance, résulte de la superposition du breather simple avec le phonon résonant (dans ce cas celui de vecteur $Q = \pi$). En effet, si nous continuons à diminuer la fréquence jusqu'à $\omega_b < 0.5$ pour continuer ensuite la solution jusqu'à la limite anti-continue (chemin D-E-F en Fig. 2.1 (a)), nous pouvons vérifier le code de la solution, qui se trouve être $[+2-2+2-2+2-2+2-2+2-21-22-22-2+2-2+2-2]$. Donc, dans la séquence codant du phonon avec $Q = \pi$, un code $+2$ a été remplacé par un code $+1$. Ceci correspond au breather qui oscille à la fréquence ω_b avec une amplitude plus grande que tous les autres oscillateurs qui oscillent à la fréquence $2\omega_b$. La continuation qui mène du point A au point F en Fig. 2.1 (a), c'est-à-dire de la limite anti-continue du breather simple jusqu'à celle du phonobreather, est réversible.

Il est intéressant de suivre le comportement des valeurs propres pendant cette transformation breather-phonobreather, et de analyser des effets qui sont dues à la taille finie du système. En plus, aussi les propriétés de symétrie globale du système, qui dépendent de la combinaison des conditions périodiques imposées aux bords du système et du valeur de la taille N paire ou impaire, joueront un rôle. En effet car un breather est une solution symétrique en espace, nous considérons la formation des phonobreather qui soient encore symétriques autour du site du breather. Les résonances pour la formation des phonobreathers seront donc efficaces si le phonon résonante a la même symétrie que le breather et si donc le système, avec ses conditions au bord et sa taille N peut supporter cette symétrie (nous reprenons cet argument dans la Sec. 1.24).

Nous allons analyser separement les deux différentes scénarios qui apparaissent, lorsqu'on change les conditions globales de symetrie du système (de taille N pair ou impair et conditions périodiques aux bords). Cette analyse sera utile pour comprendre le comportement d'un breather, qui est symétrique, lorsqu'il rencontre phonons de diverse symetrie.

Système de taille paire Considérons donc la formation d'un phonobreather dans un système de taille paire, de $N = 20$ oscillateurs avec conditions périodiques aux bords ($u_0 = u_N, u_{N+1} = u_1$), comme montré en Fig. 2.2 et 2.4. Nous observons que, lorsque les phonons apparaissent dans les queues du breather (Fig. 2.2 (a)) un couple de valeurs propres se rapproche sensiblement de $+1$ (Fig. 2.2 (b)) sans, toutefois, que la bifurcation ne se réalise. Nous appellerons ce phénomène 'collision évitée'. En effet, ces valeurs propres se repoussent avant de se rencontrer à $+1$ (à $\theta = 0$), en déterminant un gap autour de l'axe $\theta = 0$. Nous définissons la valeur du point de 'collision évité' comme celui où le gap est minimum, donc

où la distance entre les valeurs propres qui se rapprochent est minimale. Dans notre cas ce point a la valeur $\omega_b \approx 0.5745$. Nous calculons aussi que la largeur de ce gap dépend de la taille N du système, et en particulier décroît lorsque N augmente, comme illustré en Fig. 2.2 (d). Ce comportement de ‘collision évitée’ a été observé aussi par Kopidakis et Aubry [36] lors de leur étude sur l’existence des breathers dans la bande pour un système désordonné. Le scénario pour les systèmes désordonnés est évidemment différente, puisque le breather résonne avec des solutions qui sont localisées (à cause du désordre) tandis que dans notre cas la résonance s’effectue avec des phonons étendus. Cependant dans les deux cas on observe un breather qui pénètre dans la bande et devient, en général, un multibreather. Pour Kopidakis et Aubry la “non-collision” était la confirmation de la choix de la bonne séquence codant tel que on puisse entrer dans la bande. De façon similaire, notre collision évitée signale la pénétration en bande avec la formation d’un phonobreather, suite à la résonance avec un phonon.

Si nous étudions le mode correspondant au couple de valeurs propres qui se rapprochent à $+1$ mais qui rebondissent sans se collisionner, nous observons qu’il est symétrique par rapport au site centrale du breather, comme montré en Fig. 2.2 (d). Puisque le breather a cette même symétrie, il existe en générale un couplage entre ce mode et le breather.

En effet, la bifurcation à $+1$ entre les deux valeurs propres qui se sont précédemment évités, se réalise réellement mais à une fréquence plus basse (à $\omega_b \approx 0.4346$ pour $C_K = 0.08$, en Fig. 2.2 (c)). Cette bifurcation à $+1$ correspond à la sortie sur l’axe réel de deux valeurs propres (voir Fig. 2.4 (a) et (b)), et le point où elle se réalise ne dépend pas de la taille N du système. Le mode correspondante à cette instabilité réelle est symétrique par rapport au site centrale du breather (Fig. 2.4 (c)), comme le mode de la collision évitée.

Nous observons aussi la présence d’une autre collision à $+1$, à $\omega_b \approx 0.4711$, d’un couple de valeurs propres, qui sortent sur l’axe réel comme montré en Fig. 2.4 (c) et (d)). Le mode correspondante est cette fois-ci anti-symétrique par rapport au site centrale du breather (Fig. 2.4 (c)). Puisque cette collision correspond à la résonance avec un phonon de symétrie opposée par rapport au breather, il n’y a pas de couplage entre ces deux modes. Une instabilité se manifeste mais la continuation de la solution n’est pas affectée. Probablement cette collision correspond à la formation d’un phonobreather qui est anti-symétrique par rapport au site centrale du breather, comme nous expliquerons dans la Sec. 1.24)).

Analyse des bandes L’analyse des bandes, montré en Fig. 2.5, effectuée autour de cette zone de transition breather-phonobreather, s’avère utile pour mieux comprendre le scénario globale et en particulier la “collision évitée” entre les valeurs propres.

Le spectre des phonons est constitué d’une série des modes de vecteur Q différent, à partir de $Q = \pi$, et ils sont alternativement de symétrie opposée. En numérotant les phonons de

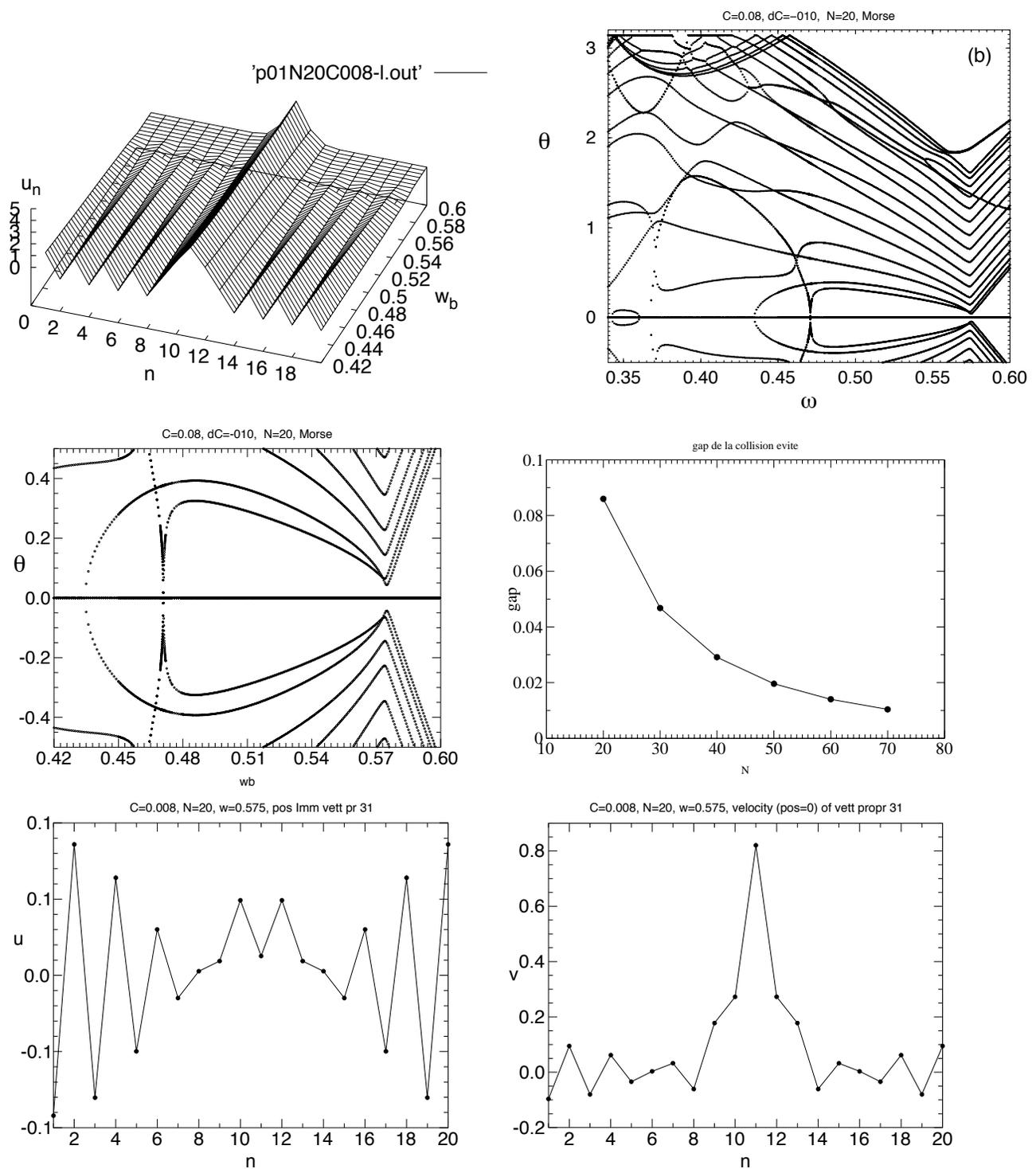


FIG. 2.2 – (a) Amplitude et (b) angle des valeurs propres lors de la pénétration dans la bande des phonons linéaire d'un breather simple, dans un système de taille $N = 20$, avec $C_K = 0.08$. On observe la 'collision évitée' des valeurs propres à $\omega_b \approx 0.5745$, avec ouverture d'un gap autour de l'axe $E = 0$, dont la largeur dépend de la taille N du système comme montré en (d). En (e) et (f) est représenté le mode correspondant (partie imaginaire des position et partie réel des vitesses respectivement) à la collision évitée, qui est symétrique par rapport au site centrale du breather.

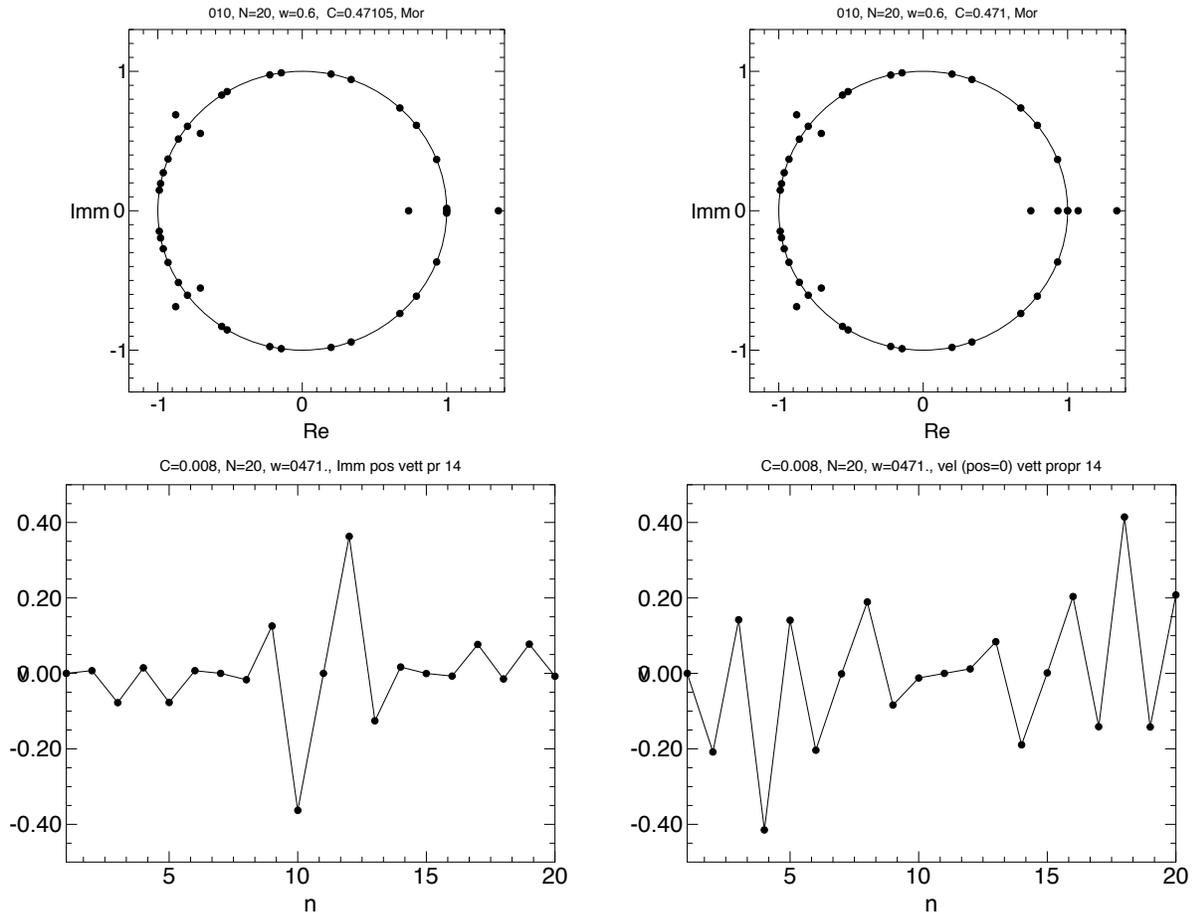


FIG. 2.3 – Pour le même système de Fig. 2.2, les valeurs propres, en (a) à $\omega_b = 0.47105$ et en (b) à $\omega_b = 0.4710$, autour du point de collision à $\omega_b \approx 0.4711$ due à la résonance avec un phonon de différente symetrie. En (c) et (d) est réporté la partie imaginaire des positions et partie réel des vitesses du mode correspondante qui est anti-symétrique par rapport au site du breather.

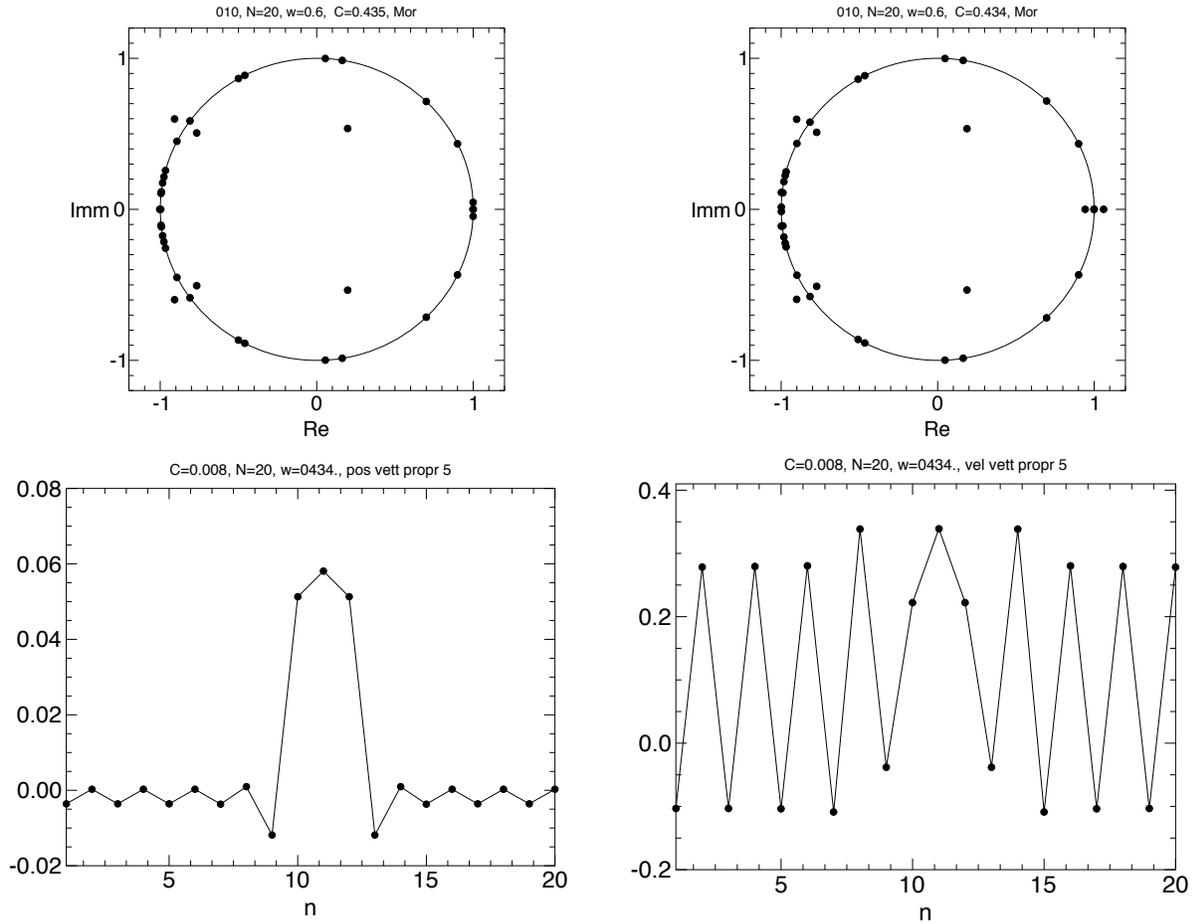


FIG. 2.4 – Pour le même système de Fig. 2.2, en (a) et (b) sont réportées les valeurs propres, à $\omega_b = 0.434$ et $\omega_b = 0.435$ respectivement, autour du point de la bifurcation à $\omega_b \approx 0.4346$ due à la résonance avec $Q = \pi$. En (c) et (d) positions et vitesses (réels) du mode correspondante qui est symétrique par rapport au site du breather.

la bande par $Q_i = \frac{\pi}{N}(N + 1 - i)$ avec $i = 1, \dots, N$, nous appellerons phonons d'ordre impair (pour i pair) ceux qui ont la même symétrie que $Q = \pi$, et d'ordre pair (pour i impair) ceux qui ont symétrie opposée. Tout d'abord dans les Fig. 2.2 nous observons que, du à la taille finie du système, la structure de bandes résulte déformée lors du croisement du mode localisée (le breather) avec les modes étendus (les phonons). Comme décrite par Marin et Aubry [9], le mode de phase développe une structure de gaps en correspondance de chaque croisement avec un mode étendu de la même symétrie. En conséquence le mode de phase n'est plus monotone [9] mais est constitué de différentes parts curvilignes (qui Marin et Aubry ont appelés *wiggles* qui connectent bandes différents des phonons avec la même symétrie. Dans notre étude il sera souvent utile de nous référer à cette nouvelle structure de lignes tortueuse (les 'wiggles') qui apparaît. Nous soulignons en tout cas que chaque une de ces lignes tortueuse ne correspond pas à une seule bande avec un certain vecteur Q , mais au contraire elle est composée de différentes parties de bandes des phonons (avec différent Q) qui se couplent entre eux. Par contre, car elles seront utiles pour comprendre le scénario globale de couplage entre breather et phonons, nous allons les avoir labellées avec des numéros dans les Figures 2.5.

Dans les figures présentées il est clair que pour notre cas de N pair et conditions périodiques aux bords, il existe couplage seulement entre le breather et les phonons d'ordre impair (et en particulier avec le premier $Q = \pi$). Cela confirme le fait que le mode relié à la 'collision évitée' est symétrique, comme le breather.

Nous observons que le mode de phase proprement dit (c'est-à-dire le mode du breather qui constitue la bande tangente à $E = 0$ et $\omega = 0$) est en effet connecté seulement au mode de phonon π , en formant une 'bande parabolique' que nous avons labellée avec le numéro 1 en figure. Le phénomène de 'collision évitée' s'explique par la formation d'une zone de dépression (un *creux*) autour de $\omega = 0$ dans la 'bande curviligne' labellé 3. Cette zone de creux pour la ligne 3 appartient en effet à la bande du phonon Q , qui donc, à cause de cette structure, évite le croisement de la bande avec $E = 0$ (Fig. 2.5 (b) et (c)).

C'est par contre la bande labellé 2, qui a symétrie opposé au mode de phase, qu'inter-seque par première l'axe $E = 0$ (Fig. 2.5 (e)) et dès qu'elle se déplace au-dessus de cet axe l'instabilité observé à $\omega_b \approx 0.4711$ apparaît.

La collision observée à $C_K \approx 0.4643$ se manifeste lorsque la bande 3 (Fig. 2.5 (f)) finalement inter-seque l'axe $E = 0$. Nous pouvons voir cela comme la fin du processus de collision commencé avec la déformation à creux des bandes, c'est-à-dire avec la collision évitée des valeurs propres.

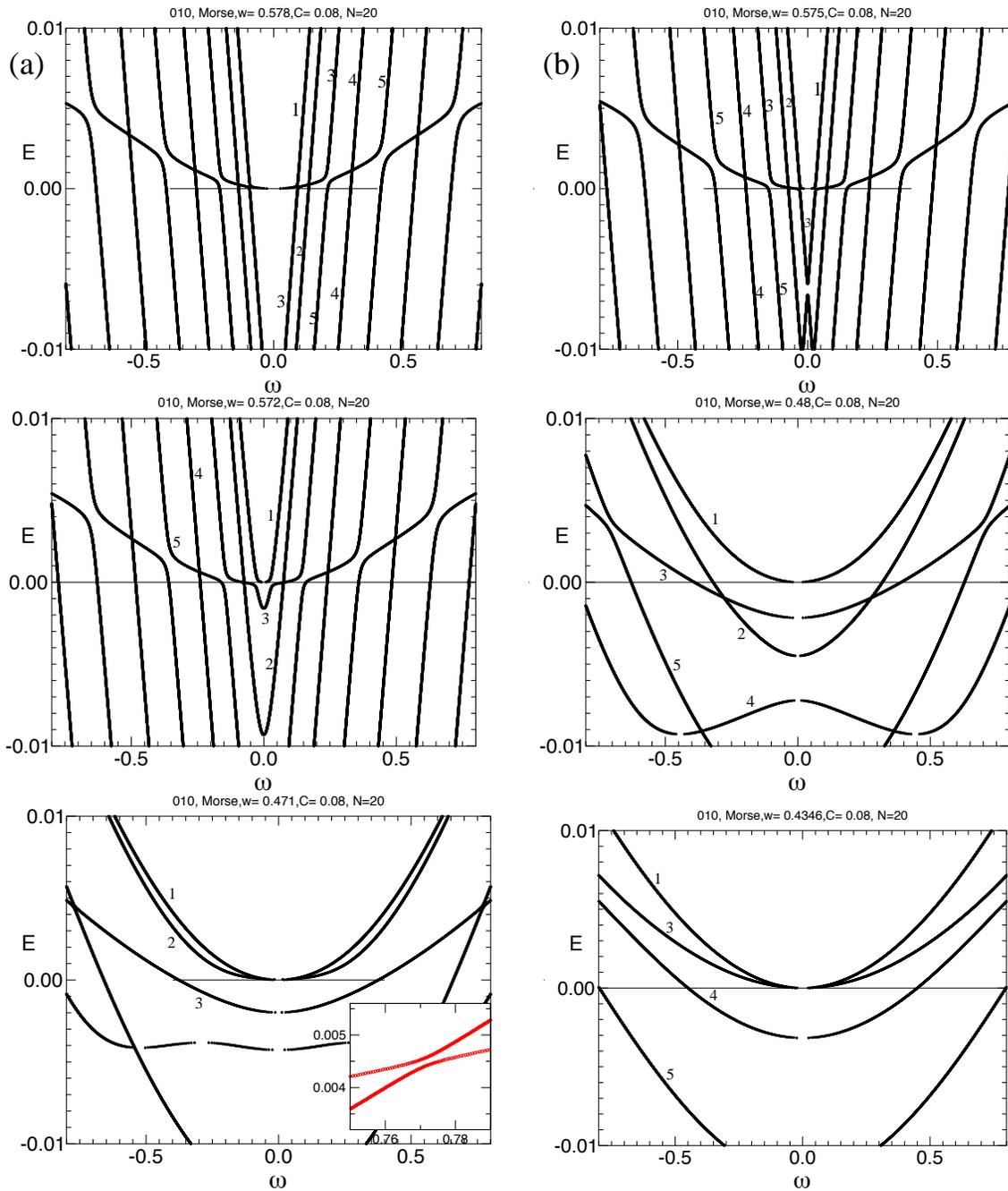


FIG. 2.5 – Spectre des bandes, pendant la formation d'un phonobreather depuis breather dans un système de taille $N = 20$ à $C_K = 0.08$. Pour effet de taille nous observons la structure à 'bandes curvilignes' (voir text). Les figures (a), (b) et (c) ($\omega_b = 0.578$, 0.575 , et 0.572 respectivement), montrent le spectre autour de la collision évitée à $\omega_b \approx 0.5745$, due à la formation (avec formation d'une structure avec une depression près de $\theta = 0$ dans la 'bande curviligne' (labellée 3), dont la part du creux correspond à $Q = \pi$). (d) $\omega_b = 0.48$ montre la graduelle montée de la bande labellée 2 qui à (e) $\omega_b = 0.4711$ intersecte l'axe $E = 0$ (collision à $+1$ de Fig. 2.2 (c)). Des qu'elle passe à $E > 0$ un'instabilité se produit, mais sans problèmes pour la continuation de la solution puisqu'elle a symétrie opposée au mode de phase. En (f) $\omega_b \approx 0.4346$ la bande 3, relative à $Q = \pi$ finalement interseque $E = 0$, et cela correspond à la effective collision à $+1$ observée en Fig. 2.2 (c) au ω_b relativ

Système de taille impaire Nous considérons maintenant la formation d'un phonon-breather dans une chaîne de taille impaire de $N = 21$ oscillateurs avec des conditions périodiques aux bords.

Penetrions encore dans la bande des phonons par diminution de la fréquence à couplage fixé ($C_K = 0.08$). Comme montré en Fig. 2.6 (b) nous observons que, à la rentrée de la deuxième harmonique dans la bande des phonons il existe maintenant une réelle collision à $+1$ d'une couple de valeurs propres, à $\omega_b \approx 0.57365$ (qui est un peu inférieure aux valeurs de la rencontre de la bande $\omega_b = \frac{1}{2}\sqrt{1+4C_K} \approx 0.57445$, en raison de la taille finie du système), qui sortent sur l'axe réel (Fig. 2.6) (c), (d) et (e). Le mode correspondant au couple qui collisionnent est anti-symétrique autour du site du breather (Fig. 2.6 (f)) et donc il n'y a pas de couplage entre ce mode et le breather. En conséquence cette collision produit un'instabilité mais ne peut pas perturber la continuation de la solution breather. Du point de vue des propriétés de symétrie, cette collision correspond à la collision à $\omega_b \approx 0.4711$ observée dans le cas précédent de $N = 20$.

L'analyse des bandes en Fig. 2.7, montre en effet l'absence de couplage entre le mode de phase (donc le breather) et le premier phonon ($Q = \pi$) ainsi que tous les phonons d'ordre impairs. Comme pour la ces précédent de $N = 20$ nous observons la déformation des bandes, due à la taille finie du système, avec la structure de bandes curvilignes décrite précédemment. Nous observons aussi que l'ouverture du gap dans la band du phonon $Q = \pi$, due à la collision entre deux modes étendues, a particulière importance. Nous avons labellé la partie supérieure et inférieure au gap avec les numeros 1 et 3 respectivement. La première collision à $+1$ correspond à l'intersection avec l'axe $E = 0$ de la bande supérieure 1 (Fig. 2.7 ()), qui en passant à $E > 0$ (Fig. 2.7 (d)) produit l'instabilité montrée en Fig. 2.6 (d)). Comme nous avons illustré par les Figs. 2.7 (c), (d) et (e), l'intervalle de cette instabilité est très étroite : en effet il termine lorsque la partie inférieure de la bande (labellé 3) interseque $E = 0$. La région d'instabilité correspond donc à l'intersection de ce gap (entre les courbes 1 et 3) avec $E = 0$. En tout cas, puisque ces croisement avec l'axe $E = 0$ concernent la bande de $Q = \pi$ qui a symetrie different de la solution, seulement des instabilités apparaissent mais pas des problèmes de continuation de la solution. A l'exception de cette bifurcation initiales, les autres caractéristiques générales des bandes se présentent similaires au cas précédente (de $N = 20$). Nous pouvons observer par exemple la structure à creux, labellée 4 qui correspond, comme précédemment à la collision évitée.

Considerations de symetrie Nous avons étudié les deux cas de taille N pair ou impair avec conditions périodiques au bord du système, parce que ils summarisent les possibles scénarios de symétrie relative lors de la résonance du breather avec un phonon. Nous remar-

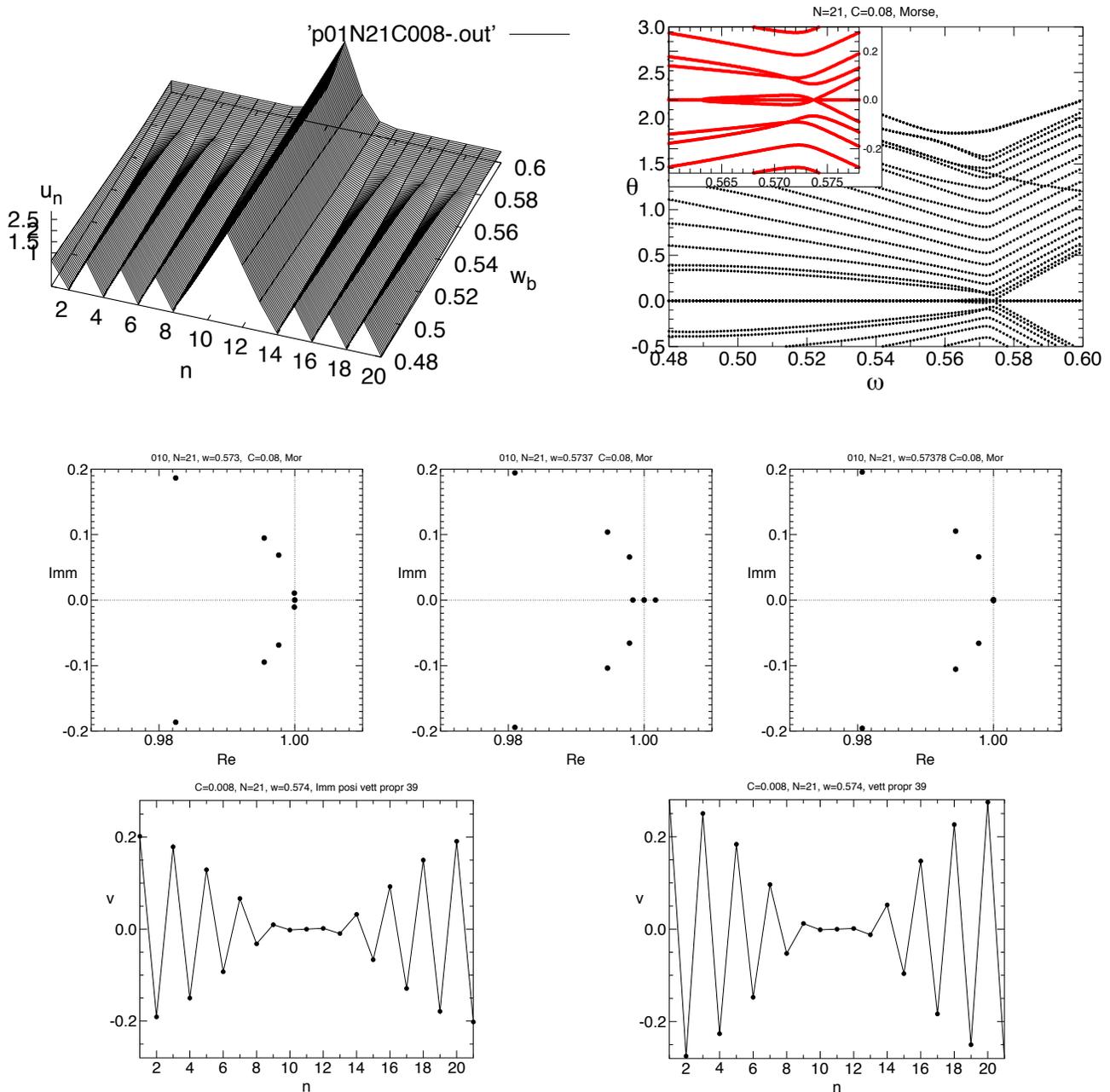


FIG. 2.6 – (a) Amplitude et (b) multiplicateurs de Floquet pour un breather simple dans une chaîne de KG de $N = 21$ oscillateurs avec conditions périodiques au bord, dans un potentiel de Morse, à $C_K = 0.08$. L'insert en (b) montre l'agrandissement de la collision à $+1$ (à $\omega_b \approx 0.57365$) lors de l'entrée de la deuxième harmonique dans la bande des phonons, dont le comportement des valeurs propres est représenté en (c), (d) et (e) pour $\omega_b = 0.5730$, 0.5737 et 0.5738 respectivement. En (f) et (g) est représenté le mode correspondante (la partie imaginaire des positions et la partie réel des vitesses respectivement), qui est anti-symétrique par rapport au site centrale du breather.

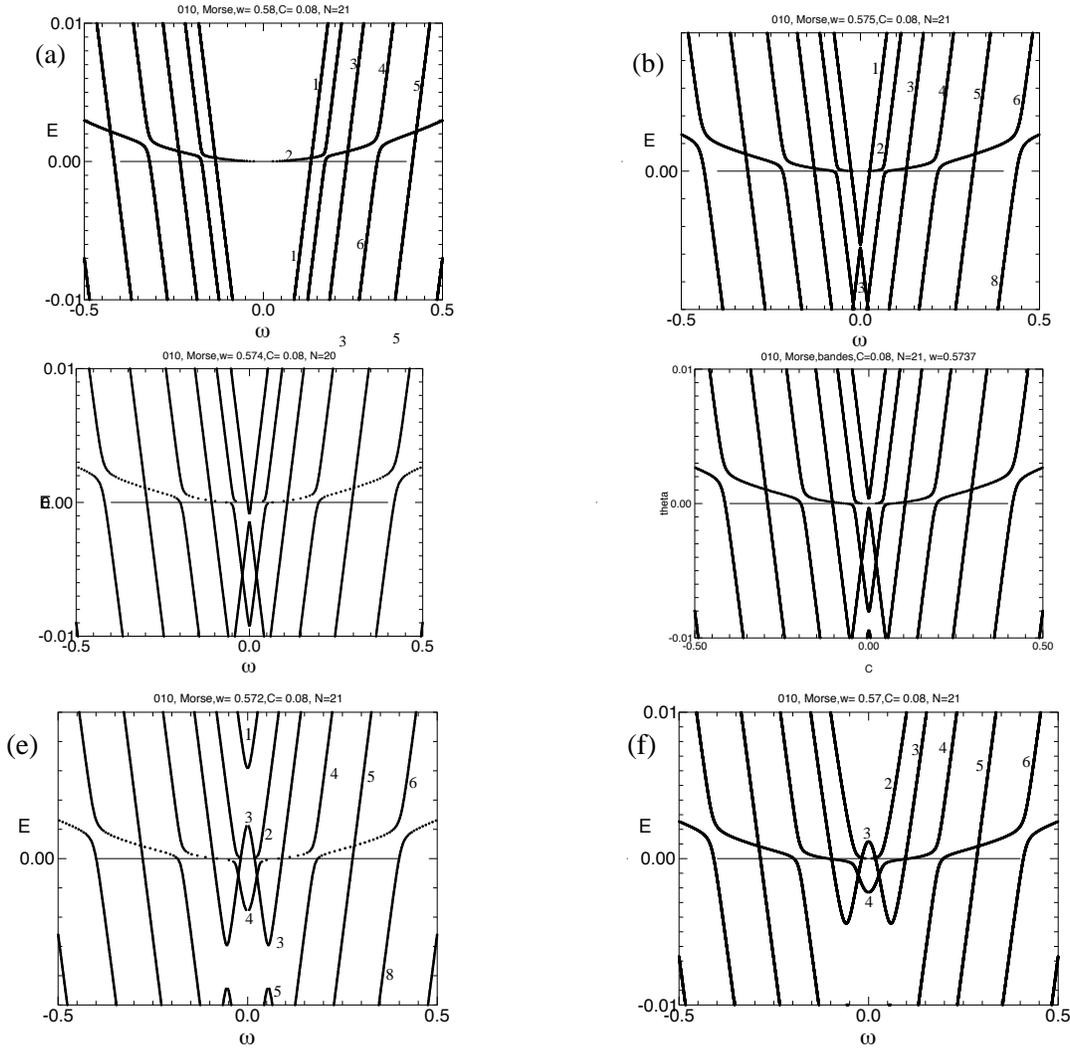


FIG. 2.7 – Spectre des bandes relative à la transition breather simple et phonobreather, à $C_K = 0.08$, pour un système de $N = 21$ oscillateurs. On observe, depuis (b), l'ouverture d'un gap dans la bande du phonon $Q = \pi$ (entre les courbes labellées 1 et 3) dont l'intersection avec $E = 0$ (d) correspond à un régime d'instabilité. Ce régime commence lorsque la courbe labellée 1 coupe l'axe $E = 0$ (entre (b) et (c)) ce qui correspond à la collision à $+1$ des valeurs propres à $\omega_b \approx 0.5737$, montré en Fig. 2.6 (b). Ce régime d'instabilité termine lors de l'intersection à $E = 0$ de la courbe 3 (entre (d) et (e)).

quons d'abord que le premier cas de N pair avec conditon périodiques au bord est, pour la symétrie global du système, équivalent à un système de taille N impair mais avec conditions aux bords anti-périodiques ($u_0 = -u_N, u_{N+1} = -u_1$), et viceversa pour le deuxième cas (un système de taille N pair avec conditions aux bords anti-périodiques equival à un système de taille N impair et conditions périodiques). En effet il est importante de considerer les propriétés de symétrie par rapport au breather. Etant le breather symetrique nous recherchons des solution phonobreather qui soient symetriques autour du breather. Les systèmes du premier cas (N pair avec conditions périodiques) peuvent contenir de façon périodique une sequence alternée (comme la séquence codante du phonon $Q = \pi$) sans defeaut au bords. Lors de la superposition du breather sur le phonon pour la formation du phonobreather le system peut donc conserver la symetrie par rapport au site breather.

Par contre, dans les systèmes du deuxième cas (N impair avec conditions périodiques), les conditions de symetrie globale sont telles que une séquence de signes alternés (comme le code d'un phonon) doit necessairement contenir un défaut aux bords pour que soit repetible périodiquement. Si on superpose le breather au phonon ce défaut se localisera autour du breather qui déjà répresent un défaut pour le phonon. En consequence nous obterrons des phonobreathers anti-symetriques autour du site du breather. Car avec notre routine de calcul nous recherchons solution (phonobreathers) symétriques autour du breather, lors le breather resonance avec un phonon anti-symetrique un'instabilité se manifest, mais la continuation vers le phonobreather anti-symétrique n'est pas observée. Bien sur nous pourrons calculer ces solution soit depuis la limite anti-continue, soit directement au point d'instabilité en perturbant la solution breather dans la direction de ce mode instable. Neanmoins ce calcul n'a pas été l'objet de notre étude.

2.1.1.2 Pénétration par augmentation du couplage

Considérons maintenant le deuxième chemin (A-B-C de Fig. 2.1 (a)) de pénétration dans la bande des phonons seulement par augmentation du couplage depuis la limite anti-continue, à $0.5 < \omega_b < 1$ fixé (par exemple $\omega_b = 0.6$), d'un breather dans une chaîne de KG de taille $N = 60$ (Fig. 2.8). De façon similaire au cas précédant, à une valeur particulière du couplage ($C_K = \frac{(2\omega_b)^2 - 1}{4} = 0.11$ pour $\omega_b = 0.6$), la deuxième harmonique rentre dans la bande des phonons. A ce point, comme vu précédemment et comme montré en Fig. 2.8 (a), le breather simple rentre en résonance avec le phonon $Q = \pi$, la queue des phonons apparaît et nous avons formation du phonobreather. Une collision à $+1$ des valeurs propres se manifest en suite à $C_K \approx 0.1359$ pour $\omega_b = 0.6$ (voir Fig. 2.8 (b) et (c)).

Nous sommes intéressés par l'étude du comportement du phonobreather en le continuant vers des grands couplages, et donc de plus en plus dans la bande vers de grandes amplitudes

(ce type d'étude sera reprise dans la partie II). Nous observons en Fig. 2.8 (a) que les amplitudes des phonons augmentent plus on pénètre dans la bande. Le breather s'élargie, des oscillations apparaissent aussi dans sa forme même, et enfin, à un certain couplage ($C_K \approx 0.3535$ pour $\omega_b = 0.6$ et $N = 60$), le breather disparaît. La chaîne des $N = 60$ oscillateurs devient occupée par le phonon $Q = \pi$. Tous les sites oscillent en phase alternées à la même amplitude en module. Cette transformation de la forme de l'onde correspond à une collision à $+1$ de deux valeurs propres qui rentrent sur le cercle unitaire par l'axe réel, comme montré en Fig. 2.8 (d). Cette transition vers le phonon $Q = \pi$ dépend très faiblement de la taille finie du système. Pour un système de taille $N = 20$, elle se manifeste à $C_K \approx 0.351825$.

En augmentant encore le couplage, le phonon s'amplifie et il diverge en taille. Ce comportement dépend cependant de la forme du potentiel. Dans notre cas puisque le potentiel de Morse devient plat à grandes amplitudes, cette divergence correspond à la sortie des oscillateurs du puit de potentiel. Nous verrons ce même comportement aussi dans la suite, lors de l'étude des ondes stationnaires au chapitre 7.

Le scénario de formation des phonobreathers que nous avons illustré, à la fréquence $\omega_b = 0.6$, se manifeste pour les autres valeurs de fréquence $0.5 < \omega_b < 1$, jusqu'à ω_b proche de la bande des phonons.

2.1.2 Résonance avec la première harmonique

Nous présentons maintenant un autre type de résonance qui se produit pour le breather simple en conséquence de la taille finie du système. Dans les cas où on a réalisation de cette résonance, il n'y aura pas formation du phonobreather.

En effet, si nous effectuons la continuation en couplage pour des fréquences très proches de la limite de bande des phonons, $\omega_b = 1$, nous observons des effets de résonance de la fréquence ω_b du breather avec le phonon $Q = 0$ de la première harmonique. Néanmoins cette résonance dépend complètement de la taille du système.

Considérons donc un breather simple, dans une chaîne de KG de $N = 20$ oscillateurs, à $C_K = 0$ et à fréquence ω_b près de 1, par exemple $\omega_b = 0.99$. En augmentant par continuation le couplage à fréquence fixée, nous observons que le breather commence à s'élargir comme montré en Fig. 2.9 (a). Les oscillateurs, compris ceux qui sont aux bords du système fini, augmentent leur amplitude d'oscillation et le breather perd donc sa caractéristique queue décroissante exponentiellement vers zéro. A un certain couplage $C_K = C_P(N)$, le breather est tellement élargi qu'il occupe le système entier. Tous les oscillateurs de la chaîne rejoignent une valeur constante d'amplitude, égale à celle du breather à $C_K = 0$. A ce point nous observons une collision à $+1$ d'un couple de valeurs propres (Fig. 2.9 (b)), qui signale la

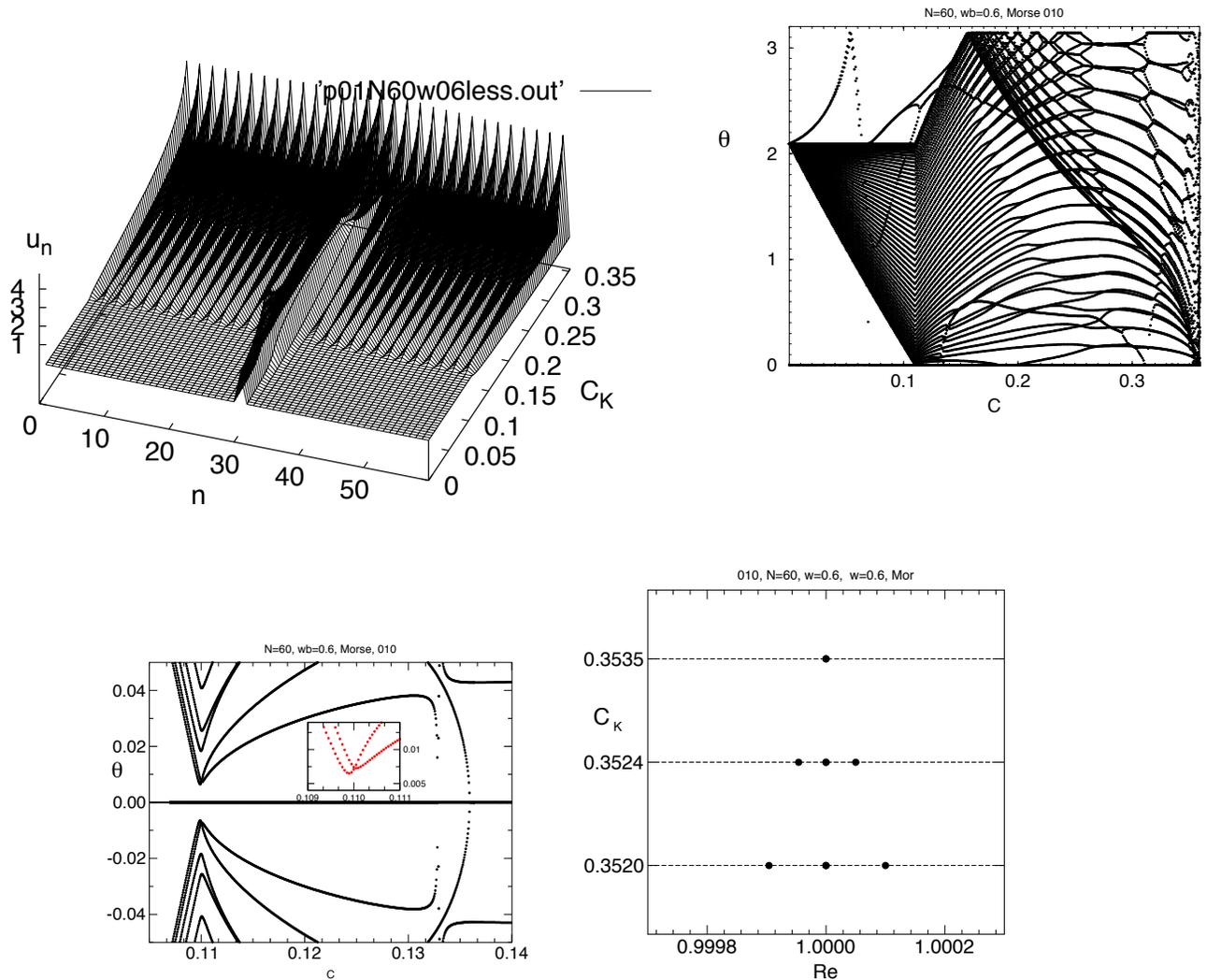


FIG. 2.8 – Amplitude (a) et angle (b) des valeurs propres (en (c) agrandissement des collisions à $+1$ en (b) avec en insert le croisement des bandes lors de la collision évitée) lors de la pénétration dans la bande des phonons linéaire d'un breather simple, dans un système de taille $N = 60$, avec $\omega_b = 0.6$, en augmentant C_K . En (d) le comportement des valeurs propres sur l'axe réel, lors à $C_K = 0.3535$ le phonon $Q = \pi$ occupe entièrement la chaîne et le breather disparaît.

résonance, effectuée par le breather, avec le phonon non-linéaire $Q = 0$.

Si, pour une valeur fixée du couplage $C_K < C_P(N)$ nous augmentons la fréquence pour rentrer dans la bande des phonons, à une certaine valeur $\omega_b = \omega_P(N)$ nous rencontrons encore la résonance avec le phonon (non-linéaire) $Q = 0$. Comme montré en Fig. 2.9 (c) et (d), à ce point les oscillateurs de la chaîne oscillent à amplitude constante, celle-la change graduellement et tend vers zéro en bord de bande $\omega_b = \sqrt{1 + 4C_K}$. Comme précédemment, ce point correspond à une collision à +1 d'une paire des valeurs propres.

Le point de résonance La bifurcation rencontrée à $C_K = C_P(N)$ ou $\omega_b = \omega_P(N)$ correspond, comme nous avons dit, à la résonance avec le phonon $Q = 0$ qui, dans le cas linéaire correspond exactement au limite de bande $\omega_b = 1$. Les différentes positions ($C_P(N)$ ou $\omega_P(N)$) observées pour cette résonance sont dues à la taille finie du système. Cette résonance se réalise lorsque le breather est élargi au point qu'il occupe complètement le système. Cette solution qui est fortement non-linéaire a complètement perdu sa forme puisque les queues du breather ont la même amplitude que celle du breather même. Il est donc évident que ce point de résonance dépend fortement de la taille N du système. Plus petit sera la taille N et plus rapidement le breather, en s'élargissant, occupera la chaîne entière et se rapprochera au phonon $Q = 0$ avec lequel enfin se confond. La Fig. 2.15 montre la dépendance de $C_P(N)$ de la taille N du système. En extrapolant pour des systèmes de taille de plus en plus grandes, cette résonance semble se déplacée à couplage infini, ce qui suggère l'absence de résonance à la limite de taille infinie.

2.1.3 Les breathers fantômes

Nous venons de montrer comment un breather simple, de code [...0001000...], par résonance de sa deuxième harmonique avec le phonon $Q = \pi$ rencontré à la limite de bande $2\omega_b = \sqrt{1 + 4C_K}$, donne formation à un phono-breather de code [...2-22-21-22-22...] qui est la superposition du breather et du phonon résonant.

Cependant, dans la bande des phonons $1 < \omega_b < \sqrt{1 + 4C_K}$ pour chaque phonon Q il existe une bande $\omega_b = \sqrt{1 + 4C_K} \sin Q/2$. Il est donc naturel de penser qu'il peut aussi exister d'autres solutions phonobreathers, donnés par la superposition du breather simple aux différents phonons de vecteur Q . Cependant, la résonance relative pour la formation de ces phonobreathers devrait parvenir à l'intérieur du domaine $1 < \omega_b < \sqrt{1 + 4C_K}$, et en correspondance de la bande du phonon concerné. Le problème se pose donc, pour la possibilité d'avoir un breather simple dans la bande.

La condition de non-résonance (Section 1.2.1) entre la fréquence des phonons et la fréquence ω_b du breathers et de toutes ses harmonique $n\omega_b$ (avec n entier) est indispensable

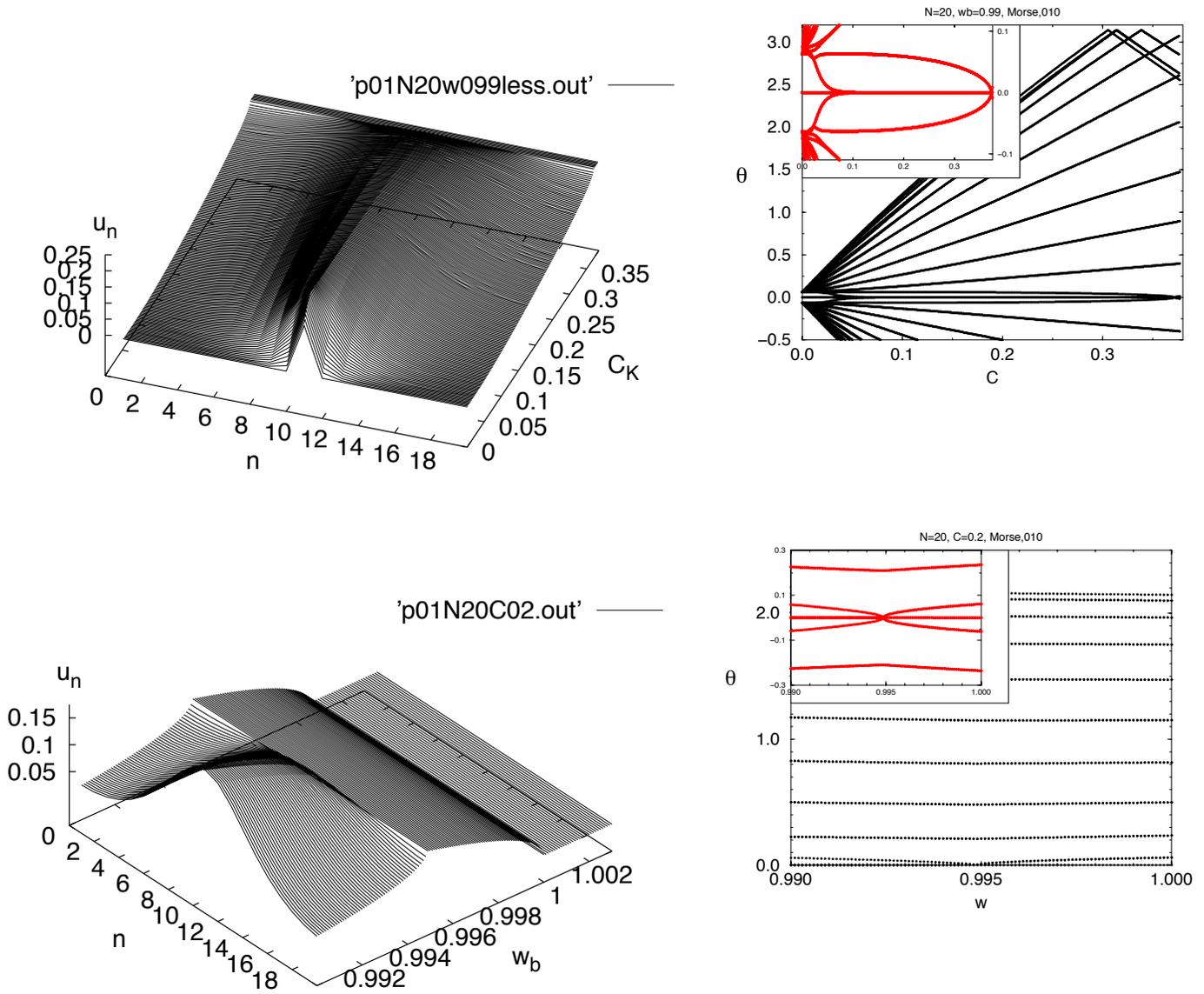


FIG. 2.9 – Amplitude ((a) et (c)) et angles ((b) et (d)) des valeurs propres (avec en insert l'agrandissement de la zone proches de $\theta = 0$), pour la continuation en couplage à $\omega_b = 0.99$ fixée ((a) et (b)), et à $C_K = 0.08$ ((c) et (d))) fixé, pour un breather simple dans une chaîne de KG de $N = 20$ oscillateurs, avec potentiel de Morse.

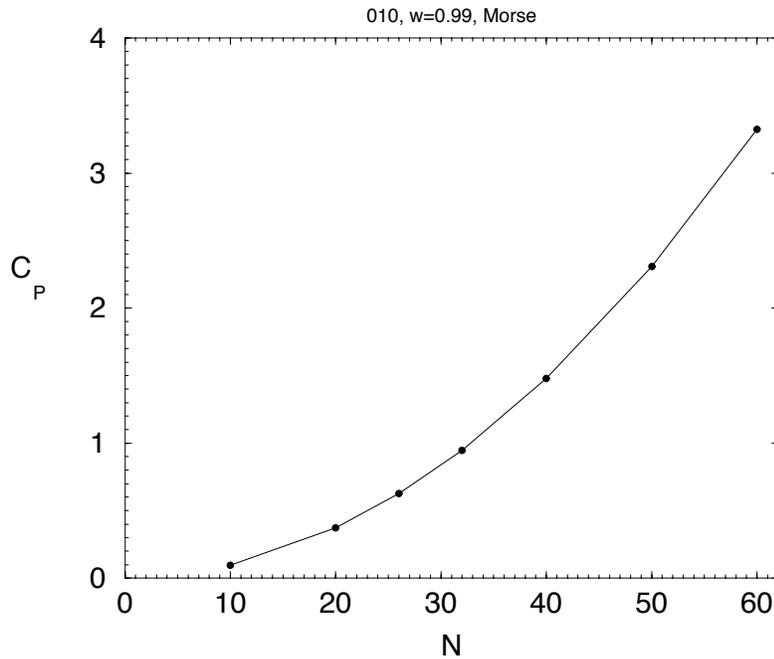


FIG. 2.10 – Point de résonance $C_K = C_P(N)$ entre le breather et le phonon $Q = 0$ de la première harmonique, en fonction de la taille N du système, pour une chaîne d’oscillateurs KG avec potentiel de Morse, à $\omega_b = 0.6$.

pour l’existence d’une solution breather. Pour un système infini, cela signifie que ω_b et tous les $n\omega_b$ doivent être hors de la bande des phonons, qui devient donc un intervalle continu interdit à ω_b . Mais, comme nous l’avons rappelé dans le paragraphe ??, pour un système fini les bandes des phonons sont en réalité constituées d’un spectre de niveaux d’énergie, les valeurs propres, discrets et finis, en nombre égal au nombre d’oscillateurs composant le système. Plus la taille du système augmente, plus cet ensemble devient dense, et on a des vraies bandes seulement à la limite infinie du système. Donc, pour N fini, les régions interdites à l’existence des breathers sont en effet seulement les zones discrètes correspondant aux bandes des phonons. Nous pouvons hypothiser que des solutions breathers localisées peuvent exister en correspondance de ces intervalles.

En 1999, Kopidakis et Aubry [36] ont calculé des solutions breathers exactes à l’intérieur de la bande des phonons pour un système désordonné, qu’ils ont appelées “Breathers Intrabande”. Maintenant nous aussi nous allons étudier la possible existence de solutions de type breather dans la bande, mais pour notre chaîne (ordonnée) de KG avec potentiel de Morse. Nous utiliserons le nom *breathers fantômes* pour les solutions trouvées, puisque leur nature est en effet différente de celle des breathers intrabandes, et il s’inspire du fait que ces solutions sont calculées dans des intervalles où en principe elles ne pourraient pas exister.

Nous verrons aussi leurs similarités et leurs différences par rapport aux “vrais breathers” construits depuis la limite anti-continue.

2.1.3.1 Calcul des solutions fantômes

Nous voulons calculer des solutions qui existent seulement dans les “zones permises” dans le spectre discrète des phonons d'un système fini, c'est-à-dire où il n'y a pas de résonances avec les phonons. Il est donc nécessaire de trouver la façon de rejoindre par continuation ces solutions, en provenant de l'extérieure de la bande.

La technique consiste à rentrer dans la bande en sautant les zones interdites (les bandes des phonons) qui, nous le répétons, seront de plus en plus denses avec l'agrandissement du système. Il faudra donc, dans la méthode de Newton pour la continuation de la solution, utiliser des pas numériques (dC ou $d\omega$) suffisamment grands pour sauter les résonances, mais suffisamment petits pour que la Newton converge en garantissant la continuation à une solution correcte. Bien sur, cette technique sera plus facile à réaliser plus la taille N du système sera petite.

Considérons donc un breather simple dans notre chaîne de KG avec $N = 20$ oscillateurs et potentiel de Morse. Continuons-le depuis la limite anti-continue en augmentant le couplage, à fréquence fixée $0.5 < \omega_b < 1$, par exemple $\omega_b = 0.6$, selon le chemin A-B-C de Fig. 2.1 (a). Dans la section précédente 2.1.1.1, nous avons effectué l'étude de la formation d'un phonobreather le long du même chemin. En utilisant des petits pas dans la routine de continuation de Newton, nous avons calculé que le breather simple [...00000010000...] devient, dès l'entrée dans la bande à $C_K \approx 0.11$, un phonobreather de code [...2 - 22 - 21 - 22 - 22...] dont le code nous avons calculé à la limite anti-continue à $\omega_b < 0.5$.

Effectuons maintenant la même continuation mais avec des pas dC assez grands ($dC \sim 10^{-2}$). De cette façon, comme montré en Fig. 2.11, nous arrivons à calculer, pour des valeurs de C_K supérieures à la limite de bande $Q = \pi$ et donc à l'intérieur du spectre des phonons, des solutions exactes qui apparaissent comme les breathers simples qui existent à l'extérieur de la bande. Par contre, l'existence de ces solutions calculées est limitée aux intervalles entre les bandes discrètes, et dépend donc de façon cruciale de la taille finie et petite du système. Elles sont sûrement liées aux solutions “breathers simples” au dehors de la bande, mais elles ne sont pas leurs exacte continuation, d'où, comme déjà annoncé, le nom *fantôme*.

Nous allons maintenant étudier plus en détail les propriétés et le comportement de ces solutions.

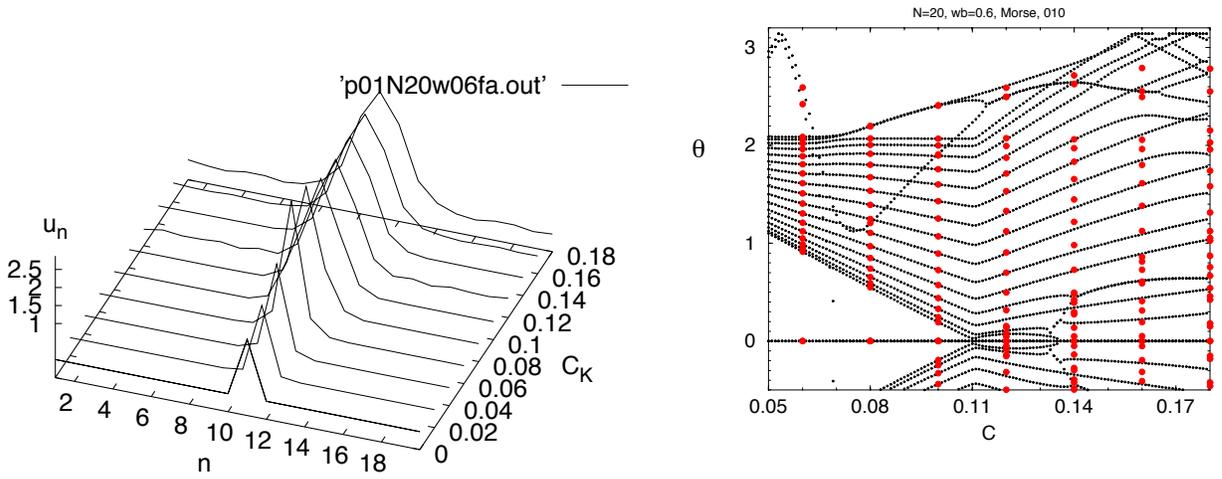


FIG. 2.11 – Amplitudes (a) et angles des multiplicateurs de Floquet (points en rouge en (b)), pour la pénétration de la deuxième harmonique dans la bande des phonons en augmentant C_K à $\omega_b = 0.6$ fixée, avec des grands pas $dC \sim 0.01$ dans la routine de Newton. La courbe noire en (b) représente les angles des multiplicateurs de Floquet pour la continuation précise avec $dC \leq 10^{-3}$ qui conduit à la formation du phonobreather par résonance avec le phonon $Q = \pi$.

2.1.3.2 La transition breather fantôme-phonobreather

Effectuons maintenant une continuation précise avec des petits pas numériques ($dC \leq 10^{-3}$ et à $\omega_b = 0.6$ fixé) depuis une des ces solutions exactes de Fig. 2.11 (a). En Fig. 2.12 (a) et (b) nous montrons respectivement leur amplitude et, avec la courbe rouge, les angles des valeurs propres. Nous pouvons observer qu’il existe un intervalle en couplage ($0.122 \lesssim C_K \lesssim 0.14$) où la solution peut réellement être assimilée à un breather, avec un oscillateur, occupant le site du breather, qui a une grande amplitude sur le reste de la chaîne, et les queues qui décroissent vers zéro. C’est cette solution que nous appelons *breather fantôme*.

En augmentant par continuation le couplage, un scénario tout à fait similaire à celui de Fig. 2.8 pour le breather simple se présente. En effet, à une certaine valeur ($C_K \approx 0.14$) d’évidentes oscillations apparaissent sur les queues du breather (Fig. 2.12 (a)). En correspondance, un couple de valeurs propres se rapproche à $+1$ sur le cercle unitaire (Fig. 2.12 (b)) sans que la collision ne se réalise, selon le même comportement de “collision évitée” déjà rencontré. Cela signale une résonance entre le breather fantôme et un phonon de la deuxième harmonique, qui correspond à la formation du phonobreather. Cependant, cette fois, le phonon résonant n’est pas le phonon $Q = \pi$, puisqu’en effet, nous sommes déjà à

l'intérieur de la bande (à $C_k \approx 0.14 > \sqrt{\frac{(2\omega_b)^2 - 1}{4}} \cong 0.11$ pour $\omega_b = 0.6$). Nous pouvons considérer que cette première résonance correspond à la limite supérieure, en C_K , pour l'existence de ce breather fantôme, de la même façon que la limite de bande $Q = \pi$ constitue la limite supérieure d'existence pour le breather simple, si continué rigoureusement (c'est-à-dire par des petites pas en C_K) depuis la limite anti-continue.

Si nous continuons le phonobreather trouvé jusqu'à la limite anti-continue à $\omega_b < 0.5$, nous pouvons identifier le code et donc le vecteur d'onde du phonon résonante, qui est, dans ce cas $Q = 2/3\pi$. Nous avons vu que les oscillations des phonons se manifestent à partir de $C_K \approx 0.14$, tandis que, en réalité la résonance avec le phonon (linéaire) $Q = 2/3\pi$ est, pour $\omega_b = 0.6$, seulement à $C_K = \sqrt{\frac{(2\omega_b)^2 - 1}{4 \sin^2 Q/2}} \approx 0.1467$. Cela signifie que nous avons un phonobreather où en réalité ces phonons ne pourront pas encore exister. Ce paradoxe apparent est une conséquence de la taille finie du système.

Caractéristiques de la queue Considérons maintenant la queue de la solution. Si depuis l'état phonobreather (par exemple depuis le phonobreather [-202-202-22-2212-22-220-220] de Fig. 2.12 (a)) nous diminuons le couplage vers l'état breather, l'amplitude d'oscillation de la queue décroît continuellement jusqu'à ce qu'on retrouve le breather fantôme dont la queue a des oscillations tellement petites qu'on peut les assimiler à zéro sur l'échelle d'amplitude du site breather. Ce point de changement d'amplitude de la queue correspond, en figure 2.13, au changement de pente (à $C_K \approx 0.142$) entre la courbe inclinée du phonobreather (labellée '-202-202-22-2212-22-220-220') et la courbe qui est presque plat pour le breather fantôme (courbe labellée 'fantôme 2', avec une légère inclination). Mais, en diminuant encore plus C_K et en observant encore de plus près la queue (Fig. 2.12 (c)), depuis la queue presque nulle du breather fantôme de nouvelles oscillations deviennent grandes et donc visibles par rapport au site breather. Cela est signe de l'interférence, et donc de la résonance, du breather fantôme avec le phonon précédant et limitrophe (et de la même symétrie), et indique le commencement d'une nouvelle transition breather fantôme-phonobreather. En effet, comme montré en Fig. 2.13, en diminuant encore le couplage le breather fantôme (courbe rouge labellée "fantôme 2" dans la figure), bifurque avec le phonobreather de code [+2-2+20-2+2-2+2-2+2+1+2-2+2-2+2-20+2-2]. Le phonon sur lequel est construit ce phonobreather est exactement le déphasé de π (c'est-à-dire avec tous les codes changés de signe $\pm 2 \rightarrow \mp 2$) par rapport au phonobreather qui se forme par la résonance du 'fantôme 1' qui rentre dans la bande en augmentant ω_b (le phonobreather du code [-2+2-20+2-2+2-2+2-2+1-2+2-2+2-2+20-2+2], courbe bleue claire en figure). Nous pouvons considérer que cette bifurcation constitue la limite inférieure d'existence pour ce breather fantôme.

Un scénario équivalent se manifeste pour le fantôme précédant, c'est-à-dire pour celui

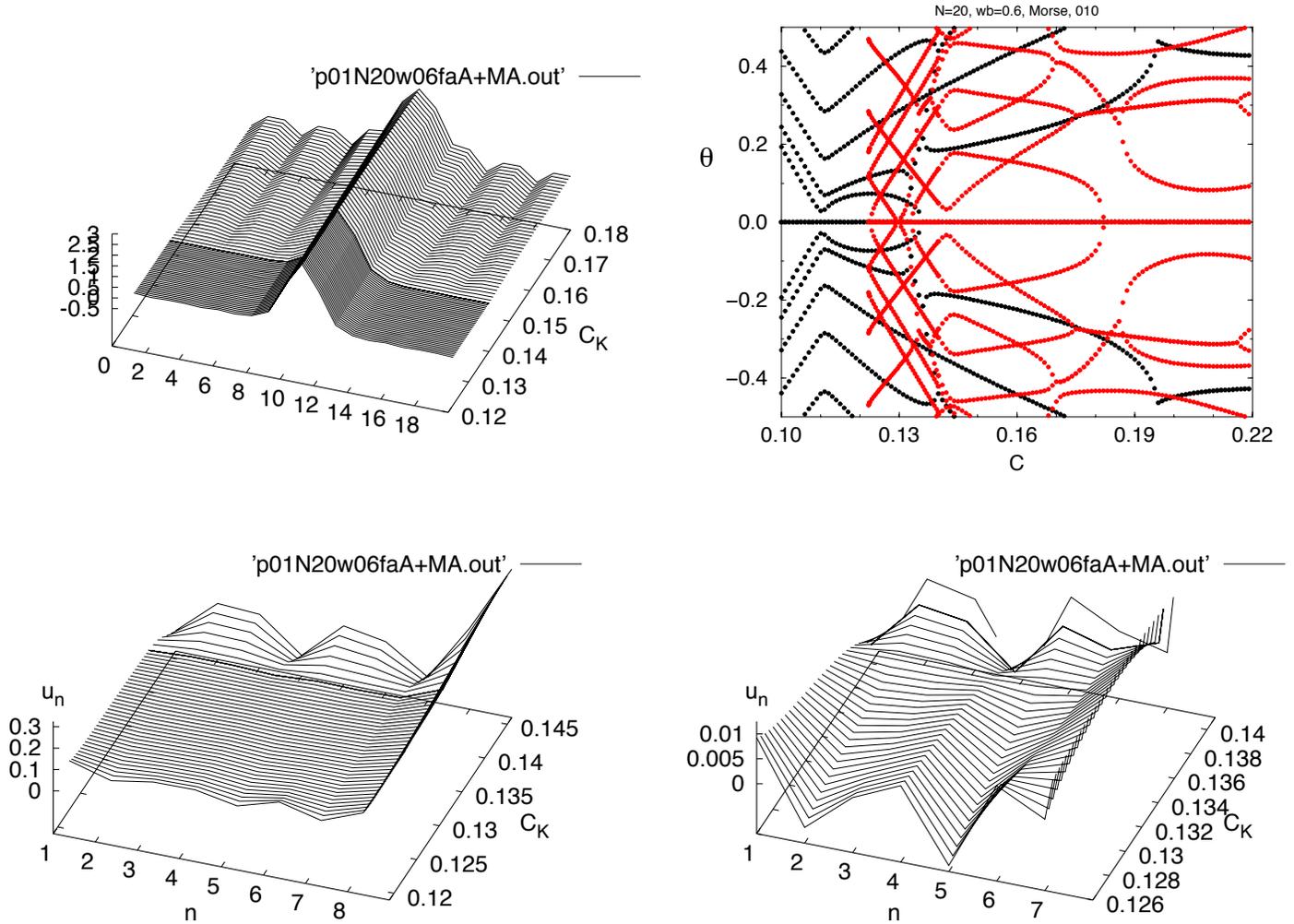


FIG. 2.12 – Formation du phonobreather de code $[-202-202-22-2212-22-220-220]$ par augmentation du couplage à $\omega_b = 0.6$ depuis un breather fantôme dans un système de KG de $N = 20$ oscillateurs avec potentiel de Morse. En (a) les amplitudes montrent l'apparition des phonons à $C_K \approx 0.14$, au même point où les valeurs propres (courbe rouge en (b)) présentent le comportement de collision évitée. La courbe noir en (b) represent les angles des valeurs propres pour la transition breather simple-phonobreather avec $Q = \pi$, pour la même $\omega_b = 0.6$. En (c) et (d) agrandissement ulterieur de la queue sur l'intervall d'existence du breather fantôme. On observe à petit C_K le début de nouvelles oscillations. La solution bifurquera avec le phonobreather de code $[+2-2+20-2+2-2+2-2+2+1+2-2+2-2+2-20+2-2]$ (voir explication dans la suite). En (d) on observe le graduelle passage entre les queues des deux phonobreaters correspondantes aux résonances bu breather fantôme.

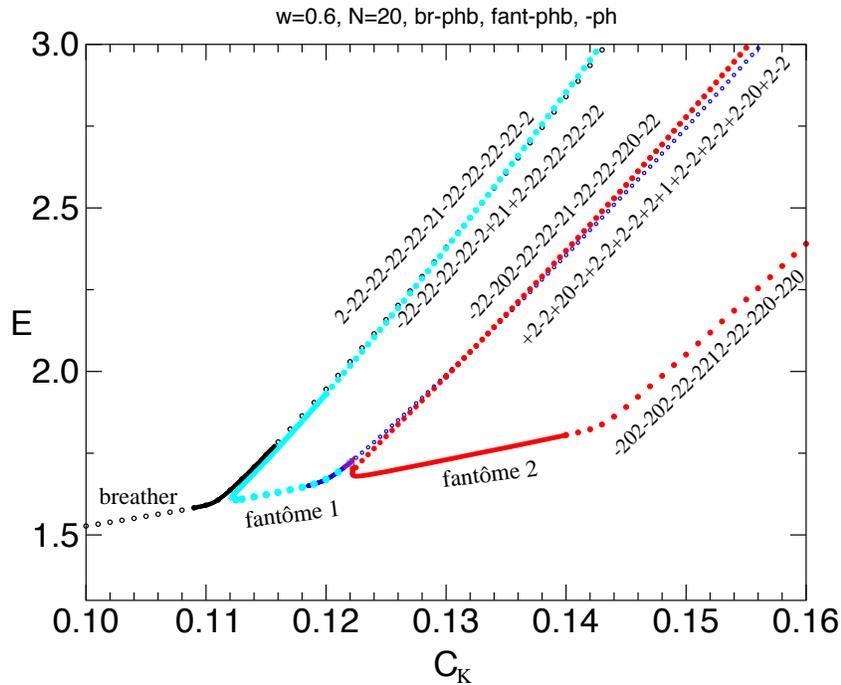


FIG. 2.13 – Energie totale en fonction du couplage pour la pénétration en bande de la deuxième harmonique d'un breather (à $\omega_b = 0.6$ fixé) dans une chaîne de KG de $N = 20$ oscillateurs. La courbe noir (à gauche) représente le breather simple, qui par résonance avec le phonon $Q = \pi$ (à $C_K \approx 0.11$) forme le phonobreather $[+2-2+2-2+2-2+2-2+2-2+1-2+2-2+2-2+2-2+2-2]$. En sautant cette résonance, nous retrouvons le breather fantôme (courbe bleue claire), qui en augmentant le couplage pour résonance avec le phonon $Q = 4/5\pi$ (à $C_K \approx 0.14$) devient le phonobreather $[-2+2-20+2-2+2-2+2-2+1-2+2-2+2-2+20-2+2]$. Il est l'opposé, à l'exception de code $+1$, du celui crée précédemment avec $Q = \pi$. De façon similaire, si on saute la deuxième résonance on retrouve un breather fantôme (courbe rouge labellée 'fanrôme 2') qui résonne avec $Q = 2/3\pi$ (à $C_K \approx 0.14$) en formant le phonobreather $[-20+2-20+2-2+2-2+2+1+2-2+2-2+20-2+0]$.

labellé ‘fantôme 1’ en Fig. 2.13 .

Il est importante de remarquer que deux phonobreathers qui ont tous les signes opposés except le site +1 du breather (comme les solutions qui nous avons calculées [+2-2+20-2+2-2+2-2+2+1+2-2+2-2+2-20+2-2] et [-2+2-20+2-2+2-2+2-2+1-2+2-2+2-2+20-2+2], qui constituent avec le breather fantôme un point de bifurcation, sont deux solutions distinctes. Ce cas est différent de celui de deux phonobreathers ayant le même code mais seulement le code +1 changé en -1, comme [+2-2+20-2+2-2+2-2+2+1+2-2+2-2+2-20+2-2] et [+2-2+20-2+2-2+2-2+2-1+2-2+2-2+2-20+2-2], puisque ceux-ci sont en effet la même solution, une obtenue de l’autre par simple translation de moitié période $T_b/2$.

Evidemment, le même comportement doit se présenter si nous pénétrons dans la bande par des grands pas $d\omega_b$ en diminuant la fréquence (selon le chemin A-B-D-E de Fig. 2.1 (a)).

En Fig. 2.14 et ??, nous présentons par exemple, le cas de la formation du phonobreather de code [-22 - 202 - 22 - 22 - 21 - 22 - 22 - 220 - 22] que nous avons calculé aussi en augmentant le couplage. Comme nous avons vu, en entrant dans la bande par diminution de la fréquence, il est le phonobreather créé depuis le premier fantôme qui résonne avec le phonon $Q = 4/5\pi$. Il est donc le deuxième phonobreather que nous observons avec cette taille du système. En diminuant ω_b , autour du point de résonance avec le phonon linéaire (à $\omega_b \approx 0.5677681$) les oscillations des phonons augmentent depuis leur valeur presque nulle de la queue du breather fantôme (Fig. 2.14 (a) et (c)) et on a la formation du phonobreather. Par contre, si depuis le breather fantôme on augmente la fréquence avec une continuation minutieuse cette solution bifurque (à $\omega_b \approx 0.57246755$) avec le phonobreather de code [-22 - 22 - 22 - 22 - 2212 - 22 - 22 - 22 - 22]. Ce dernier a tous les codes ± 2 de signe opposé au phonobreather créé à la résonance précédente (courbe rouge en Fig. ?? (a) et (b)), c’est-à-dire simplement le phonobreather sur le phonon $Q = \pi$, que nous avons déjà calculé être le [2 - 22 - 22 - 22 - 22 - 21 - 22 - 22 - 22 - 22 - 2]. Cela confirme notre théorie et nos calculs précédentes.

En Fig. 2.12 (b) nous observons aussi des collisions à +1 autour de $C_K \approx 0.128$. Elles correspondent à la résonance du breather fantôme avec un phonon de différente symétrie, qui mènent à la formation d’un phonobreather anti-symétrique par rapport au breather (du type [...+2-2+1+2-2...]). Cette solution n’est pas trouvée par notre continuation numérique, puisque nous opérons dans l’espace des solutions symétriques (comme le breather). Donc ces collisions produisent seulement des instabilités sans perturber la continuation de la solution. Cependant il est possible de calculer des phonobreathers anti-symétriques, en perturbant la solution près de ces instabilités.

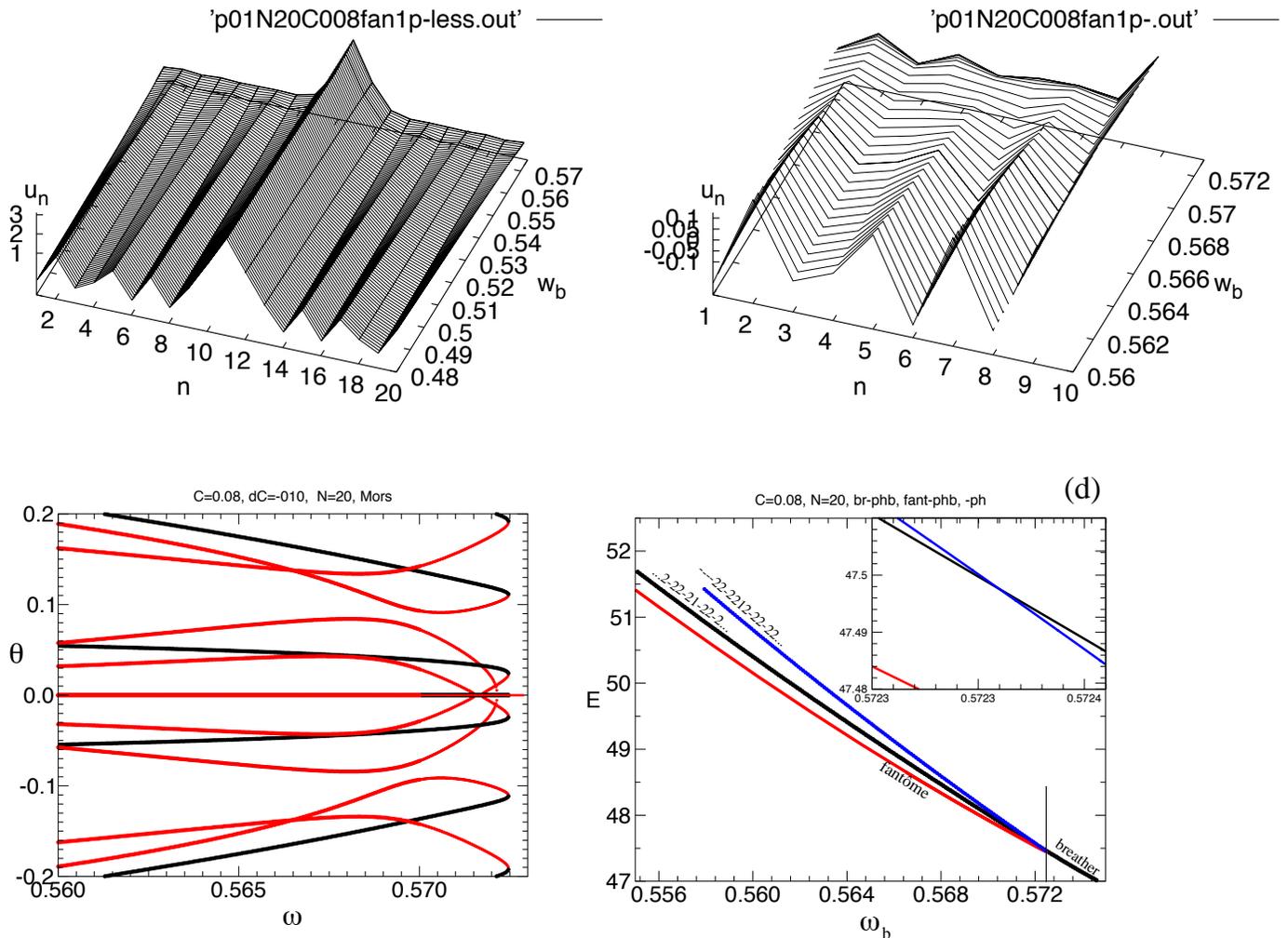


FIG. 2.14 – Le premier breather fantôme calculé dans la bande pour un système de KG de $N = 20$ oscillateurs à $C_K = 0.08$. En (a) les amplitudes de la formation du phonobreather $[-22 - 202 - 22 - 22 - 21 - 22 - 22 - 220 - 22]$ obtenue en diminuant ω_b par résonance avec $Q = 4/5\pi$ à $\omega_b \approx 0.5715$. En (b) agrandissement de la queue, montrant aussi les nouvelles oscillations lors de l'augmentation de ω_b . En (c) et (d) les arguments des valeurs propres et l'énergie, respectivement, en fonction de ω_b lors de la bifurcation à $\omega_b \approx 0.57247$. A ce point, le breather fantôme qui commence à devenir un nouveau phonobreather (courbe rouge) bifurque avec le phonobreather de code $[-2+2-2+2-2+2-2+2+1+2-2+2-2+2-2+2]$ (courbe noire). Ce phonobreather a tous les signes opposés, excepté le site $+1$ du breather, par rapport au phonobreather qui se forme par la résonance d'un breather avec $Q = \pi$ (à $\omega_b = \frac{1}{2}\sqrt{1+4C_K} \approx 0.57446$). Nous observons, en insert de (d) le croisement des deux courbes. Le scénario est donc similaire à celui de figure

Autres solutions de type phonobreather Nous avons expliqué comment, dans un système de taille finie, il est possible d'avoir des solutions breathers fantômes et comment elles peuvent effectuer des résonances avec les phonons limitrophes de la même symétrie et former des phonobreathers.

En tout cas, d'autres solutions similaires aux phonobreathers existent à l'intérieur de la bande. Ils ne sont pas des vrais phonobreathers dans le sens que leur queue n'a pas une bien définie valeur de vecteur Q . Ces solutions sont donc plus simplement des multibreathers.

Nous pouvons calculer ces solutions, soit à partir de la limite anti-continue à $w_b < 0.5$ et les continuer en suite vers la bande, soit en continuant le breather simple dans la bande mais avec des pas numériques grandes et casuelles de façon à trouver ces solutions, comme montré en figure 2.15. En effet, puisque leur queue n'est pas un vrai phonon leur continuation peut s'arrêter pour des bifurcations sans pouvoir traverser complètement la bande ni suivre le scénario étudié pour les phonobreathers.

Nous allons présenter en table 2.16 une brève énumération des codes des possibles solutions que l'on peut trouver lors de la pénétration par des grands pas numériques d'un breather simple dans la bande (voir Fig. 1.24).

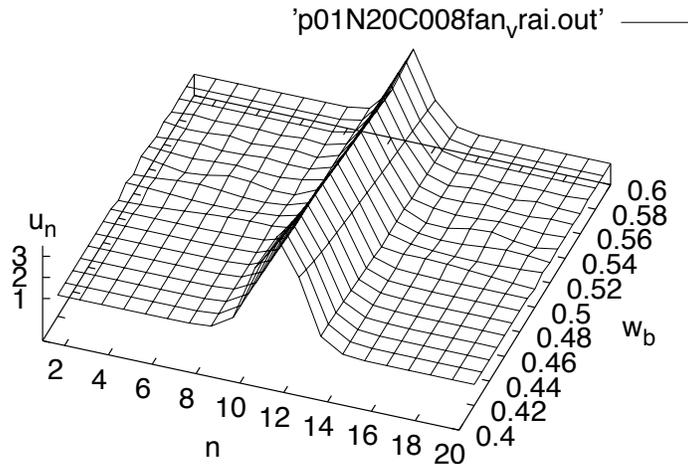


FIG. 2.15 – Solutions exactes, calculées à l'intérieur de la bande des phonons en continuant par des grands pas numériques un breather simple. On retrouve ces solutions en accordant de façon opportune la grandeur du pas $d\omega_b$ selon la position dans la bande respect au phonons à éviter. La nature de ces solutions (breather fantôme, déjà état phonobreather ou simplement généralement multibreather), est connu en continuant précisément la solution.

Q	code des solutions formées																			
π	2	-2	2	-2	2	-2	2	-2	2	-2	+1	-2	2	-2	2	-2	2	-2	2	-2
$4/5\pi$	-2	+2	-2	0	2	-2	2	-2	2	-2	+1	-2	2	-2	2	-2	2	0	2	-2
	2	-2	0	2	-2	2	-2	2	-2	2	+1	2	-2	2	-2	2	-2	-2	0	2
	-2	0	2	-2	0	2	-2	2	-2	2	+1	+2	-2	+2	-2	+2	0	-2	+2	0
$4/5\pi$	2	-2	0	2	-2	0	2	-2	2	-2	+1	-2	2	-2	2	0	-2	2	0	-2
	-2	0	2	-2	0	2	0	-2	2	-2	+1	-2	2	-2	0	2	0	-2	2	0
	0	0	0	0	0	0	0	0	2	-2	+1	-2	2	0	0	0	0	0	0	0

FIG. 2.16 – Sequence codant des quelq'une des solutions de type multibreather qui existent dans la bande des phonons. Celles dont la queue correspond a un phonon avec un precis vecteur Q sont des vrais phonobreaters (nous avons indiqué en tabelle la valeur du vecteur Q correspondante).

Résumé du scénario breathers fantômes-phonobreaters En Fig. 2.17 nous representons de façon schematique un résumé du scénario de bifurcation entre breathers fantômes et phonobreaters. En entrant dans la bande ($\omega_b < 0.5$) (avec des grand pas numériques), en correspondance des gaps entre les bandes discrettes des phonons, nous trouvons les breathers fantômes (courbes rouges en figure). En les continuant precisement ils effectuent des resonances avec les phonons limitrophes. Nous observons que chaque deux résonance, une bifurcation avec un phonon de symetrie opposé est rencontre (courbes vertes tiretées qui dorraient correspondre à des phonobreaters anti-symetriques). Puisque il n'exist pas de couplage, seulement des instabilités apparaissent, et aucun problem se manifest pour la continuation de la solution, qui poursuive jusqu'à la résonance suivante qu'aura la bonne symetrie. Donc les breathers fantômes à chaque résonance avec un phonon de même symétrie (nous pourrons dire à chaque résonance d'ordre impair, à partir de la première avec $Q = \pi$ qui concerne le breather original) forme le phonobreather correspondant (courbes noires labellées 'phonobreather'). Chaque phonobreather est continuable vers l'interieur de la bande vers grand couplage et grandes amplitudes (jusqu'à la divergence, étudié en Sec. 2.1.1.2). En diminuant le couplage, chaque breather fantôme bifurque avec le phonobreather dont le phonon est le dephasé de π par rapport au phonobreather qui se forme à cette resonance lorsque on pénètre vers la bande (courbes blues labellées '-phonobreather').

Conclusion sur la transition breather-phonobreather Nous avons présenté comme l'existence du breather fantôme est caractérisée par sa transition vers deux états phonobreather (l'un qui par continuation se développe vers l'intérieur de la bande, et l'autre qui

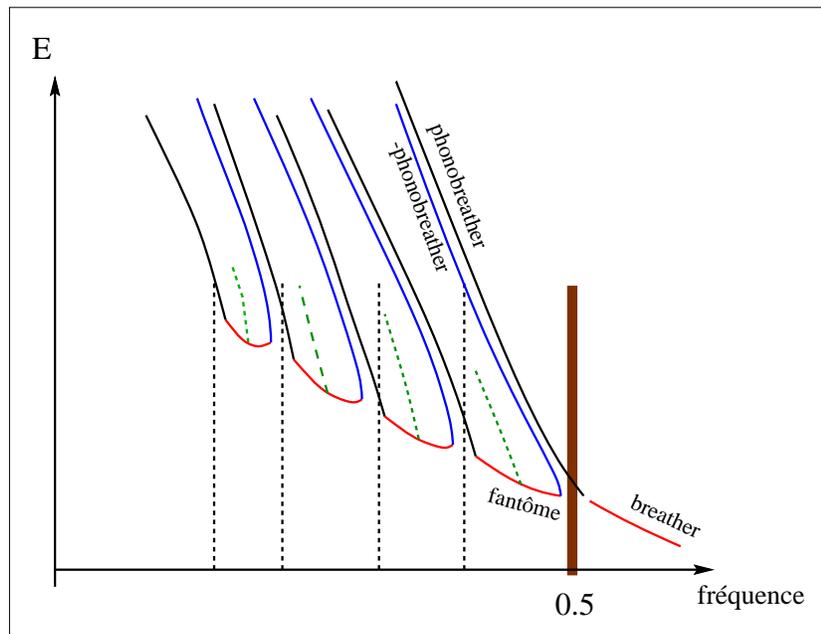


FIG. 2.17 – Représentation schématique réassurtive dans le plan (énergie, fréquence) du scénario des bifurcations entre breathers fantômes et phonobreaters. Les lignes tiretées verticales représentent les bandes des phonons. L'explication est présentée dans le paragraphe 2.1.3.2.

par continuation en sens opposé, s'arrête en bifurquant près du breather fantôme), suite à la résonance avec les phonons plus proches et de la même symétrie. Nous avons aussi vu que dans un système fini la formation des phonobreaters, qui s'effectue lors de la rentrée dans la bande, peut être interprétée comme étendue le long d'un certain interval bornée par les deux bifurcations (une évitée et l'autre effectuée). Ce fait dérive de la "déformation", causée par les effets de taille finie, de l'unique point de résonance avec le phonon présent dans un système infini. Depuis les figures obtenues pour la queue de la solution (Fig. 2.12 (d) et 2.14 (c)), à cause probablement de la taille petite du système, il est difficile de pouvoir clairement distinguer une solution breather fantôme pure avec la queue du breather qui décroît exponentiellement à zéro. En effet la solution apparaît toujours couplée (même si parfois de façon très faible) à un de deux phonons limitrophes avec lesquels les oscillations de sa queue sont mélangées. En effet, dans un système fini de petite taille comme celui que nous considérons et qui est indispensable pour l'existence même des solutions fantômes, il n'existe plus une différence nette entre solutions localisées (comme les breathers par définition) et étendues (comme les phonobreaters), puisque toutes les solutions sont localisées sur la taille du système. En plus, ces deux solutions ne sont pas qualitativement différentes : elles ont la même symétrie en espace comme en temps (donc elles ont la même période) et elles sont toutes les

deux localisées sur la taille du système. L'existence d'états mixtes breather-phonobreather dans la zone entre les deux résonances (évitée et effectuée) est donc imaginable.

Par contre la situation sera différente dans un système infini, où il y a une différence qualitative entre solutions étendues (les phonobreaters) et localisées (les breathers). Dans ce cas la transition entre les deux solutions devient une vraie bifurcation. En effet nous avons calculé, en Section 2.1.1.1, que l'intervalle créé par la collision évitée lors de la transition breather-phonobreather diminue avec l'augmentation de la taille N du système, et dans la limite de taille infinie, nous avons extrapolé qu'il sera nul.

2.2 Potentiel quartique

Considérons, dans le potentiel dur quartique, une solution breather simple, qui, depuis la Section 1.2.1, aura fréquence $\omega_b > \sqrt{1 + 4C_K}$. Notre intention est d'essayer de pénétrer dans la bande des phonons avec une des harmoniques de la solution. Comme montré en Fig. 2.18, en continuant la solution depuis la limite anti-continue la fréquence fondamentale entrera toujours en premier dans la bande.

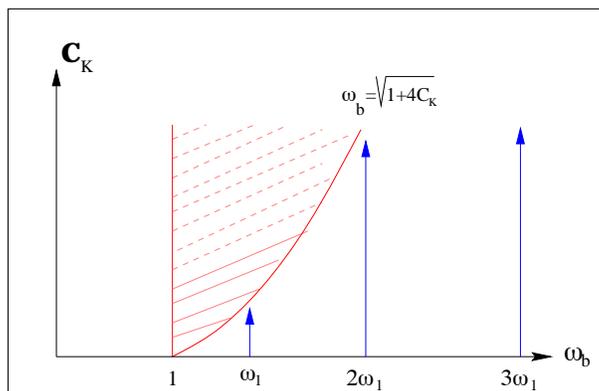


FIG. 2.18 – Représentation schématisée dans le plan (ω_b, C_K) de la bande des phonons linéaires et des harmoniques de la fréquence fondamentale ω_1 d'une solution breather dans un potentiel dur quartique. (Le dessin n'est pas en échelle par rapport à la grandeur de $\omega_1, 2\omega_1, 3\omega_1$).

Construisons donc, à la limite anti-continue (et à $\omega_b = 1.2$) un breather simple dans une chaîne de KG de $N = 21$ oscillateurs. En augmentant C_K , lorsque l'harmonique fondamentale du breather rencontre la bande des phonons (à $C_K = \frac{\omega_b^2 - 1}{4} = 0.11$ pour $\omega_b = 1.2$), le breather effectuera une résonance avec le phonon de bord de bande $Q = \pi$ et immédiatement rejoindra sa limite linéaire d'amplitude nulle, comme montré en Fig. 2.19.

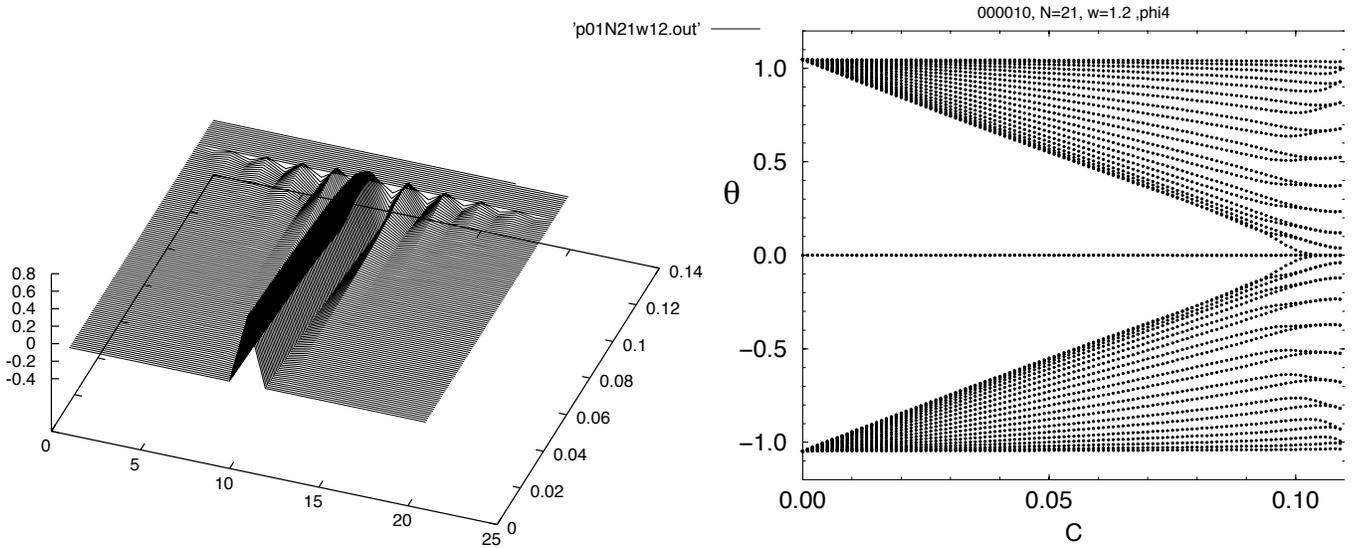


FIG. 2.19 – Amplitudes (a) et arguments de valeurs propres (b) du breather simple dans un potentiel dur quartique, lors de la continuation à $\omega_b = 1.2$ fixé. A $C_K = \frac{\omega_b^2 - 1}{4} = 0.11$ il résonne avec le phonon $Q = \pi$ (bord de bande) et il devient d'amplitude nulle.

Pour un potentiel quartique il n'est donc pas possible de pouvoir continuer une solution breather simple dans la bande des phonons puisque la solution devient identiquement nulle au bord de bande.

Un scénario complètement différent doit se présenter dans le cas de potentiel mou, puisque le breather à la limite anti-continue existe seulement au-dessous de la bande des phonons ($\omega_b < 1$ à la limite anti-continue), et ses harmoniques peuvent être évidemment au-dessus de la bande. Il est donc possible de pénétrer dans la bande non seulement avec la fréquence fondamentale comme pour le potentiel quartique, mais aussi avec les harmoniques supérieures. Nous étudierons le cas du potentiel mou de Morse tout le long de ce chapitre.

2.2.1 Construction des phonobreather

ous allons montrer comment il est possible obtenir des phonobreathers dans un potentiel quartique. Puisque nous avons montré que on ne peut pas obtenir un phonobreather par continuation d'un breather essayons d'effectuer le contraire.

Depuis la limite anti-continue, et à $\omega_b > 1$, construisons donc un phonobreather de code 111121111. Augmentons le couplage et, en diminuant la fréquence à C_K fixé, pénétrons dans la bande. Nous observons que en sortant de la bande en croisant $\omega_b = 1$ les phonons sont perdus et nous obtenons un breather simple de code, contrôlé à la limite anti-continue à

$\omega_b < 1$ est 00000200000.

Si maintenant

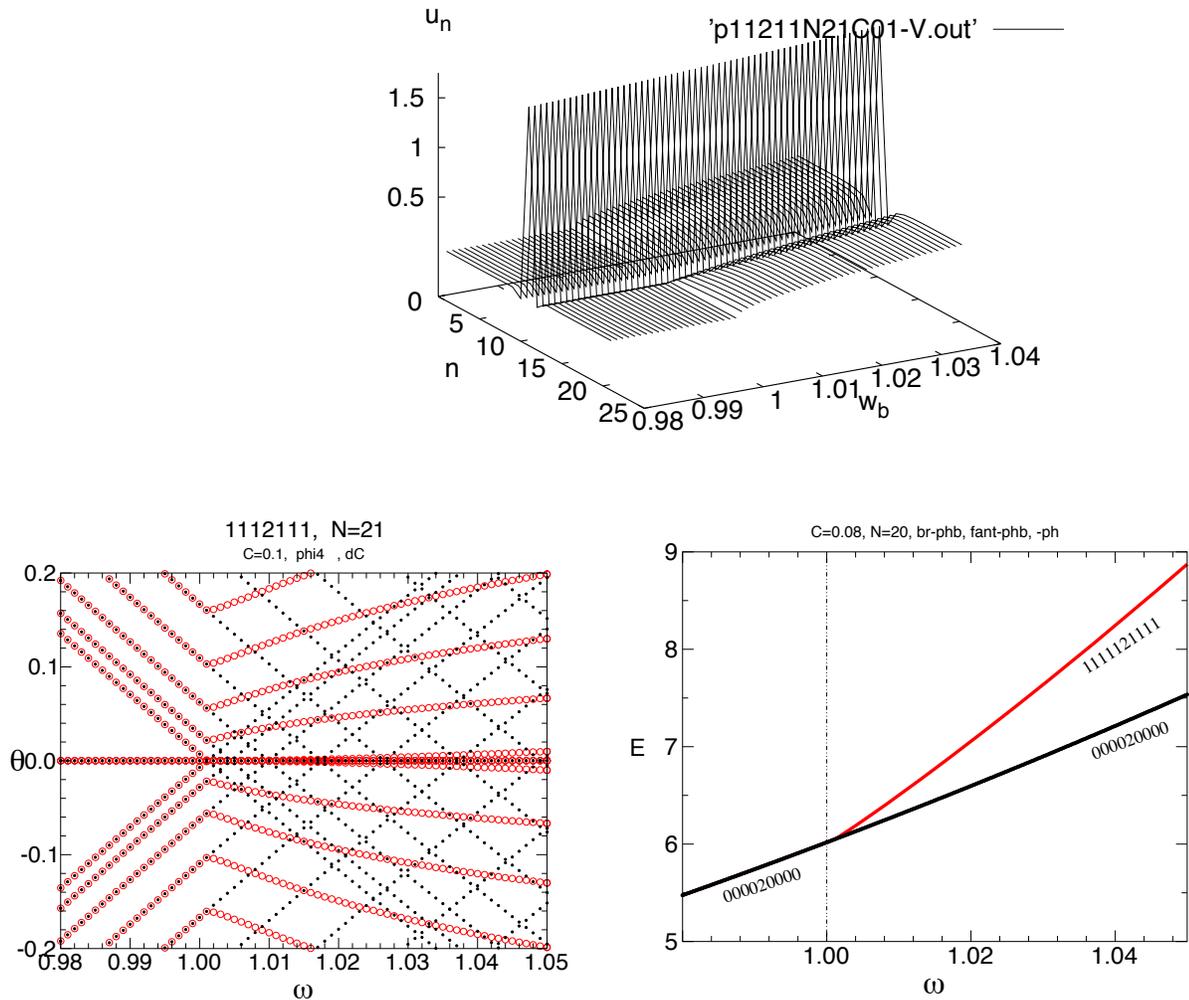


FIG. 2.20 – .

2.3 Cas des solutions multi-breathers

Dans ce chapitre nous avons effectué l'étude de la pénétration dans la bande des phonons d'une solution breather simple, et nous avons calculé des solutions fantômes et phonobreathers. En effet, il n'y a pas une raison particulière pour restreindre cette étude à les seules solutions breather simple. Il est assez naturelle de penser de appliquer cette théorie en générale à un multibreather, pour analyser son comportement dans la bande.

Cette étude sera l'objet de la partie (??), relative à la continuation à grande amplitudes

des ondes stationnaires. En effet, dans le chapitre (II) nous verrons que les ondes stationnaires ne sont rien d'autre que des solutions multi-breathers. Nous pourrions donc les étudier en utilisant les mêmes techniques appliquées maintenant pour les solutions breathers.

Deuxième partie

Ondes stationnaires

Chapitre 3

Description des ondes stationnaires

Après l'étude des solutions breathers, multibreathers et phonobreathers dans les premières chapitres, nous allons maintenant considerer des autres solutions qui nous pouvons trouver dans les systèmes non-linéaires et discretés, c'est-à-dire les ondes stationnaires. En effet nous montrerons que la relations entre breathers et ondes stationnaires est très étroite, puisque ces derniers peuvent être interpretées come des multibreathers. Nous utiliserons donc la théorie et les méthodes des breathers pour les étudier.

Les ondes stationnaires à la limite linéaire sont la superposition de deux ondes propagatives avec la même amplitude mais vecteur d'onde opposé (Fig. 1.24), et qui ont donc la forme $u(x, t) \sim \cos(Qx)\cos(\omega t)$. Nous effectuerons l'étude des ondes stationnaires dans un

FIG. 3.1 – Representation d'une onde stationnaire .

systeme discrete de KG (voir chapitre ??) et dans un systeme de Schödinger non-lineaire et discrete (DNLS). En effet entre ces deux modeles il existe un lien tres fort car, dans la limite de petites amplitudes et petites couplages le modèle de KG peut être approximé par le modele DNLS. Nous allons expliquer dans la prochaine section cette relation, qui nous utiliserons dans la suite de notre étude des ondes stationnaires . Nous montrerons aussi qu'il existe une relation qui permet de derivier KG depuis DNLS, aussi si elle ne sera pas utilise ensuite.

3.1 Approximation de Schrödinger discrète non-linéaire

Considerons maintenant une chaîne d'oscillateurs dans un modèle de KG, comme nous l'avons introduit au paragraphe (1.1.2), avec Hamiltonian H (1.2), équation de mouvement (1.3), et équations de Hill (1.4).

Nous allons montrer qu'il est possible de decrire la dynamique d'un chaine de KG avec petit couplage C_K entre les oscillateurs, par une approximation qui conduit au modèle de DNLS. Une type de approximation similaire a été proposée dans des études précédantes, [6, 7, 8]. Cependante, la méthode qui nous utilisons dans cette étude a la particularité de presenter de façon disctinct les differentes étapes de l'approximation. passages émais la methode que nous utilison dans cette thèse est un peu different et donne aussi une profonde comprehension des differentes limits utilisés.

Considerons pour le system de KG non-linéaire de KG 1.3) des solutions de petite amplitude pour le system de KG non-linéaire (1.3). Les terms anharmoniques sont donc petits et le potentiel de site $V(u)$ peut être développé à l'ordre plus bas significatif comme

$$V(u) = \frac{1}{2}u^2 + \alpha\frac{1}{3}u^3 + \beta\frac{1}{4}u^4 + \dots \quad (3.1)$$

Par exemple, dans le cas du potentiel de Morse, on aura $\alpha = -\frac{3}{2}$ et $\beta = 1$, tandis que pour le potentiel quartic $\alpha = 0$ et $\beta = 1$.

Entre ces solutions nous considererons celles qui satisfont des precises condirions. Elles doivent être localement proches des phonons linéaires (1.5) avec vecteur d'onde Q et amplitude ϵ . En plus nous assumons que elles soient périodique en temps avec période $T_b = \frac{2\pi}{\omega_b}$, où ω_b est proche de la fréquence $\omega_l(Q)$ d'un phonon de vecteur Q . Une telle solution $u_n(t)$ peut donc être expanse expandre en serie de Fourier :

$$u_n(t) = \sum_p a_n^{(p)} \epsilon^{ip\omega_b t}, \quad (3.2)$$

où les coefficients complex satisfont $a_n^{(p)} = a_n^{(-p)*}$. Si la solution est invariante par reinversement du temps les coefficients $a_n^{(p)}$ sont réels. Nous demandons, en plus, que la série de Fourier soit sommable comme une fonction analytic du t . Les coefficients $a_n^{(p)}$ doivent donc decroitre asyntotiquemen de façon exponentielle avec p , pour chaque valeur de n .

En général, car pour la solution linéaire le membre de gauche de l'Eq. 1.3 n'est pas exactement zéro mais d'ordre ϵ^2 , la solution perturbée conterra des harmoniques dependantes du temps plus des corrections d'ordre ϵ^2 . En consequence, comme effectué en Refs. [6, 8], nous cherchons des solutions de petite amplitude (mais pas necessairement périodiques en temps) comme des series de la forme (3.2) mais où les coefficients de Fourier dependent linéairement du temps comme des fonctions de $\epsilon^2 t$.

Donc, dans la série de Fourier (3.2), les terms $a_n^{(1)*} = a_n^{(-1)}$ sont les terms dominants d'ordre ϵ , $a_n^{(0)}$ et $a_n^{(2)*} = a_n^{(-2)}$ sont plus petits et d'ordre ϵ^2 . Pour les autres terms, car les composants de Fourier doivent decroitre exponentiellement il est naturelle de considerer que $a_n^{(3)*} = a_n^{(-3)}$ soient d'ordre ϵ^3 , $a_n^{(4)*} = a_n^{(-4)}$ d'ordre ϵ^4 , etc.

Nous allons donc résoudre l'Eq. 1.3 à l'ordre ϵ^3 qui est l'ordre le plus bas auquel les harmonicités du potentiel local $V(u)$ sont prises en compte. Pour chaque harmonique nous trouvons donc, avec la définition $\omega_b^2 - 1 \equiv 2\delta$:

$$a_n^{(0)} + 2\alpha|a_n^{(1)}|^2 - C_K(a_{n+1}^{(0)} + a_{n-1}^{(0)} - 2a_n^{(0)}) = 0 \quad (3.3)$$

$$2i\omega_b \dot{a}_n^{(1)} - 2\delta a_n^{(1)} + 2\alpha(a_n^{(1)} a_n^{(0)} + a_n^{(1)*} a_n^{(2)}) + 3\beta|a_n^{(1)}|^2 a_n^{(1)} - C_K(a_{n+1}^{(1)} + a_{n-1}^{(1)} - 2a_n^{(1)}) = 0 \quad (3.4)$$

$$(1 - 4\omega_b^2)a_n^{(2)} + \alpha a_n^{(1)2} - C_K(a_{n+1}^{(2)} + a_{n-1}^{(2)} - 2a_n^{(2)}) = 0 \quad (3.5)$$

$$(1 - 9\omega_b^2)a_n^{(3)} + 2\alpha a_n^{(1)} a_n^{(2)} + \beta a_n^{(1)3} - C_K(a_{n+1}^{(3)} + a_{n-1}^{(3)} - 2a_n^{(3)}) = 0. \quad (3.6)$$

Le terme $a_n^{(0)}$ peut être obtenu de façon explicite depuis l'Eq. 3.3 qui donne

$$a_n^{(0)} = A \sum_m \eta^{|n-m|} |a_m^{(1)}|^2 \quad \text{avec} \quad (3.7)$$

$$\eta = 1 - \frac{1}{2C_K}(\sqrt{1 + 4C_K} - 1) \quad \text{et} \quad A = -\frac{2\alpha}{\sqrt{1 + 4C_K}}. \quad (3.8)$$

De façon similaire $a_n^{(2)}$ peut être obtenu explicitement depuis l'Eq. (3.5), mais seulement si $2\omega_b > \sqrt{1 + 4C_K} = \omega_l(\pi)$. Cela signifie que la deuxième harmonique de la solution n'appartient pas à la bande linéaire des phonons. Dans ce cas nous avons donc :

$$a_n^{(2)} = A' \sum_m \eta'^{|n-m|} |a_m^{(1)}|^2 \quad \text{avec} \quad (3.9)$$

$$\eta' = -1 + \frac{4\omega_b^2 - 1 - 4C_K}{2C_K} \left(\sqrt{1 + \frac{4C_K}{4\omega_b^2 - 1 - 4C_K}} - 1 \right) \quad \text{et} \\ A' = \frac{\alpha}{\sqrt{(4\omega_b^2 - 1 - 4C_K)(4\omega_b^2 - 1)}}. \quad (3.10)$$

Si nous substituons les Eqs. (3.7) et (3.9), qui contiennent une infinité de termes, dans l'Eq. (3.4), nous obtenons une équation DNLS généralisée. Elle est caractérisée par l'évolution lente dans le temps, des coefficients de Fourier dominants $a_n^{(1)}$. Les non-linéarités sont considérées à l'ordre dominant dans l'amplitude ϵ . Dans le cas où la condition $2\omega_b > \sqrt{1 + 4C_K}$ n'est pas vérifiée, on a que $|\eta'| = 1$, puisque (η') est complexe et sur le cercle unitaire, et donc la somme (3.9) qui définit le terme d'interaction, en générale diverge. Donc, pour un potentiel générale avec α non nul (donc pas pour le potentiel quartique), cette condition impose une limite de validité supérieure pour le couplage C_K pour cette approche. (dans la limite linéaire nous avons $\omega_b = \omega_l(Q)$ et la condition est satisfaite pour tous les Q seulement quand $C_K < 3/4$.)

Dans le cas particulier où $\alpha = 0$ (par exemple dans le potentiel quartique), le couplage avec les harmoniques d'ordre supérieure se réalise seulement à l'ordre ϵ^5 et supérieure (en

particulier dans le cas du potentiel quartique il y a couplage seulement entre les harmoniques impaires, comme nous verrons dans la Sec. 1.24). Donc, si nous considérons le développement jusqu'à l'ordre ϵ^3 , les termes d'interaction à longue portée ne sont pas présentes dans l'Eq. (3.4), qui se réduit immédiatement à l'équation ordinaire de DNLS avec seulement interaction à courte portée (l'Eq. (3.11) en bas).

Considérons maintenant, pour un potentiel général, le cas de petit C_K , c'est-à-dire près de la limite anti-continue $C_K = 0$. Donc, $\omega_b^2 - 1 = 2\delta$ sera petite et de l'ordre de C_K , $\eta = C_K + \mathcal{O}(C_K^2)$, et $\eta' = -\frac{C_K}{4\omega_b^2 - 1} + \mathcal{O}(C_K^2)$. Si nous considérons l'équation DNLS généralisée (3.4) à l'ordre C_K et nous négligeons les termes d'ordre $\epsilon^3 C_K$, les termes à longue portée disparaissent et l'équation 3.11 se réduit à l'équation DNLS standard, qui bien décrit la dynamique des oscillations de petite amplitude pour une chaîne de KG près de la limite anti-continue :

$$i\dot{\psi}_n = \delta\psi_n - \sigma|\psi_n|^2\psi_n + C(\psi_{n+1} + \psi_{n-1} - 2\psi_n), \quad (3.11)$$

où $\psi_n = \sqrt{|\lambda|}a_n^{(1)}$, $\lambda = -5\alpha^2/3 + 3\beta/2$, $\sigma = \text{sign}(\lambda)$ et $C = C_K/2$.

Si nous substituons les valeurs correspondantes des paramètres α et β , nous obtenons que pour un potentiel mou $\lambda < 0$ et donc $\sigma = -1$, tandis que pour un potentiel dur $\lambda > 0$ et $\sigma = 1$. En réalité les deux cas $\sigma = \pm 1$ sont formellement équivalents à cette ordre de l'expansion, car, en changeant ψ_n avec $(-1)^n\psi_n^*$ nous obtenons une nouvelle équation pour $\{\psi_n\}$ qui a la même forme de l'Eq. (3.11), mais avec δ substitué par $(4C - \delta)$, σ par $-\sigma$ et C inchangée. Donc, quand nous sommes dans le cas de l'approximation DNLS, nous pouvons considérer pour convenance $\sigma = -1$, qui correspond à un potentiel mou, tout en gardant la généralité du cas.

3.2 Ondes stationnaires représentées comme trajectoires

Nous verrons dans ce paragraphe comment, en utilisant les concepts des systèmes dynamiques, il est possible de représenter les ondes stationnaires comme des trajectoires d'une application symplectique.

3.2.1 L'application symplectique

Dans le modèle de KG (??) nous pouvons considérer l'onde stationnaire comme des solutions $\{u_n(t)\}$ périodiques dans le temps, invariantes par renversement du temps et avec fréquence ω_b , comme dans l'Eq. (3.2). En utilisant le développement (1.24) nous pouvons développer en série de Fourier aussi la dérivée du potentiel, qui est une fonction périodique du

temps, comme

$$V'(u(t)) = \sum_p w^{(p)} \epsilon^{ip\omega_b t} \quad (3.12)$$

Les coefficients $w^{(p)}$ sont des fonctions non-linéaires $\{w^{(p)}(\{a^{(q)}\})\}$ des coefficients de Fourier $\{a^{(q)}\}$ de $u(t)$. Donc, nous pouvons réécrire l'Eq. (??) comme

$$-p^2 \omega_b^2 a_n^{(p)} + w^{(p)}(\{a_n^{(q)}\}) - C_K(a_{n+1}^{(p)} + a_{n-1}^{(p)} - 2a_n^{(p)}) = 0. \quad (3.13)$$

Cette équation définit une application symplectique

$$(\{a_{n+1}^{(p)}\}, \{a_n^{(p)}\}) = \tilde{\mathcal{S}}(\{a_n^{(p)}\}, \{a_{n-1}^{(p)}\}), \quad (3.14)$$

où les ondes stationnaires seront les trajectoires bornées. En effet, puisque l'opérateur $\tilde{\mathcal{S}}$ agit sur un espace de dimension infinie, son étude est assez difficile. Les nombreux théorèmes sur les applications symplectiques qui existent pour des systèmes de taille finie, ne peuvent pas être appliqués aux systèmes finis. Il est donc convenable de réduire la dimension de l'espace sur lequel cette map agit. Cela peut être effectué en utilisant, pour éliminer tous les coefficients $a_n^{(p)}$ avec $p \neq 1$, l'approximation DNLS que nous avons dérivé dans la Section et qui est généralement valable dans la limite des solutions de petite amplitude et de petite couplage entre les sites. Les ondes stationnaires sont des solutions périodiques dans le temps, et donc tous les amplitudes $a_n^{(p)}$ de l'expansion de Fourier (3.2), et de conséquence tous les ψ_n , sont indépendantes du temps. En plus, si nous nous restreignons au cas des solutions (réversible dans le temps) = (indépendantes du renversement du temps, nous pouvons choisir réels tous les a_n et les ψ_n . Donc, car le membre de gauche de l'Eq. (3.11) s'annule, nous obtenons

$$\delta\psi_n - \sigma\psi_n^3 + C(\psi_{n+1} + \psi_{n-1} - 2\psi_n) = 0. \quad (3.15)$$

Cette équation définit une application nonlinéaire \mathcal{S} qui est symplectique et cubique dans le plan réel à deux dimensions. Elle détermine de façon récursive (ψ_{n+1}, ψ_n) à partir de (ψ_n, ψ_{n-1}) . Si nous effectuons le changement d'échelle $\psi_n \rightarrow \sqrt{C}\psi'_n$, cette application dépend seulement du paramètre $\delta' \equiv \delta/C$:

$$\psi'_{n+1} = (2 - \delta)\psi'_n + \sigma\psi_n'^3 - \psi'_{n-1}, \quad \psi'_n = \psi'_n. \quad (3.16)$$

Comme il est connu dans la théorie des systèmes dynamiques [?, ?, ?, ?], une application de ce type contient une grande variété d'orbites, entre lesquelles des points fixes elliptiques et hyperboliques, tores de KAM, sets de Aubry–Mather Cantor sets (cantori) [?, ?, ?] et orbites chaotiques (voir Fig. 3.2). On rappelle, en Annexe (??) les principales caractéristiques de ces trajectoires.

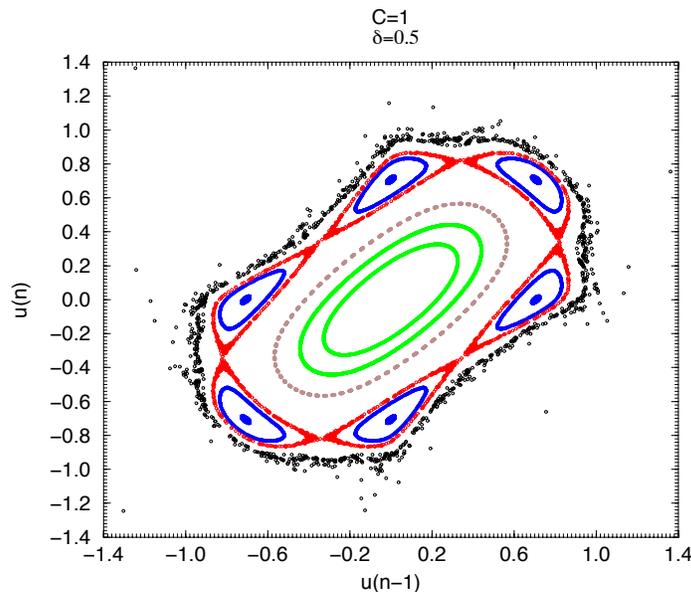


FIG. 3.2 – Orbites de l’application symplectique \mathcal{S} pour $\delta' = \frac{\delta}{C} = 0.5$ ($\sigma = -1$). On observe la séquence circulaire de points elliptiques (trajectoires rouges) et hyperboliques (trajectoires bleues), qui correspondent aux deux familles d’ondes stationnaires avec $\pi/3$.

3.2.1.1 Particuliers propriétés de l’application

Nous sommes intéressés aux ondes stationnaires non-linéaires qui sont continuables jusqu’aux ondes stationnaires linéaires. Dans l’application nous devons donc considérer seulement les trajectoires bornées qui, par continuation, rejoignent la limite de amplitude nulle en variant $\delta' = \frac{\delta}{C}$ rejoigne par continuation la limite d’amplitude nulle. Quand δ appartient à la bande des phonons, c’est-à-dire quand $0 \leq \delta \leq 4C$, la linéarisation de l’Eq. (3.15) a la solution $\psi_n = \epsilon_s \cos(Qn + \phi)$, où le vecteur d’onde Q satisfait

$$\delta = 4C \sin^2 Q/2 \equiv \delta_0(Q), \quad (3.17)$$

Cette équation est équivalent à la relation de dispersion de KG $\omega_b^2 = \omega_l^2(Q) = 1 + 4C_K \sin^2 \frac{Q}{2}$ (Eq. (??)). Donc, le point fixe trivial $F_0 = (0, 0)$ de l’application \mathcal{S} est linéairement stable, c’est-à-dire elliptique et avec angle de rotation Q . Cette solution correspond à une onde stationnaire linéaire et l’angle de rotation est simplement le vecteur d’onde Q de l’onde stationnaire. Quand $\delta > \delta_0(\pi) = 4C$ nous observons, en étudiant la stabilité de l’équation linéarisée de l’application (3.16), que le point fixe $F_0 = (0, 0)$ devient hyperbolique avec réflexion, tandis que il devient hyperbolique sans réflexion pour $\delta < \delta_0(0) = 0$.

Quand $\delta' = \frac{\delta}{C} \geq \frac{\delta_0(\pi)}{C} = 4$ et $\sigma = -1$, on peut prouver que le point fixe $F_0 = (0, 0)$ correspond à la seule trajectoire bornée de l’application et que tous les autres trajectoires

$\{\psi_n\}$ vont à l'infini pour n soit positive, soit négative, soit les deux.

Pour demontrer cette affermation assumons que à un certain point la trajectoire satisfait la condition $0 \neq |\psi_n| \geq |\psi_{n-1}|$. Depuis l'Eq. (3.16) conseqe que

$$|\psi'_{n+1}| \geq (|2 - \delta' - \psi_n'^2| - 1)|\psi'_n|, \quad (3.18)$$

que, pour $\delta' \geq 4$ donne $|\psi'_{n+1}| > (\delta' - 3)|\psi'_n| \geq |\psi'_n|$ Cela implique récursivement que $|\psi_n|$ va à l'infini pour n grand positive. Si nous assumons l'inequation opposée $|\psi_n| \leq |\psi_{n-1}|$, nous obtenons de façon identique le même résultat mais pour n qui va à $-\infty$. De cela il conseqe que, pour un'équation DNLS avec potentiel mou ($\sigma = -1$) il n'y a pas des solutions périodiques en temps et bornées en espace avec une fréquence au dessous de la bande des phonons. Pour un potentiel dur ($\sigma = +1$), cette même explication exclut l'existence de solutions non-triviales, périodiques en temps et bornées en espace en dessus (=sotto) de la bande des phonons $\delta' \leq 0$.

Nous pouvons aussi demontrer que dans le demain de existence de ces trajectoires bornées en espace et périodiques en temps (c'est-à-dire quand $\delta' = \frac{\delta}{C} < 4$ pour un potentiel mou (où de façon équivalent $\delta' > 0$ pour un potentiel dur), les trajectoires qui s'éloignent trop de l'origine vont à l'infini. En effet, pour $\sigma = -1$, si $\psi_n'^2 > 4 - \delta'$ et $|\psi_n| \geq |\psi_{n-1}|$, l'inequation (3.18) implique que $\psi_{n+1}'^2 > \psi_n'^2 > 4 - \delta'$. De façon récursive, $|\psi_n|$ va à $+\infty$ pour $n \rightarrow +\infty$. Un résultat similaire est obtenu pour l'inequation inverse $|\psi_n| \leq |\psi_{n-1}|$, mais dans ce cas $|\psi_n|$ va à $+\infty$ pour $n \rightarrow -\infty$. en tout cas, quand $\delta' < 4$ l'application non-linéaire \mathcal{S} contient nombreuses trajectoires bornées qui representent les ondes stationnaires. Comme nous avons dit precedemmant (voir Fig. 3.2), une partie de ces trajectoire sont cahotiques, mais il y a aussi des cycles périodiques, des tori de KAM et des Cantori, par exemple authour du point fixe elliptique $F_0 = (0, 0)$.

Puisque les ondes stationnaires non-linéaires qui nous recherchons doivent être continuelles jusqu'à amplitude zéro en variant $\delta' = \frac{\delta}{C}$, les trajectoires correspondantes doivent converger au point fixe F_0 pour la valeur particulière $\delta = \delta_0(Q)$. Comme il a été expliqué dans [?], les trajectoires qui ont cette propriété sont soit des cycles périodiques, soit des cycles quasi-périodiques. Les trajectoires quasi-périodiques qui ont vecteur d'onde Q incommensurable avec 2π , pour beaucoup de valeurs de $Q/2\pi$ se presentent comme tori de KAM avec angle de rotation Q . Donc, pour un certain angle de rotation Q , il y a au moins une trajectoire qui, pour $\delta = \delta_0(Q)$ apparait avec ce angle de rotation au point fixe F_0 . Pour δ pres (mais pas coincident) de $\delta_0(Q)$, la trajectoire sera située près de F_0 . Cette trajectoire, qui pour $Q/2\pi = r/s$ rational est un cycle périodique de période s , tandis que pour $Q/2\pi$ irrational est généralement un tore de KAM, represent un'onde stationnaire de petite amplitude et vestureur d'onde Q .

Pour un potentiel général, mou ou dur, le coefficient σ du terme cubique dans l'Eq. DNLS (3.15) détermine le comportement du tori autour du point fixe elliptique F_0 . Pour un potentiel mou ($\sigma < 0$) l'angle de rotation pour les trajectoires qui sont autour de F_0 augmente avec l'augmentation du rayon. En particulier, pour les tori de KAM avec petite rayon ϵ_s , l'angle de rotation peut être calculé (voir Appendix 1.24) au plus bas ordre en ϵ_s as¹

$$\cos Q \simeq 1 - \frac{\delta'}{2} + \frac{3\sigma\epsilon_s^2}{8C}. \quad (3.19)$$

Puisque l'application \mathcal{S} depend de façon continue du paramètre δ' , aussi les cycles périodiques, tori de KAM et set de Cantori de \mathcal{S} dependent de façon continue de Q . Donc, car $\delta_0(Q)$ est une fonction monotone et croissante de Q , nous pouvons conclure que les ondes stationnaires de vecteur d'onde Q existent seulement pour $\delta \leq \delta_0(Q)$. De façon similaire, pour un potentiel dur, ($\sigma > 0$) l'angle de rotation diminue à l'augmenter du rayon. Donc, les ondes stationnaires dans les potentiel durs, existent seulement pour $\delta \geq \delta_0(Q)$.

3.2.2 Evolution des trajectoires

Puisque l'application symplectique S depend de façon continue du paramètre δ , nous allons analyser comment, en variant la valeur de ce paramètre, cette application evolue, l'application evolue, et donc ces trajectoires se transforment.

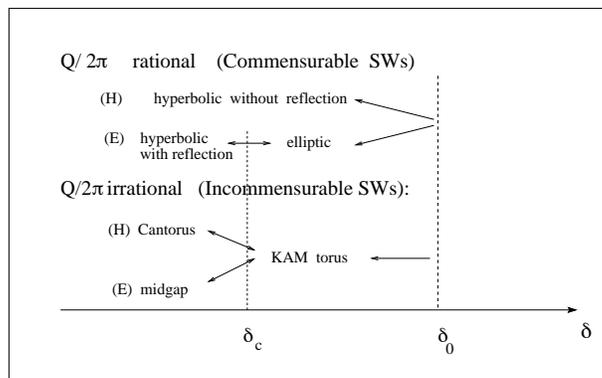


FIG. 3.3 – Evolution of the trajectories for variable δ' and fixed wave vector Q ($\sigma = -1$).

Considerons le cas de potentiel mou ($\sigma = -1$), qui nous pouvons en tout cas considerer générale (voir note (1.24)). Pour étudier l'évolution des trajectoires qui representent les ondes stationnaires en variant le paramètre δ' , nous partons de la limite linéaire à $\delta = \delta_0(Q)$ qui corresponde au point fixe F_0 , et nous diminuons la valeur de δ . L'évolution des trajectoires est

¹Cela conseqe par exemple depuis l'Eq. (??) dans l'Appendix using Eq. (3.40).

schematisée en Fig. 3.3. Pour les valeurs rationnelle de $\frac{Q}{2\pi} = r/s$ (r et s entiers irréductibles), qui correspondent aux ondes stationnaires commensurables avec la périodicité du réseau, deux familles d'ondes stationnaires bifurquent en couple depuis la limite linéaire $\delta = \delta_0(Q)$ à F_0 . Ces deux familles correspondent aux deux trajectoires cycliques de périodicité s , que nous appellons respectivement '*cycle-h*' et '*cycle-e*'. Nous observons que les cycles $-h$ sont des trajectoires hyperboliques sans réflexion pour tous $\delta < \delta_0(Q)$. Par contre, les cycles $-e$ sont des trajectoires elliptiques pour δ pres de $\delta_0(Q)$, mais en diminuant la valeur de δ elles deviennent hyperboliques avec réflexion au-dessous d'une valeur critique $\delta = \delta_c(Q)$. Ce valeur peut être calculaté numériquement de façon précise par exemple en utilisant le résidu de Green [?]. Quand $Q/2\pi$ est un nombre irrationnel générique (par exemple, not un nombre de Liouville), les trajectoires qui representent les ondes stationnaires quasi-périodiques en espace et incommensurable avec la périodicité du réseau, depuis F_0 apparaissent comme un torus de KAM de angle de rotation Q , qui est unique à part un changement de phase. Si nous diminuons la valeur de δ au-dessous (sotto) de la valeur critique $\delta = \delta_c(Q)$, le tore de KAM bifurque dans deus types de trajectoires, le cantor et la trajectoire '*midgap*' associée [?] (voir Appendice). Cette trajectoire midgap consiste de points isolés et non-recurrents qui se trouvent dans les gaps du cantor avec angle de rotation Q , auquel il est homocline.

3.2.3 Transition par brisure de analyticité

Nous venons d'illustrer, dans le scénario d'évolution des trajectoires, la présence d'un point de transition ' $d = \delta_c(Q)$ '. Nous allons maintenant caracteriser la signification de cette transition pour les trajectoires incommensurables comme pour les ondes stationnaires.

3.2.3.1 Transition pour les trajectoires

En effet, nous observons la nature differente des trajectoires qui bifurquent, car le torus de KAM ets une trajectoire analytique, tandis que le cantor, comme aussi la trajectoire mid-gap, sont analytiques. De consequence, la transition au point critique δ_C correspond, pour les orbites, à une *transition par brisure de analyticité* [?, ?]. Le point de transition $\delta_c(Q)$ corresponde à la limite des valeurs critiques $\delta_c(Q_n)$ d'une sequence de cycles-e périodiques dont les angles de rotation Q_n sont obtenues avec les approximation successives rationales de $Q/2\pi$ [?]. Donc, avec cette transition à δ_C , les deux familles d'ondes stationnaires incommensurables non analytiques, représentées par les cantori et les trajectoires midgap, respectivement confluent dans la famille unique d'ondes stationnaires definie par les tori de KAM pour $\delta \geq \delta_c(Q)$.

3.2.3.2 Transition pour les ondes stationnaires

Analysons maintenant la signification de cette transition pour les ondes stationnaires dans le modèle de DNLS et aussi celui de KG. Nous définons la *fonction enveloppe* $\chi_S(x)$ pour un'onde stationnaire comme

$$\psi_n = \chi_S(Qn + \phi), \quad (3.20)$$

qui donne la forme de l'onde rénormalisée sur un période 2π . Pour les ondes stationnaires, la transition par brisure de analyticité quand nous diminuons δ se manifest pour cette fonction enveloppe, comme montré en Figs. 3.4(a) et 3.4(b). En effet la fonction χ_S , analytique pour δ pres de δ_0 , devient non-analytique à petites δ avec la transition à $\delta = \delta_C$.

Pour la symetrie du modele les tora de KAM (voir Fig.3.2), ont deux axis de symetrie. Donc la fonction enveloppe $\chi_S(x)$ peut être choisie avec la symetrie $\chi_S(x) = -\chi_S(-x)$ et $\chi_S(x) = -\chi_S(x + \pi)$. Le fait que la fonction enveloppe de l'onde stationnaire est non-analytique pour δ grande négative, rende naturelle la description des ondes stationnaires en term des multibreathers, comme nous discuterons dans la Section 1.24.

Les trajectories de l'application \mathcal{S} , qui correspondent aux ondes stationnaires dans le modele de DNLS, représentent des solutions approchées pour le modele de KG dans la limite de petites couplages. Donc nous attendons de retrouver la transition par brisure de analyticité aussi pour les ondes stationnaires dans le système de KG (?). Calculons donc numériquement des solutions ondes stationnaires exactes en utilisant la méthode de Newton, décrite en [36, 1, 2] (see also Sec. 1.24), et définons la leur fonction enveloppe $\chi_K(x)$ comme $u_n(0) = \chi_K(Qn + \phi)$. Si nous continuons ces solutions en fonction de la fréquence ω_b jusqu'à amplitude zéro, nous retrouvons une transition par brisure de analyticité pour la fonction $\chi_K(x)$ comme montré en Figs. 3.4(c) et 3.4(d). Nous remarquons cependant que, pour un potentiel non-symetrique comme le potentiel de Morse, la fonction enveloppe n'est pas en générale symetrique (comme nous avons dit precedemmant pour le modele DNLS), c'est-à-dire , $\chi_K(x) \neq -\chi_K(-x)$ and $\chi_K(x) \neq -\chi_K(x + \pi)$.)

3.3 Ondes stationnaires comme multibreathers

Dans cette section nous analyserons les ondes stationnaires décrites en terme de solution breather. En effet, quand la fréquence ω_b de l'onde stationnaire est au-dessous du spectre des phonons pour un potentiel mou (c'est-à-dire $\omega_b < 1$) ou au-dessus pour un potentiel dur ($\omega_b > \sqrt{1 + 4C_K}$) et suffisamment près de la limite anti-continue $C_K = 0$, les solutions ondes stationnaires peuvent être identifiées comme des multibreathers [12] (voir Section 1.24) de période $T_b = \frac{2\pi}{\omega_b}$. Ces solutions, qui sont caractérisées à la limite anticontinue par une

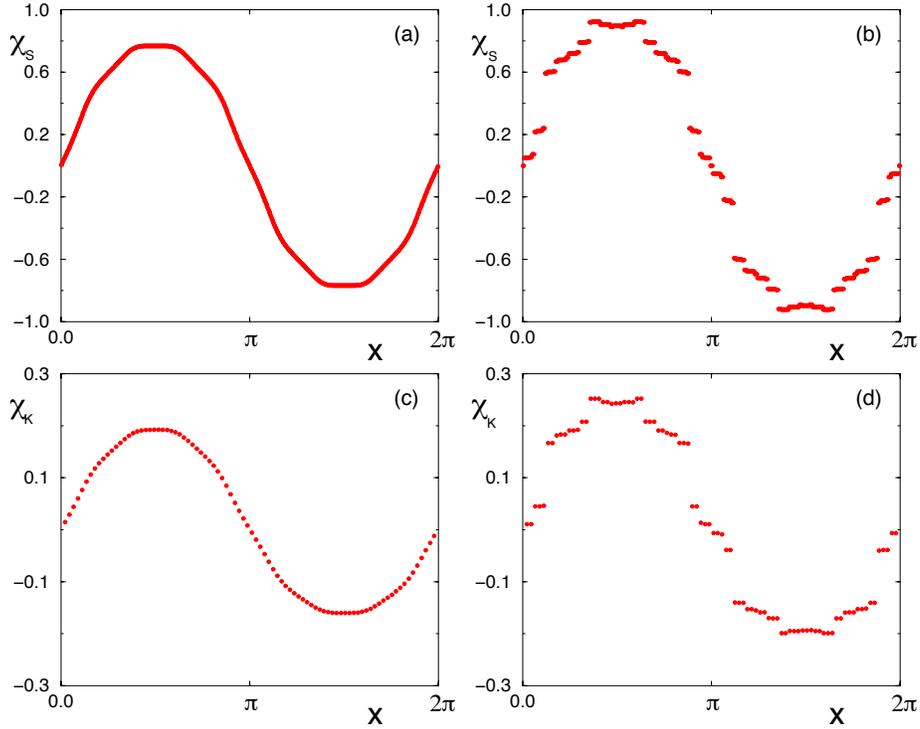


FIG. 3.4 – (a) and (b) : Hull functions $\chi_S(x)$ for SWs in a DNLS model (3.15) with $Q/2\pi = 233/610 \simeq (3 - \sqrt{5})/2 \equiv \sigma_G$ and (a) $\delta' = 3.0$ resp. (b) $\delta' = 2.8$ ($C = 1$). The analyticity is found to be broken at $\delta' \simeq 2.92$ for $Q/2\pi = \sigma_G$. (c) and (d) : Hull functions $\chi_K(x)$ for SWs in a KG chain (??) with a Morse potential, with $C_K = 0.05$, $Q/2\pi = 34/89 \simeq \sigma_G$ and (c) $\omega_b = 1.072$ resp. (d) $\omega_b = 1.065$. The breaking of analyticity occurs at $\omega_b \simeq 1.070$ for $Q/2\pi = \sigma_G$.

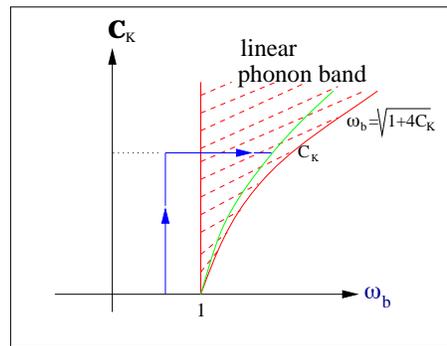


FIG. 3.5 – Continuation de la solution multibreather avec vecteur d'onde Q dans la bande de phonons linéaire pour un potentiel mou, de la limite anticontinue $C_K = 0$ à la limite linéaire $\omega_b = \sqrt{1 + 4C_K \sin^2 \frac{Q}{2}}$ illustrée par la ligne grise. (Pour un potentiel dur, la continuation commence à $\omega_b > 1$ et peut être ???performed ??? à fréquence constante.)

séquence codante $\tilde{\sigma}_n$ donnant l'état oscillatoire de chaque oscillateur, sont continuelles en augmentant C_K jusqu'à une valeur finie du couplage. A cette valeur, qui dépend en général de la solution considérée et du potentiel extérieur, nous rencontrons des bifurcations. Nous étudierons le comportement des ondes stationnaires à grand C_K et grande amplitude dans les chapitres ?? et 1.24. Considérons maintenant uniquement le régime de continuation des multibreathers où l'approximation DNLS est valable. En particulier, nous recherchons, entre ces multibreathers, les solutions qui sont en continuation des ondes stationnaires linéarisées à petite amplitude.

???? metti in chap 1 These are oscillatory states composed by nonlinear combinations of several² time-periodic and spatially localised breathers in a single nonlinear system [12, 13]. These multibreather solutions are characterized by a *coding sequence* $\tilde{\sigma}_n$ [12, ?] which defines the particular oscillatory state of the oscillator n in the case of zero coupling. As for general time-reversible time-periodic solutions with period T_b each individual oscillator can oscillate with frequency $j\omega_b$ (j integer) with two possible choices for the phase, we can, at $C_K = 0$, characterize all such solutions for the whole system by the following coding sequence :????

Nous devons donc trouver une séquence codante appropriée $\{\tilde{\sigma}_n\}$ telle que le multibreather qui existe à $C_K \neq 0$ peut être continu par rapport à ω_b dans la bande des phonons, comme illustré dans la Fig. 3.5.

Un problème similaire a été étudié par G. Kopidakis et ??? [36] pour un modèle désordonné. Ils ont trouvé que la plupart des solutions multibreather rencontrent des bifurcations et disparaissent avant que leur fréquence rentre dans le spectre des phonons. Cependant, il

²We will use the term multibreather to refer to combinations of either finitely or infinitely many individual discrete breathers.

existe quelques multibreathers qui peuvent être continués pendant que leur fréquence appartient à la bande des phonons. Pour ce dernier type de solution, ils ont trouvé un ansatz pour calculer l'état multibreather qui est continuable comme un mode linéaire. Cependant, la méthode utilisée en [36] a été explicitement basée sur la propriété que le spectre des phonons est discret avec des valeurs propres localisées. Maintenant, dans notre modèle invariant par translation, cette propriété n'existe pas et donc nous ne pouvons pas utiliser ansatz de [36]. Cependant, il existe deux solutions linéarisées qui peuvent être facilement obtenues par la continuation de l'état multibreather, c'est-à-dire le phonon $Q = 0$ à partir du multibreather de code $\dots + 1 + 1 + 1 + 1 + 1 + 1 + 1 + 1 \dots$, et le phonon avec $Q = \pi$ du multibreather de code $\dots + 1 - 1 + 1 - 1 + 1 - 1 + 1 - 1 \dots$. Nous voulons trouver un ansatz de façon à pouvoir déterminer la séquence codante pour une onde stationnaire générale de vecteur d'onde Q . Après avoir obtenu les codes, nous pouvons calculer par continuation numérique les ondes stationnaires non linéaires pour différentes valeurs de la fréquence et du couplage.

3.3.1 Construction de la séquence codante

La méthode que nous proposons pour calculer cet ansatz utilise l'approximation de DNLS valide à petite amplitude (et généralement aussi à petit couplage) présentée Section ???. Nous passons donc du modèle de KG (??) au modèle DNLS (3.11) (nous assumons pour simplicité que $\sigma = -1$ sans perte de généralité) de façon à obtenir la représentation des ondes stationnaires comme trajectoires de l'application symplectique \mathcal{S} (3.16). Comme dans le modèle DNLS, l'application \mathcal{S} dépend du paramètre $\delta' = \frac{\delta}{C}$, la limite anti-continue $C = 0$ pour une fréquence fixée $\delta < 0$ équivaut, dans ce modèle, à la limite de grandes amplitudes $\delta \rightarrow -\infty$ pour un couplage fixé C . Donc, si nous continuons ces trajectoires jusqu'à la limite, elles peuvent être décrites comme multibreathers et on peut leur associer une séquence codante. A la limite $C = 0$, les solutions stationnaires de l'Eq. (3.15) peuvent prendre seulement les valeurs $\psi_n = \pm\sqrt{-\delta}$ et $\psi_n = 0$. En conséquence, le code sera défini comme $\tilde{\sigma}_n = +1$ quand $\psi_n = \sqrt{-\delta}$, $\tilde{\sigma}_n = -1$ quand $\psi_n = -\sqrt{-\delta}$ et $\tilde{\sigma}_n = 0$ quand $\psi_n = 0$. Ces codes peuvent être utilisés comme conditions initiales dans un schéma itératif de Newton pour calculer numériquement les ondes stationnaires dans le modèle de KG original (??) avec la précision souhaitée.

En continuant les solutions ondes stationnaires calculées pour application dans le modèle DNLS vers δ' grande et négative, c'est-à-dire vers la limite anti-continue pour le modèle de KG, nous proposons et vérifions, en étudiant les trajectoires de l'application, l'ansatz suivant pour la séquence codante :

$$\tilde{\sigma}_n = \chi_0(Qn + \phi), \quad (3.21)$$

$\tilde{\sigma}_n$ peut être périodique ou quasi-périodique, selon que $Q/2\pi$ (avec $0 \leq Q \leq \pi$) est rationnel ou irrationnel. La fonction enveloppe $\chi_0(x)$ est impaire de période 2π , définie pour $x \in [-\pi, \pi]$ comme

$$\chi_0(x) = \begin{cases} 1 & \text{pour } (\pi - Q)/2 \leq x \leq (\pi + Q)/2 \\ -1 & \text{pour } -(\pi + Q)/2 \leq x \leq -(\pi - Q)/2 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} . \quad (3.22)$$

Cette fonction $\chi_0(x)$, renormalisée par un facteur $\sqrt{-\delta}$, est la limite pour $C = 0$ de la fonction enveloppe $\chi_S(x)$ introduite dans la section ??.

Cette méthode pour générer le code peut être visualisée par une construction graphique circulaire (voir Fig. 3.6). Pour construire le code pour une onde stationnaire non linéaire de

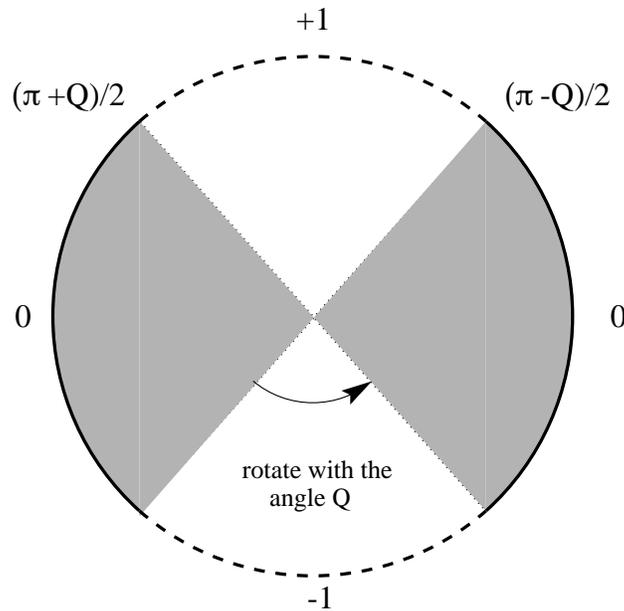


FIG. 3.6 – Représentation graphique de la génération de la séquence de code pour une onde stationnaire non linéaire de vecteur d'onde Q .

vecteur d'onde Q , le cercle est divisé en quatre parties auxquelles sont associées les valeurs 0, +1 et -1. La rotation autour du cercle d'un angle Q génère la séquence codante de l'onde stationnaire. La valeur de la phase ϕ qui, dans la construction du cercle, correspond au point initial pour la rotation, a une importance particulière. En effet, selon le choix de ϕ , on obtient deux différents types d'onde de même vecteur d'onde Q mais de phase initiale différente.

Nous allons maintenant analyser les propriétés de ces deux ondes que nous appellerons ondes stationnaires de type H et E.

3.3.1.1 Ondes type-E et type-H

Pour toutes les phases $\phi \neq \phi_m \equiv \pm(\pi - Q)/2 - mQ$ (m entier), la séquence codante générée ne contient aucun code consécutif $+1$ or -1 . Nous appelons ces ondes stationnaires 'type H' et, avec la terminologie utilisée dans la section ??, elles correspondent soit au cycles h (pour $Q/2\pi$ rationnel) soit au cantori (pour $Q/2\pi$ irrationnel). Par contre, pour la valeur particulière de la phase $\phi = \phi_m$, $x = Qm + \phi$ est un point de discontinuité de $\chi_0(x)$, et, en conséquence, $\tilde{\sigma}_n$ a deux $+1$ (or -1) consécutifs. Ces ondes stationnaires, appelées 'type E', correspondent aux cycles e (pour $Q/2\pi$ rationnel) ou à la trajectoire midgap (pour $Q/2\pi$ irrationnel). Comme nous l'avons vu en section ??, cette caractéristique du code a des conséquences importantes pour la stabilité des ondes stationnaires non linéaires. Nous observons que la séquence codante des ondes stationnaires de type E est toujours symétrique par rapport au centre des couples des $+1+1$ ou $-1-1$ consecutives présentes (c'est donc une symétrie intersite). Elle peut donc être choisie pour satisfaire $\tilde{\sigma}_n = \tilde{\sigma}_{-n+1}$ en choisissant $\phi = (\pi - Q)/2$. Dans le cas spécial où $Q = \frac{2k+1}{2k'+1}\pi$ (k, k' entier), le code pour une onde stationnaire de type E sera en plus anti-symétrique autour d'un des sites du réseau. Elle peut donc être choisie, de façon alternative à la précédente, pour satisfaire $\tilde{\sigma}_n = -\tilde{\sigma}_{-n}$ en choisissant $\phi = 0$. Les séquences codantes pour une onde stationnaire de type H sont antisymétriques autour d'un site du réseau à l'exception de quand $Q = \frac{2k+1}{2k'+1}\pi$, car dans ce cas ils sont antisymétriques autour d'un lien entre deux sites. Dans le premier cas nous devons choisir $\phi = 0$ tel que $\tilde{\sigma}_n = -\tilde{\sigma}_{-n}$, tandis que dans le deuxième cas nous avons $\tilde{\sigma}_n = -\tilde{\sigma}_{-n+1}$ en choisissant $\phi = -Q/2$.

3.3.2 Costruction de la séquence codant pour un potentiel dur

Pour générer la séquence codante des ondes stationnaires dans le cas de potentiel dur ($\sigma = +1$) si nous voulons utiliser les mêmes équations (3.21) et (3.22) une certaine transformation doit aussi être appliquée. En effet, pour ce potentiel les Eq. (3.21 et 3.22) produisent le code de l'onde stationnaire de vecteur $Q - \pi$ et avec la transformation $\tilde{\sigma}_n \rightarrow (-1)^n \tilde{\sigma}_{-n+1}$.

Une autre méthode est aussi utilisable pour obtenir la séquence codante dans le cas de potentiel dur. Considerons les propriétés satisfaites par le code σ_Q d'une onde stationnaire de vecteur Q , c'est-à-dire :

$$\sigma_Q(x) = -\sigma_Q(x) \quad (3.23)$$

$$\sigma_Q(x + 2\pi) = \sigma_Q(x) \quad (3.24)$$

$$\sigma_Q(x + \pi) = -\sigma_Q(x) \quad (3.25)$$

$$(3.26)$$

Dans le cas de potentiel dur, le code $\sigma'_n = \sigma_Q(nQ)$ sera :

$$\sigma'_n = (-1)^n \sigma_n = (-1)^n \sigma_Q(nQ) = \sigma_Q(n(Q + \pi)) = \sigma_Q(n(\pi - Q)) \quad (3.27)$$

Cela signifie que le code sera crée en tournant autour du cercle non plus par des angle Q mais par des angles $Q + \pi$, qui équival à tourner en sense opposé d'un angle $(\pi - Q)$.

Surement on pourrait trouver d'aures façons equivalentes pour générer ce code. Nous n'avons suggeré deux.

3.3.2.1 Ondes stationnaires commes discommensurations

Nous presentons maintenant un'autre possible description des ondes stationnaires de type H avec Q pres de π , en utilisant le concept de *discommensuration*. Nous appellons discommensuration un default introduit dans une sequence omogène, telle que y a un déphasage de π des deux coté de la discommensuration. Nous appellons par exemple "discommensuration" dans un potentiel mou, l'introduction d'un code 0 dans un chaîne d'oscillateurs avec vecteur $Q = \pi$. Ceal corresponde à introduire à la limite anti-continue un oscillateur à repos parmi une chaîne d'oscillateurs tous en mouvement dephasé de π , c'est-à-dire de code alterné $+1 -1$. La sequence codante d'une onde avec discommensuration result donc du type $[...+1-1+1-10+1-11+1...]$ et la discommensuration corresponde au site 0.

Si nous cconsiderons maintenant une générique onde stationnaire , son code à la limite anti-continue est constitué de 0,+1 et -1, avec de plus des 0, plus Q est proche de π , sans aucun zéro à la limite de $Q = \pi$. Donc nous pouvons considerer que la creation du code du première vecteur $Q < \pi$ correspond à l'introduction d'une discommensuration. De suite es autres ondes stationnaires

3.4 Stabilité des ondes stationnaires non-linéaires dans l'approximation DNLS

Dans cette section nous étudierons les propriétés de stabilités dynamique des ondes stationnaires non-linéaires. Nous commencerons par considérer les solutions de petite amplitude l'équation de KG (??) avec petit couplage C_K , de façon à ce que l'approximation DNLS (3.11) est bien justifié. Par convénience, nous choisissons $\sigma = -1$ sans perte de généralité (Sec. 2.2). Considérons les équations de Hill (1.4) pour KG. Comme nous avons vu au chapitre ??, une solution $\{\psi_n\}$ de l'Eq. (3.11) est linéairement stable s'il n'y a pas de solution $\{\epsilon_n(t)\}$ de l'Eq. (??) qui diverge exponentiellement avec le temps.

In the next section we will study numerically the original KG model for larger coupling to investigate the limit of validity for the DNLS approximation.

3.4.1 Le problème aux valeurs propres

Dans le cas où ψ_n est une solution réelle et indépendante du temps (3.11), la solution générale de (??) peut être recherchée comme une combinaison linéaire de solutions de la forme

$$\epsilon_n(t) = a_n e^{i\omega t} + b_n^* e^{-i\omega t} \quad (3.28)$$

ou les auto-fréquences $\omega = \omega_s$ et les modes propres $\{a_n, b_n\}$ sont déterminées par les équations aux valeurs propres

$$\begin{aligned} (2C - \delta - 2\psi_n^2)a_n - C(a_{n+1} + a_{n-1}) - \psi_n^2 b_n &= \omega_s a_n \\ \psi_n^2 a_n + C(b_{n+1} + b_{n-1}) - (2C - \delta - 2\psi_n^2)b_n &= \omega_s b_n. \end{aligned} \quad (3.29)$$

Nous observons que, si ω_s est une valeur propre pour le vecteur propre $\{a_n, b_n\}$, donc $-\omega_s$ et ω_s^* sont des valeurs propres pour les valeurs propres $\{b_n, a_n\}$ et $\{a_n^*, b_n^*\}$, respectivement³. En conséquence, la stabilité linéaire se réalise si et seulement si toutes les valeurs propres de l'équation (3.29) sont réelles. Donc, pour un système grand mais de taille finie N , pour une solution linéaire stable, nous devons avoir $2N$ valeurs propres réelles ω_s .

Il est convenable de redéfinir de nouvelles variables $U_n = a_n + b_n$ and $W_n = a_n - b_n$, tel que l'équation (3.29) devienne [?]

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_0 W_n &\equiv (2C - \delta - \psi_n^2)W_n - C(W_{n+1} + W_{n-1}) = \omega_s U_n \\ \mathcal{L}_1 U_n &\equiv (2C - \delta - 3\psi_n^2)U_n - C(U_{n+1} + U_{n-1}) = \omega_s W_n. \end{aligned} \quad (3.30)$$

Chaque opérateur \mathcal{L}_0 et \mathcal{L}_1 sont ?auto-adjoints?, mais l'opérateur global $\mathcal{L} \equiv \begin{pmatrix} 0 & \mathcal{L}_0 \\ \mathcal{L}_1 & 0 \end{pmatrix}$ ne l'est pas. Nous observons que $\omega_s = 0$ est toujours une valeur propre de \mathcal{L} pour $U_n \equiv 0$, puisque dans ce cas la première équation de (3.30) a la solution explicite $W_n = \psi_n$. Cette solution correspond au *phase mode de phase* $\epsilon_n = i\psi_n$ qui est indépendant du temps et qui dérive de l'invariance du modèle sous rotation globale de la phase. Cependant, pour une onde stationnaire incommensurable avec fonction enveloppe analytique (3.20), il y a aussi une autre solution à (3.30), qui est relative à la deuxième équation, avec $\omega_s = 0$ et $W_n \equiv 0$. Elle est appelée le *sliding mode* (de glissement) $U_n = \partial\chi_S/\partial\phi$, et elle résulte de l'invariance de l'onde stationnaire analytique sous translation spatiale. En Appendix ?? on trouvera des discussions ultérieures sur le spectre des opérateurs \mathcal{L}_0 et \mathcal{L}_1 .

Nous définissons aussi la *signature de Krein* [?, 12] associée à un couple de valeurs propres $\pm\omega_s$ dans le modèle DNLS comme [?]

$$\mathcal{K}(\omega_s) = \text{sign} \sum_n [|a_n|^2 - |b_n|^2] = \text{sign} \sum_n [U_n W_n^* + W_n U_n^*], \quad (3.31)$$

³l'exponentiel de cet opérateur est symplectique

où $\{a_n, b_n\}$ et $\{U_n, W_n\}$ sont respectivement les vecteurs propres de (3.29) et (3.30) avec les valeurs propres $+\omega_s$. En général, en faisant varier le paramètre δ' , on peut avoir des instabilités seulement par une collision entre valeurs de signatures de Krein différentes.

3.4.2 Comportement général des valeurs propres

Commençons par explorer le comportement général des valeurs propres depuis la limite anti-continue en augmentant le couplage. Quand $\delta < 0$ et $C \rightarrow 0$ (limite anti-continue), nous avons $\psi_n^2 = -\delta$ ou 0 (qui correspondent respectivement aux codes $\tilde{\sigma}_n = \pm 1$ ou 0), et toutes les auto-fréquences de (3.30) sont réelles. Pour un système de P sites avec $|\tilde{\sigma}_n| = 1$ et $Z = N - P$ et les autres $Z = N - P$ avec $\tilde{\sigma}_n = 0$, il y a $2P$ valeurs propres dégénérées à $\omega_s = 0$, tandis que les autres valeurs propres sont positionnées en Z paires à $\omega_s = \pm\delta$.

Si nous augmentons les valeurs de couplage, les valeurs propres se déplacent en perdant leur dégénérescence et, si un couple de valeurs propres sort dans le plan imaginaire, l'onde stationnaire non linéaire peut devenir instable. Observons en détail le comportement des deux ??? de valeurs propres. Quand C augmente depuis la valeur zéro, les valeurs propres à $\omega_s = \pm\delta$ (qui ont toutes une signature de Krein signature +1) se déplacent seulement le long de l'axe réel, et donc ne causent pas d'instabilité pour les ondes stationnaires. Par contre, le comportement des valeurs propres d'origine $\omega_s = 0$ est différent pour les ondes stationnaires de type E ou H (comme définies dans la section ??). En effet, puisque la séquence codante pour les ondes stationnaires de type E contient des couples de +1 (or -1) consécutifs, et l'anharmonicité du potentiel est mou, il résulte d'un résultat général [12] que des couples de valeurs propres originellement à $\omega_s = 0$ quittent l'axe réel et vont sur l'axe imaginaire dès que $C \neq 0$ (voir Fig. 1.24). En conséquence, les ondes stationnaires correspondantes deviennent *dynamiquement instables* pour $\delta < 0$ et C petit. En plus, nous trouvons numériquement que *cette instabilité persiste pour tout $\delta < \delta_0(Q)$* . Donc, les ondes stationnaires de type E sont instables pour toutes les amplitudes.⁴ Au contraire, pour des ondes stationnaires de type H , pour chaque site de code $\tilde{\sigma}_n = 1$ les sites plus proches voisins avec code $\tilde{\sigma}_n = -1$, et inversement. Il y a donc une différence de phase de π entre chaque deux sites consécutifs avec oscillation non nulle à $C = 0$, qui soient voisins ou pas). Donc, comme justifié par l'action effective développée en Ref. [12] et prouvé par des calculs similaires en [?, 27], nous observons que toutes les valeurs propres d'origine $\omega_s = 0$ (ayant une signature de Krein -1 opposées à celles d'origine $\omega_s = \pm\delta$) se déplacent depuis l'origine le long de l'axe réel. Seulement un couple reste à $\omega_s = 0$ et qui a une signature de Krein 0, et correspond à l'invariance de phase

⁴Cette instabilité ??-oscillatoire est aussi prouvée dans l'Appendix pour des ondes stationnaires de type E commensurables et dans la limite de petites amplitudes.

globale. Donc, la stabilité de ces ondes stationnaires est conservée pour C pas trop grand (c.f. Fig. 3.7 (a)).

Nous allons maintenant analyser en détail le comportement différent des ondes stationnaires non-linéaires commensurables et non commensurables.

3.4.3 Ondes stationnaires commensurables

Dans le cas des ondes stationnaires de vecteur $Q = \pi r'/s'$ (r' et s' entiers irréductibles) dans un système de taille infinie, la périodicité du réseau de ψ_n^2 dans (3.30) fait que les valeurs propres dégénérées sur l'axe réel forment des bandes quand C augmente depuis la valeur zéro (voir Fig. 3.7). Comme dans une période du réseau de s' sites, il y a $s' - r'$ sites de code $\tilde{\sigma}_n = 0$, il y aura $s' - r'$ couples de bandes symétriques avec signature de Krein $+1$ issus de $\omega_s = \pm\delta$ et séparés par des gaps. Les valeurs restantes forment r' couples de bandes symétriques avec signature de Krein -1 et originées de $\omega_s = 0$. Comme la valeur propre $\omega_s = 0$ reste toujours dans le spectre, donc il n'y a pas de gap à zéro, et cette valeur est toujours à un bord de bande.

3.4.3.1 Instabilité oscillatoire

Si nous augmentons δ à C fixé, les bandes issues d'origine $\omega_s = 0$ et celles d'origine $\omega_s = \pm\delta$ s'élargissent et donc les gaps qui séparent ces deux classes de bande diminuent. A une valeur critique $\delta = \delta_K(Q)$ Ce gap tombe à zéro et, comme montré Fig. 3.7(b), des couples symétriques de valeurs propres de signature de Krein opposée commencent à entrer en collision et se déplacent en dehors de l'axe réel dans le plan complexe. Donc une instabilité oscillatoire (qui est une instabilité de Krein) se manifeste. Cette instabilité est causée par un couple de valeurs propres complexes, d'où le nom d'oscillatoire.

Nous remarquons que ce mécanisme d'instabilité est similaire à celui observé précédemment en [27] pour les "solitons obscures et discrets". Dans ce cas, la séquence codante à la limite anti-continue consiste en un seul "défaut" d'amplitude nulle introduit dans un substrat constitué d'une onde avec $Q = \pi$, elle-même toujours stable [6].

Selon la description de discommensuration donnée dans la Section 1.24, nous pouvons regarder l'onde stationnaire comme un réseau de discommensuration ("dark solitons") légèrement interrégissant. Chaque discommensuration manifeste une instabilité oscillatoire qui est due à la résonance entre le mode translationnel localisé à la discommensuration et les modes étendus [27]. Cette instabilité oscillatoire, trouvée numériquement pour le modèle DNLS peut aussi être confirmé numériquement par l'analyse de Floquet des équations de

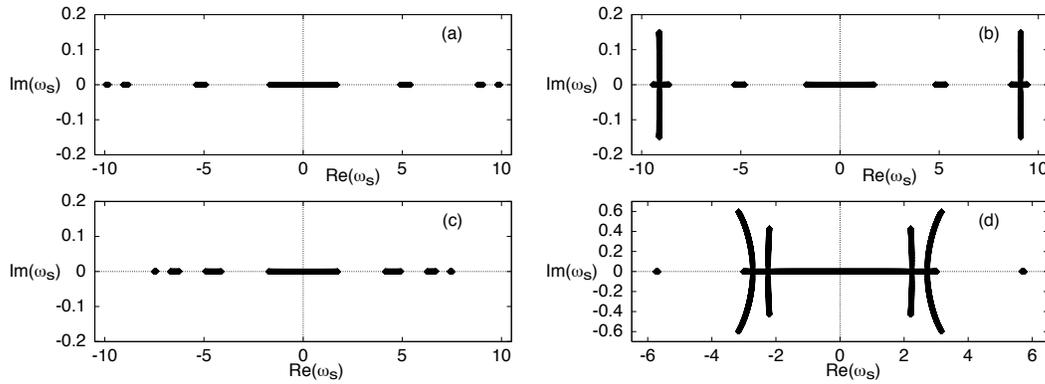


FIG. 3.7 – Eigenvalues of Eq. (3.30) for a type H SW with $Q = 3\pi/4$ and (a) $\delta' = -8.0$, (b) $\delta' = -7.5$, (c) $\delta' = -4.5$ resp. (d) $\delta' = -0.5$ ($C = 1$).

KG (??)

In fact, as was mentioned in Sec. ??, for Q close to π the SWs generated from (3.22) can be viewed as a periodic (or quasi-periodic for incommensurable SWs) repetition of defects or discommensurations added to the stable wave with $Q = \pi$. Thus, the SW can be regarded as a lattice of weakly interacting discommensurations (“dark solitons”), each of which shows an oscillatory instability due to a resonance between a translational mode localized at the discommensuration and extended modes [27]. This oscillatory instability detected numerically for the DNLS model can also be confirmed by a direct numerical Floquet analysis of the KG Eq. (??) in the limit of small C_K (see Section ??).

Si nous continuons à augmenter δ au delà de la valeur critique $\delta_K(Q)$, les bandes continuent à se superposer en générant de nouvelles instabilités. Pour plusieurs valeurs commensurables de Q , on trouve que, quand δ augmente au-delà de $\delta_K(Q)$, l’onde stationnaire reste toujours instable jusqu’à ce qu’elle disparaisse avec l’amplitude zéro à la limite linéaire $\delta = \delta_0(Q)$. Cependant, pour des valeurs rationnelles $Q/2\pi = \frac{r}{s}$ avec s petit, dans certains intervalles de δ la superposition des bandes disparaît. En conséquence, l’onde stationnaire redevient temporellement stable (par exemple, pour $Q = 3\pi/4$, l’onde stationnaire de type H est stable pour $-4.9 \lesssim \delta' \lesssim -3.9$, comme montré en Fig. 3.7(c)). En tout cas, pour toutes les ondes stationnaires commensurables avec $Q \neq \pi$, il y a toujours un intervalle final $\delta_1(Q) \leq \delta < \delta_0(Q)$ où les bandes avec signature de Krein opposées se superposent (Fig. 3.7). En conséquence, toutes les ondes stationnaires commensurables avec $Q \neq \pi$ sont instables pour de petites amplitudes non nulles.

3.4.3.2 Justification de l'instabilité pour système infini

Nous présentons une justification afin de comprendre simplement le résultat précédent. A la limite linéaire $\delta = \delta_0(Q)$ où $\psi_n^2 = 0$, les fréquences du spectre de (3.30), qui dans ce cas n'a pas de gaps, sont

$$\omega_s = \pm 2C |\cos Q - \cos q|, \quad (3.32)$$

avec $0 \leq q < 2\pi$, et la signature de Krein correspondant est $\text{sign}(\cos Q - \cos q)$. Donc, à la limite linéaire, il y a un intervalle autour de $\omega_s = 0$ où les valeurs propres de signature de Krein opposés se superposent. Cependant, il n'y a pas évidemment d'instabilité puisqu'il n'y a pas de couplage entre modes avec signature de Krein opposée dans cette limite. Dans le cas commensurable, nous savons que quand $\psi_n^2 \neq 0$ un nombre fini de bandes de largeur non nulle se forment pour $\delta < \delta_0(Q)$. Donc, pour une raison de continuité, si nous considérons l'absence de couplage, les bandes avec signature de Krein opposée devraient continuer à se superposer sur l'axe réel près de $\omega_s = 0$, jusqu'à ce que δ arrive à une certaine valeur $\delta_1(Q)$ qui doit être inférieur à $\delta_0(Q)$. Toutefois, comme il y a généralement couplage (c'est-à-dire résonance) entre modes de signature de Krein différente, les bandes qui se superposent se déplacent dans le plan complexe et les instabilités se manifestent. Ce résultat est prouvé dans l'appendice de [] en utilisant la théorie des perturbations et la méthode des analyses des bandes en Sec. 1.24.

3.4.3.3 Peculiarité pour les systèmes finis

Nous observons que dans le cas des systèmes de taille finie (c'est-à-dire avec conditions périodiques aux bords), les valeurs propres seront évidemment séparées en formant un spectre discret et non pas des bandes continues. Les scénarios initial que nous avons décrit lorsque nous augmentons δ' depuis $-\infty$ sera qualitativement le même, et nous obtenons des instabilités oscillatoires de façon similaire à celle illustrée en Fig. 3.7(b) (même si les bandes sont maintenant substituées par des valeurs propres discrètes). Cependant, la justification précédente qui montre l'instabilité près de la limite linéaire, n'est évidemment pas valable pour les systèmes infinis, car autour de $\omega_s = 0$, il n'y a pas de bandes continues mais seulement des valeurs propres discrètes. Donc, les résonances (par superposition des valeurs propres) peuvent être évitées. En effet, nous trouvons que les systèmes finis redeviennent stables dans un certain intervalle près de la limite linéaire. Le scénario avec lequel la stabilité est retrouvée se manifeste par des "instabilités ré-entrantes", de façon similaire [9, 27]. Nous retrouvons un modèle analogue pour le modèle KG, comme décrit en Sec. ?? (voir Fig. 1.24).

3.4.4 Ondes stationnaires incommensurables

Nous sommes en train de décrire les ONS stationnaire à partir de la limite anti-continue, jusqu'à la limite linéaire. Près de la limite anti-continue, soit les ondes commensurables, soit les incommensurables sont non-analytiques et le comportement, vis à vis de la stabilité, est substantiellement le même, excepté que le spectre des ondes incommensurables a une structure de tor de KAM mais avec une infinité, et non plus un ensemble fini discret, de gaps. En augmentant le couplage, et en approchant la limite linéaire, les ondes incommensurables rencontrent une transition par brisure d'analyticité, et deviennent donc analytiques. Près de la limite linéaire, le comportement de stabilité des ces ondes incommensurables analytiques est donc bien différent de celui des ondes non-analytiques, et nous allons l'analyser dans ce paragraphe.

Pour les onde stationnaire incommensurables ($Q/2\pi$ irrationnel), l'instabilité oscillatoire se manifeste à une valeur particulière $\delta_K(Q)$ comme pour le cas commensurable décrit précédemment, avec la seule différence que le spectre de (3.30) a maintenant une structure d'ensemble de Cantor avec une infinité de gaps. Cependant, cette nature d'ensemble de Cantor du spectre (avec des "bandes" qui ont en effet des mesures nulles) implique que, pour ondes stationnaires incommensurables et de petite amplitude (analytique), l'argumentation utilisée en Sec. 1.24 ne peut pas être utilisé pour démontrer l'instabilité des ondes non-linéaires près de la limite linéaire. En effet, elle fournirait seulement $\delta_1(Q) = \delta_0(Q)$. Une analyse numérique d'approximation de taille finie de la onde stationnaire analytique incommensurable avec $|Q| > \pi/2$ montre typiquement un scénario avec instabilités ré-entrantes qui deviennent très faibles et pratiquement invisibles pour δ proche de $\delta_0(Q)$. L'extrapolation de ce scénario pour un système infini peut conduire à la conclusion erronée que les ondes stationnaires avec $|Q| > \pi/2$ peuvent être stables pour quelques δ (en constituant un ensemble de Cantor comme observé dans les systèmes désordonnés [36]). Ce scénario signifierait qu'en absence de couplage, le sous-spectre de (3.30) qui a une structure d'ensemble de Cantor avec signature de Krein positive, devrait, pour quelques δ , se trouver exactement dans les gaps de l'autre sous-spectre, lui aussi avec structure d'ensemble de Cantor et avec signature de Krein négative. De cette façon, les instabilités pourraient être évitées. Cependant, quand $\delta \rightarrow \delta_0(Q)$ les deux sous-spectres assument une pleine mesure. Si nous supposons que leur mesure est continue par rapport à δ , leur superposition ne peut pas être évitée pour δ près de $\delta_0(Q)$, et les instabilités doivent se manifester aussi dans ce cas. Cet argument intuitif est confirmé par des analyses plus sophistiquées que nous décrirons dans la prochaine section (voir aussi pour d'autres détails techniques l'appendix de []). Nous montrerons en effet que les ondes stationnaires incommensurables aussi sont instables pour δ proche de $\delta_0(Q)$. Cependant, quand $|Q| > \pi/2$ les instabilités apparaissent seulement pour des ordres supérieurs

et elles sont donc plus difficiles à détecter numériquement ou expérimentalement.

3.4.5 Etude par l'analyse des bandes

Pour démontrer l'instabilité des ondes stationnaires analytiques, nous utiliserons maintenant la méthode d'"analyse de bandes" décrite en [12].

L'idée de base est incorporer le problème aux valeurs propres non-Hermitiennes (3.30) dans un problème aux valeurs propres plus grandes mais avec un opérateur Hermitien, qui a plus de propriétés.

3.4.5.1 Un nouveau problème aux valeurs propres

Donc, comme en [12], nous associons ce problème à un problème aux valeurs propres étendues.

$$i\dot{\epsilon}_n - \delta\epsilon_n - 2|\psi_n|^2\epsilon_n - \psi_n^2\epsilon_n^* - C(\epsilon_{n+1} + \epsilon_{n-1} - 2\epsilon_n) = E\epsilon_n. \quad (3.33)$$

Nous pouvons encore chercher les valeurs propres et les auto-solutions de ces auto-équations de la forme (3.28), où ω est un paramètre réel. Donc, les valeurs propres E avec vecteurs propres $\{a_n, b_n\}$ sont ceux d'un opérateur auto-adjoint.

$$\begin{aligned} (-\omega + 2C - \delta - 2\psi_n^2)a_n - C(a_{n+1} + a_{n-1}) - \psi_n^2b_n &= Ea_n \\ -\psi_n^2a_n - C(b_{n+1} + b_{n-1}) + (\omega + 2C - \delta - 2\psi_n^2)b_n &= Eb_n. \end{aligned} \quad (3.34)$$

Si nous appelons $U_n = a_n + b_n$ et $W_n = a_n - b_n$, (3.34) devient

$$\begin{aligned} (2C - \delta - 3\psi_n^2)U_n - C(U_{n+1} + U_{n-1}) - \omega W_n &= EU_n \\ -\omega U_n + (2C - \delta - \psi_n^2)W_n - C(W_{n+1} + W_{n-1}) &= EW_n, \end{aligned} \quad (3.35)$$

ou

$$\begin{pmatrix} \mathcal{L}_1 & -\omega \\ -\omega & \mathcal{L}_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \{U_n\} \\ \{W_n\} \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \{U_n\} \\ \{W_n\} \end{pmatrix}, \quad (3.36)$$

avec \mathcal{L}_0 et \mathcal{L}_1 définis par les équations (3.30). Donc, chaque valeur propre $E_\nu(\omega)$ du problème (3.36) devient une fonction réelle et lisse de ω , appelée bande (Elle est synthétique par rapport à $\omega = 0$) et elle dépend aussi de la façon lisse des autres paramètres du modèle. En tout cas, comme précédemment, nous devons considérer seulement les variations du paramètre $\delta' = \frac{\delta}{C}$. Si nous assumons que le paramètre ω représente les auto-fréquences pour le problème initial non-Hermitien (3.30), le problème (3.36) se réduit au problème (3.30) pour la valeur particulière de $E = 0$. Donc, comme nous l'avons expliqué en Section 1.24 les auto-fréquences réelles ω_s de (3.30) sont déterminées par les intersections $E_\nu(\omega_s) = 0$ entre

les bandes avec l'axe $E = 0$, et leur signature de Krein par signe $(-\frac{dE_{\nu}}{d\omega})$ à $\omega = \omega_s > 0$ [12]. En variant le paramètre du modèle δ' les bandes se déplaceront généralement dans le plan (ω, E) . Si une bande perd un couple d'intersections avec l'axe $E = 0$ (c'est-à-dire si un 'gap' s'ouvre autour de l'axe), une instabilité se manifeste pour le problème initial (3.30).⁵

3.4.5.2 Structure du spectre

A la limite linéaire ($\psi_n \rightarrow 0$ et $\delta \rightarrow \delta_0(Q)$), le problème des valeurs propres (3.36) est résolu facilement en introduisant un vecteur d'onde q et en écrivant les transformé de Fourier

$$U(q) = \sum_n U_n \epsilon^{iqn}, \quad W(q) = \sum_n W_n \epsilon^{iqn}. \quad (3.37)$$

A cette limite, il y a deux groupes de solutions ondes planes $U_n = \pm W_n = \epsilon^{iqn}$ avec les valeurs propres correspondantes

$$E_{0\pm}(q; \omega) = 2C - \delta_0(Q) - 2C \cos q \mp \omega = 2C(\cos Q - \cos q) \mp \omega. \quad (3.38)$$

Pour un système fini de N sites, $q = 2\pi k/N$ avec $0 \leq k < N$ entier, il y a donc $2N$ bandes décrites par des droites avec pente $\pm\omega$ et indexées par le vecteur d'onde q (Fig. 3.8 (a)). Chaque bande $E_{0\pm}(q; \omega)$ intersecte $E = 0$ à $\omega_{\pm}(q) = \pm(2C - \delta_0(Q) - 2C \cos q) \equiv \omega_s(q)$. Nous retrouvons donc le résultat (3.32), c'est-à-dire l'Eq. (3.30) à $2N$ valeurs propres sur l'axe réel, tel que la solution $\psi_n \equiv 0$ est linéairement stable comme attendue, et reste aussi stable dans la limite de N grand.

3.4.5.3 Deux types de dépendance

Quand ψ_n est petit mais non nul, il peut être considéré comme une perturbation pour l'opérateur de gauche de l'Eq. (3.36). Donc, les gaps s'ouvriront généralement dans le spectre continu des bandes de cet opérateur aux points ou lignes de dégénérescence. Un tel gap peut supprimer une intersection de bandes $E_{0\pm}(\omega) = 0$ avec l'axe réel, et donc générer une instabilité linéaire. Il y a deux types de dégénérescence. Le premier type se manifeste pour les deux branches d'auto-énergie $E_{0+}(q; \omega)$ et $E_{0-}(q; \omega)$ pour tout ω , puisque $E_{0\pm}(q; \omega) = E_{0\pm}(2\pi - q; \omega)$. Le deuxième type se manifeste par des points en intersection, où des bandes de pentes opposées rentrent en intersection $E_{0-}(q; \omega) = E_{0+}(q'; \omega)$ ($q \neq q'$) pour différents q .

Pour une onde stationnaire analytique, la fonction enveloppe (cf. Eq. (3.20)) $\chi_S^2(x)$ de ψ_n^2 peut être choisi pair et de période π . Donc, nous pouvons étendre ψ_n^2 en série de Fourier

⁵Pour une instabilité oscillatoire (Krein), deux couples symétriques d'intersection sont perdues simultanément.

comme :

$$\psi_n^2 = \sum_p f_p \epsilon^{i2p(nQ+\phi)}, \quad (3.39)$$

où $f_p = f_{-p}$. Nous pouvons choisir la phase arbitraire comme $\phi = 0$. Pour la théorie des perturbations conventionnelles, la somme totale des gaps qui s'ouvrent est proportionnelle à $\sum_p |f_p|$. Donc, dans notre cas, la théorie des perturbations sera consistante, en principe, seulement quand cette somme est convergente et petite. Donc, la théorie des perturbations est applicable pour des ondes stationnaires incommensurable, seulement quand $\chi_S(x)$ est analytique, puisque dans ce cas f_p décroît exponentiellement pour $p \rightarrow \infty$. Par contre elle ne sera pas applicable quand ψ_n est représenté par un cantori, parceque dans ce cas la somme est divergente. Donc, si nous considérons seulement la réponse près de la limite linéaire où $\chi_S(x)$ est analytique avec une petite amplitude ϵ_s , $\chi_S(x)$ devient près d'une fonction harmonique $\epsilon_s \cos x$, et nous avons :

Perturbation theory will be consistent in principle when the total sum of the gap openings $\sum_p |f_p|$ is convergent and small, c'est-à-dire, only when $\chi_S(x)$ is analytic. It should not be consistent when ψ_n is represented by cantori, because then this sum is divergent. Then, considering only the regime close to the linear limit where the SW is analytic with small amplitude ϵ_s , $\chi_S(x)$ becomes close to a harmonic function $\epsilon_s \cos x$, and we have

$$f_0 \approx 2f_1 = 2f_{-1} \approx \epsilon_s^2/2 > 0, \quad (3.40)$$

Les autres coefficients de Fourier f_p seront petites de l'ordre $\epsilon_s^{2|p|}$. En utilisant l'espace des transformées de Fourier (3.37), sans approximation, l'Eq. (3.35) devient :

$$\begin{aligned} (2C - \delta - 2C \cos q - 3f_0)U(q) - 3 \sum_{p \neq 0} f_p U(q + 2pQ) - \omega W(q) &= EU(q) \\ -\omega U(q) + (2C - \delta - 2C \cos q - f_0)W(q) - \sum_{p \neq 0} f_p W(q + 2pQ) &= EW(q). \end{aligned} \quad (3.41)$$

Cette équation couple donc l'espace des solutions $(U(q), W(q))$ de vecteur d'onde q du problème non perturbé (3.36) avec celles de vecteur d'onde $q + 2pQ$. La force de couplage est proportionnelle à f_p . La matrice de l'opérateur qui correspond au membre de gauche de l'Eq. (3.41) peut être décomposée en blocs de matrices 2×2 . Nous appelons $\mathbf{D}(q)$ la partie diagonale qui agit sur le sous-espace de vecteur q , et $-f_p \mathbf{A}$ les parties qui couplent les sous-espaces q avec le sous-espace $q + 2pQ$:

$$\mathbf{D}(q) = \begin{pmatrix} 2C - \delta - 2C \cos q - 3f_0 & -\omega \\ -\omega & 2C - \delta - 2C \cos q - f_0 \end{pmatrix}; \mathbf{A} = \begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Les valeurs propres de la partie diagonale $\mathbf{D}(q)$ sont

$$E_{\pm}(q; \omega) = 2C - \delta - 2C \cos q - 2f_0 \mp \sqrt{\omega^2 + f_0^2}, \quad (3.42)$$

Ils déterminent le déplacement vers le bas des valeurs propres non perturbées $E_{0\pm}(q; \omega)$ (cf. Eq. (3.38)) causé par le terme statique f_0 dans l'expansion (3.39) (qui a le même ordre de grandeur que f_1). La perturbation due à $|f_p|$, avec $|p| \geq 1$, agit donc principalement en enlevant la dégénérescence de ces valeurs propres. Le premier type de dégénérescence,

$$E_+(q; \omega) = E_+(2\pi - q; \omega) \text{ and } E_-(q; \omega) = E_-(2\pi - q; \omega), \quad (3.43)$$

est élevé quand $q + 2pQ = -q \pmod{2\pi}$, ou

$$q = -pQ \pmod{\pi}, \quad (3.44)$$

avec p entier. Donc, un gap de largeur proportionnelle à $|f_p|$ s'ouvre entre les deux courbes $E_+(-pQ; \omega)$ et $E_+(pQ; \omega)$, et un gap identique entre les deux courbes $E_-(-pQ; \omega)$ et $E_-(pQ; \omega)$ (Fig. 3.8 (b)). Toutefois, l'existence de ces gaps ne change pas le nombre d'intersections $E_{\pm}(q; \omega) = 0$ qui existent à la limite linéaire, et donc ne produit aucune instabilité pour les ondes stationnaires .

Pour le deuxième type de dégénérescence, aux points d'intersection transverses, un gap de largeur proportionnel $|f_p|$ s'ouvre si :

$$E_+(q; \omega_p) = E_-(q + 2pQ; \omega_p) \equiv E_p(\omega_p), \quad (3.45)$$

Par calcul, on trouve les valeurs propres perturbées à ω_p à l'ordre f_p :⁶

$$E'_{p\pm}(\omega_p) = E_p(\omega_p) \pm \frac{|f_p \omega_p|}{\sqrt{\omega_p^2 + f_0^2}}. \quad (3.46)$$

3.4.5.4 L'ellipse de gaps

Si $E = 0$ appartient à l'un de ces gaps, l'onde stationnaire devient instable (voir Fig. 3.8 (c)). Ces intersections se vérifient quand

$$\frac{1}{C} \sqrt{\omega_p^2 + f_0^2} = \cos(q + 2pQ) - \cos q \quad (3.47)$$

$$E_p = 2C - \delta - 2f_0 - C \cos(q + 2pQ) - C \cos q. \quad (3.48)$$

⁶Ici, les interfaces possibles avec les résonances du premier ordre (3.44) ont été négligées. Le cas des résonances simultanées, qui se vérifient à des points spéciaux, a été discuté dans l'Appendix de []

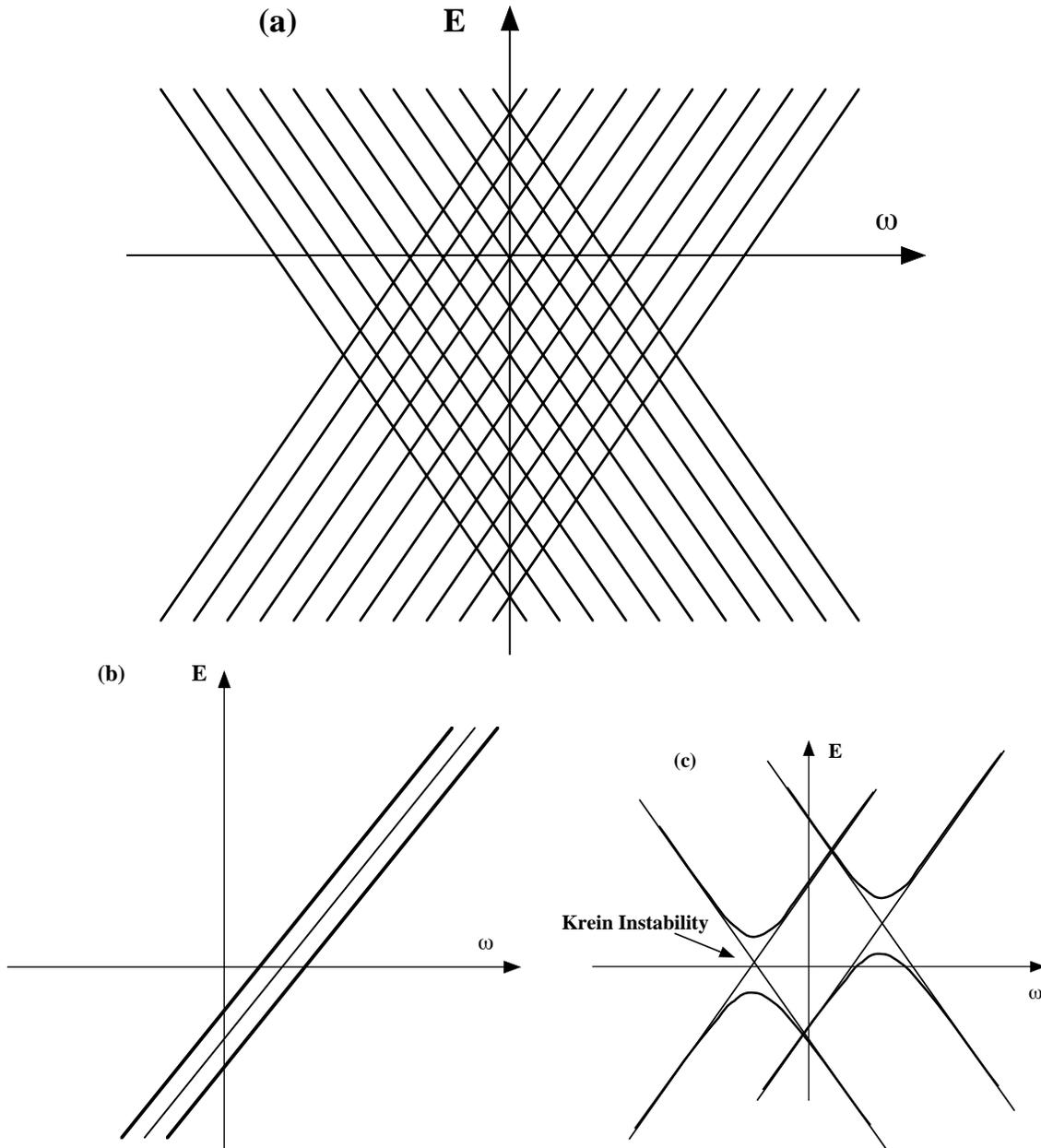


FIG. 3.8 – (a) structure de bande non perturbée $E(\omega) = E_{0\pm}(q; \omega)$ (Eq. 3.38); (b) Ouverture de gap pour le premier type de dégénérescence (3.43) (pas d'instabilité); (c) Ouverture de gap pour le deuxième type de dégénérescence (3.45). Une instabilité est générée si le gap dépasse l'axe $E = 0$.

Depuis les Eqs. (3.47) et (3.48), il ressort que pour un p donné, ces points d'intersection sont localisés dans le plan (ω, E) sur une ellipse donnée par

$$\frac{\omega_p^2}{4C^2 \sin^2 pQ - f_0^2} + \frac{(2C - \delta - 2f_0 - E_p)^2}{4C^2 \cos^2 pQ - f_0^2 \cot^2 pQ} = 1, \quad (3.49)$$

Cette ellipse existe pour $|f_0| < 2C|\sin pQ|$, avec son centre à $\omega = 0$ et $E = 2C - \delta - 2f_0$. Donc cette ellipse représente les liens des points à moitié des gaps qui sont ouverts par la perturbation d'ordre f_p . Une instabilité des ondes stationnaires se produit lorsque l'ellipse coupe l'axe $E = 0 + \frac{|f_p \omega_p|}{\sqrt{\omega_p^2 + f_0^2}}$, c'est-à-dire quand l'axe $E = 0$ commence à entrer dans le gap, et donc quand

$$(2C - \delta - 2f_0)^2 < 4C^2 \cos^2 pQ - f_0^2 \cot^2 pQ. \quad (3.50)$$

L'existence de cette ellipse de gaps est confirmée par des calculs numériques des ensembles de bandes $E(\omega)$ (voir Fig. 3.9). Dans le cas incommensurable, $|p|$ peut varier entre 1 et $+\infty$. Il y a donc une infinité d'ellipses qui recouvrent densément l'espace rhombique où le groupe de courbes $E_-(q; \omega)$ intersecte l'ensemble de courbes $E_+(q'; \omega)$ pour q et q' arbitraires. Quand $E = 0$ traverse cet espace, il y a sûrement une infinité d'ellipses qui coupent cet axe. Cependant, les instabilités qui sont générées à ces intersections deviennent très faibles et numériquement invisible quand p devient grand.

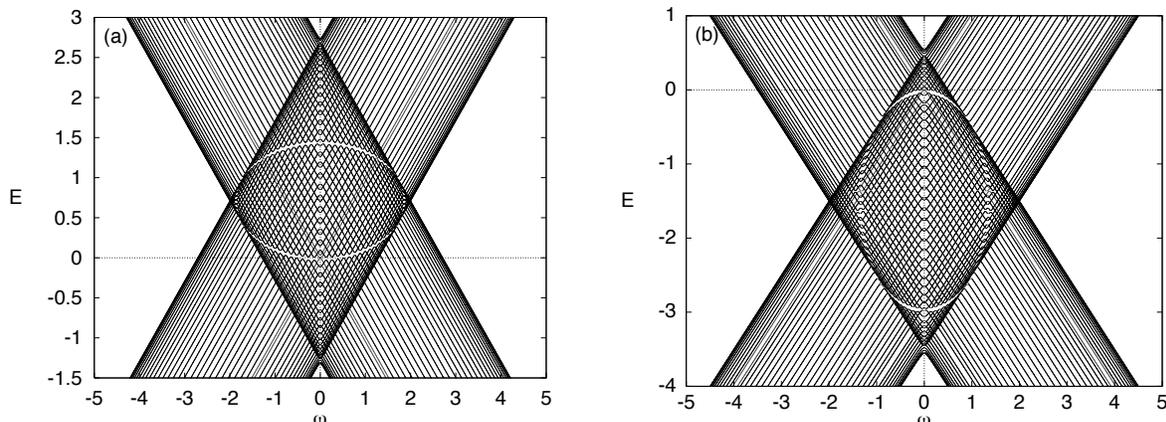


FIG. 3.9 – Spectre de bande de (3.36) pour une onde stationnaire avec (a) $Q/2\pi = 17/89 \simeq \sigma_G/2$ ($Q < \pi/2$), $\delta' = 1.23$, et (b) $Q/2\pi = 34/89 \simeq \sigma_G$ ($Q > \pi/2$), $\delta' = 3.4$ ($C = 1$). L'ouverture visible de gap se produit sur l'ellipse (3.49) avec $p = 1$.

Puisque $p = 1$ correspond à l'ellipse avec le plus grand gap, la plus forte instabilité sera générée si ces gaps s'ouvrent autour de $E = 0$. Pour $p = 1$ et dans la limite des ondes stationnaires d'amplitude nulle ($f_0 = 0, \delta = \delta_0(Q)$), l'ellipse particulière (3.49) pour

l'intersection (ω_1, E_1) a l'équation :

$$\frac{\omega_1^2}{4C^2 \sin^2 Q} + \frac{(2C \cos Q - E_1)^2}{4C^2 \cos^2 Q} = 1. \quad (3.51)$$

Donc, elle est tangente à l'axe $E = 0$ à $\omega = 0$, et elle se trouve au-dessus (sopra) de $E = 0$ pour vecteurs d'onde $0 < Q < \pi/2$ et au-dessous pour $\pi/2 < Q < \pi$. Quand l'amplitude ϵ_s de l'onde stationnaire est petite mais non zéro, en utilisant les Eqs. (3.19) et (3.40) nous obtenons que, à l'ordre le plus bas en ϵ_s , l'ellipse (3.49) avec $p = 1$ coupe l'axe $\omega = 0$ à $E = -\epsilon_s^2/4$. Donc, en utilisant l'Eq. (3.46) pour calculer les valeurs propres perturbées pour petites mais non-zéro $|\omega_1|$ et $|f_0| \ll |\omega_1|$ nous obtenons, encore en utilisant (3.40), que $E'_{1-} \approx -\epsilon_s^2/2$ et $E'_{1+} \approx 0$ d'ordre ϵ_s^2 quand $|\omega_1|$ est petit mais non-zéro. Donc, quand $0 < Q < \pi/2$ (tel que l'ellipse non-perturbées est au-dessus (=sopra) de l'axe $E = 0$), l'ouverture des gaps se verifie dans la partie plus basse de l'ellipse et elle contourne l'axe $E = 0$ pour quelque interval de $|\omega|$ pres de $\omega = 0$.⁷ STOP As a consequence, *SWs with $0 < Q < \pi/2$ become unstable through first-order oscillatory instabilities* for arbitrarismall amplitude ϵ_s (Fig. 3.9 (a)). By contrast, as for $\pi/2 < Q < \pi$ the unperturbed ellipsis lies below the axis $E = 0$, we expect all first-order gaps outside the immediate neighbourhood of $\omega = 0$ to open *strictly below $E = 0$* . Moreover, as for analytic SWs there are two explicit eigensolutions with $E = 0$ at $\omega = 0$ (the phase mode and the sliding mode, see Appendix ??), there is no gap around $E = 0$ (and consequently no instability) for $\omega = 0$. We also confirmed by numerical calculations (Figs. 3.9 (b) and 3.10 (a)) that no first-order gaps open around $E = 0$, so that for SWs with $\pi/2 < Q < \pi$ *no first-order instabilities* develop. However, it is important to remark that the above estimate based on Eq. (3.46) is not valid in the immediate neighbourhood of $\omega = 0$. Actually, in the zero-amplitude limit $\epsilon_s = 0$, the point $E_1 = 0, \omega_1 = 0$ where the unperturbed first-order ellipse (3.51) is tangent to the axis $E = 0$ is such that $E_{0+}(0) = E_{0-}(0) = 0$, which implies by Eqs. (3.38) that $q = \pm Q$ so that also the first resonance condition (3.44) is fulfilled for $|p| = 1$. Thus, close to the origin $E = 0, \omega = 0$ the two different kinds of gap openings strongly *interfere* with each other at the same order $p = 1$, and thus must be considered simultaneously as described in the Appendix.

Thus, when $\pi/2 < Q < \pi$, the strongest instability appears for the smallest $p > 1$ such that the condition (3.50), which in the zero-amplitude limit reduces to $|\cos pQ| > |\cos Q|$, is fulfilled. An example with $p = 2$ is illustrated in Fig. 3.10. Then, *there always exists a p such that, for arbitrarily small amplitude, the SW is unstable to order p* . Anyway, since the width of the gap openings, and therefore also the maximum instability growth rates, are proportional to $|f_p|$, the instabilities become very weak for Q close to π as the smallest p

⁷Une situation similaire avec instabilité de premier ordre se realise aussi pour toutes les l'ondes stationnaires commensurablee avec $Q \neq \pi$, see Appendix.

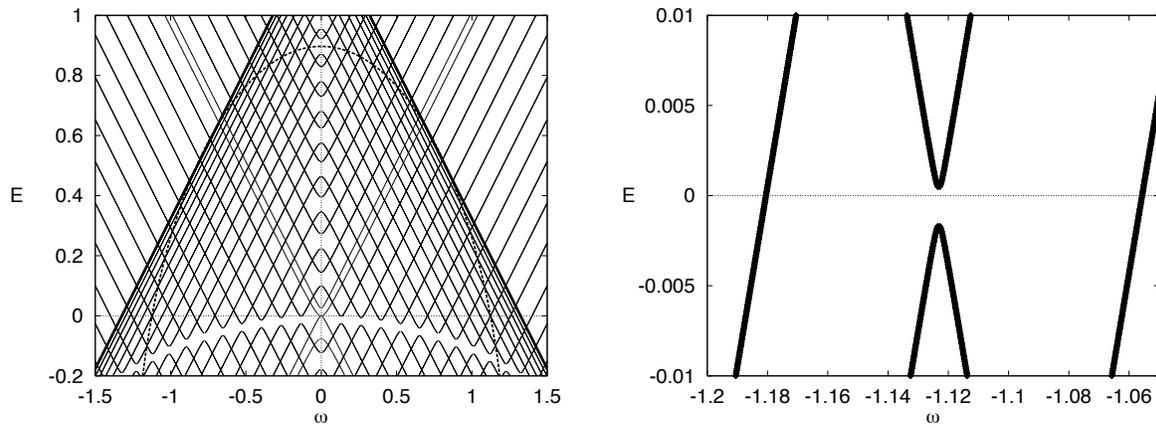


FIG. 3.10 – Part of the band spectrum of (3.36) for a SW with $Q/2\pi = 27/89$ ($Q > \pi/2$) and $\delta' = 2.62$. The thick dashed line in the left figure is the second-order ellipse ($p = 2$ in Eq. (3.49)). Right figure shows a magnification of the part around $E = 0$ where a second-order gap opens.

yielding an instability becomes large, and they could be practically invisible in numerical simulations for finite-size systems. We might therefore describe these analytic SWs as 'quasi-stable'.

Chapitre 4

Dynamique des solutions

Nous allons étudier dans ce chapitre les propriétés de dynamique des ondes stationnaires dans un régime d'instabilité oscillatoire. Pour cela, nous considérerons les ondes stationnaires comme des super-réseaux de discommensurations, selon la description présentée à la Section 3.3.2.1. Nous avons alors appelé discommensuration, dans un potentiel mou, un défaut introduit dans le code de l'onde de vecteur $Q = \pi$, c'est-à-dire un code 0 entre une chaîne de codes ± 1 . Cela signifie ajouter, à la limite anti-continue, un oscillateur au repos entre d'autres qui sont tous en mouvement déphasé. (Dans le cas de potentiel dur, le défaut est introduit dans le code de l'onde de vecteur $Q = 0$). Nous verrons que, quand les discommensurations introduites dans l'onde sont en nombre élevé, nous utiliserons le point de vue opposé, en regardant l'onde comme constituée de breathers isolés (plutôt que des discommensurations) légèrement en interaction.

Dans ce chapitre, nous allons d'abord rappeler les propriétés de dynamique, déjà connues, d'une solution breather simple. En suite, en considérant le domaine d'instabilité oscillatoire, nous analyserons la dynamique pour une seule discommensuration, et enfin, en généralisant à la présence simultanée de plusieurs discommensurations, celle pour une onde stationnaire.

4.1 Dynamique d'un breather simple

Un breather simple est un paquet d'énergie localisée. Néanmoins, dans des conditions particulières, il peut être mis en mouvement et cela concerne les phénomènes de transport d'énergie.

Différentes études ont été effectuées sur la mobilité des excitations localisées de type breather dans des réseaux, par exemple, dans les chaînes FPU [31, 32], dans les réseaux de KG [34], ou dans DNLS [27, 28, 29]. Néanmoins, l'existence des solutions mobiles exactes (c'est-à-dire celles qui se propagent à vitesse constante et sans perte d'énergie) n'a pas

encore été prouvée. T. Cretegnny a étudié numériquement les propriétés de mouvement des breathers, en particulier dans le potentiel de Morse [24]. Nous allons rappeler les résultats les plus importants sur ce sujet, et que nous utiliserons dans la suite.

4.1.1 Breathers mobiles

A la différence des breathers statiques, qui existent dans toutes les chaînes de KG, l'existence des breathers mobiles et leurs propriétés dépendent fortement du potentiel du site. Les résultats de Cretegnny confirment que la mobilité des breathers est particulièrement favorisée dans le potentiel de Morse que nous avons choisi pour notre étude.

4.1.1.1 Mise en mouvement

Cretegnny a trouvé que la possibilité de mettre en mouvement un breather est généralement associée à l'inversion de stabilité entre le breather centré sur un site et celui centré sur deux sites, ainsi qu'à l'existence d'une solution intermédiaire instable dans la (très petite) région d'instabilité commune. A la bifurcation à $+1$, lors de l'inversion de stabilité, est associé une solution des équations linéarisées qui a une symétrie opposée à celle de la solution et une amplitude qui croît linéairement avec le temps. C'est le mode marginal, et si on perturbe le breather le long de ce mode, puisque le déplacement de son centre d'énergie croîtra de façon approximativement linéaire, le breather se mettra en mouvement.

4.1.1.2 Définition comme solutions exactes

En utilisant la définition donnée par Aubry et Cretegnny [26, 24] qui ont calculés numériquement ces solutions, nous appelons

solution breather mobile exacte : une solution des équations de mouvement qui est telle que sa configuration à l'instant initial est exactement retrouvée, décalée d'une maille, après un temps T (l'inverse de la vitesse) :

$$\{u_n, p_n\}(T) = \{u_{n-1}, p_{n-1}\}(0) \quad (4.1)$$

De cette façon, puisque le nombre de vibrations internes durant le temps T doit être entier, la dynamique interne de la solution reste liée à la dynamique de translation. Cette définition a été généralisée par ces mêmes auteurs de façon à considérer tous les breathers mobiles qui, sur un période de translation, effectuent un nombre d'oscillations commensurable à $\frac{1}{2\pi}$, par

$$\{u_n, p_n\}(mT) = \{u_{n-k}, p_{n-k}\}(0) \quad (4.2)$$

avec m et k entiers quelconques.

4.1.1.3 Méthode de calcul

On adapte la méthode de Newton pour le calcul des breathers statiques (Sec 1.6) pour calculer des breathers mobiles qui satisfont l'Eq. (4.1) ou (4.2). Les $2N$ fonctions à minimiser sont maintenant les $\{f_n\} : R^{2N} \rightarrow R^{2N}$, $f_n = u_n(mT) - u_{n-k-1}(0)$, $f_{n+N} = p_n(mT) - p_{n-k-1}(0)$, $n = 1 \dots N$ avec m et k entiers quelconques pour l'Eq. (4.2), et dans le cas particulier de $m = 1$ et $k = 0$ pour l'Eq. (4.1). Un problème supplémentaire se présente car les solutions mobiles ne sont pas invariantes par renversement du temps, et donc la matrice tangente du processus de Newton n'est pas inversible. Il est donc nécessaire d'utiliser la méthode de décomposition en valeurs singulières [33], pour se libérer du mode de Floquet qui, en collisionnant à $+1$, est raison de la non-renversibilité de la matrice.

4.1.1.4 La queue

Une caractéristique fondamentale des breathers mobiles est la présence d'une queue étendue de phonons de petite amplitude. Les vecteurs d'onde q des phonons qui apparaissent dans la queue sont tels que $\omega(q)T - q = 2n\pi$ (n entier) et leur fréquence $\omega(q)$ est donc résonante selon l'Eq. (4.1). En conséquence, les breathers mobiles exactes ne sont pas des solutions strictement localisées (et en effet ils sont mobiles !). En effet ces solutions apparaissent similaires à des phonobreathers qui par contre, comme nous l'avons étudié au chapitre 2, sont des solutions breather immobiles avec une queue infinie de phonons.

4.2 Dynamique des discommensurations

4.2.1 Préliminaires à l'étude de la dynamique pour instabilité oscillatoire

Les propriétés de mobilité pour le breather que nous venons de présenter sont relatives à l'inversion de stabilité du breather simple. La mise en mouvement est donc liée, comme expliqué, au mode marginal qui apparaît au point de bifurcation à $+1$ des valeurs propres (et au mode de pinning avant cette bifurcation).

Nous allons maintenant étudier la dynamique d'une discommensuration, et ensuite des ondes stationnaires, mais dans le régime d'instabilité oscillatoire, qui, comme nous avons vu, est une instabilité de Krein. Le scénario sera donc différent : les valeurs propres ne sont pas en générale proches de $+1$ et les vecteurs propres associés sont complexes conjugués et non pas réels. Nous ne pourrons pas définir, comme pour le breather mobile, le mode marginal avec lequel mettre en mouvement la solution. En tout cas la discommensuration simple, comme

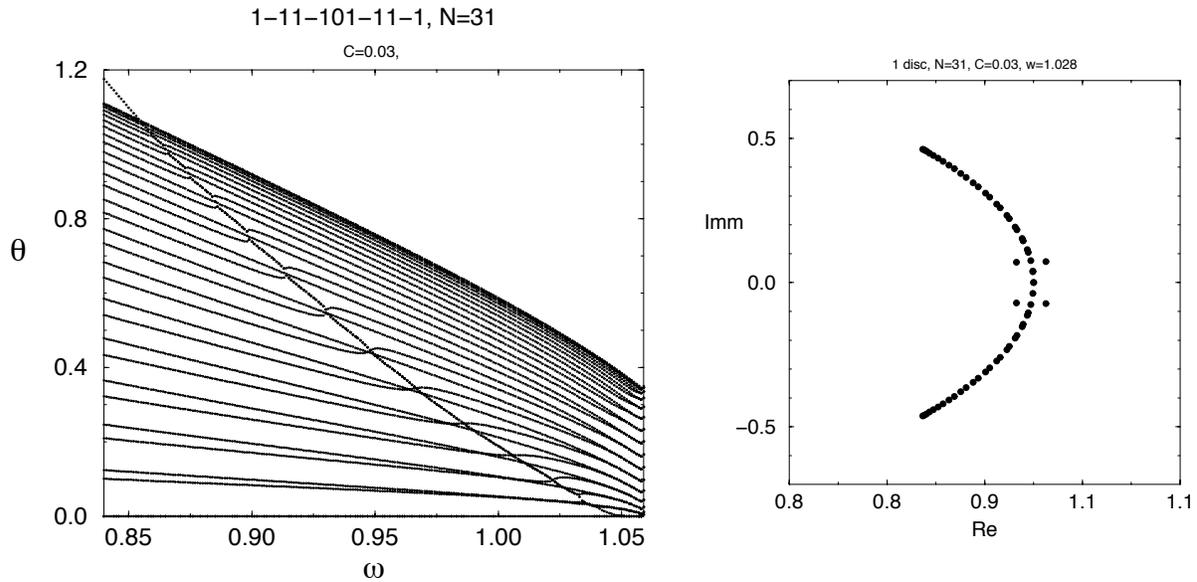


FIG. 4.1 – Multiplicateurs de Floquet pour une discommensuration simple dans une chaîne de KG de $N = 31$ oscillateurs dans le potentiel de Morse, à $C_K = 0.03$. (a) représente leurs arguments entre 0 et π , et (b), pour $\omega_b = 1.028$, les quatre valeurs propres complexes conjuguées qui donnent l’instabilité oscillatoire.

aussi les ondes stationnaires à l’exception de celle à $Q = \pi$ ($Q = 0$), sont instables. Il sera donc suffisant d’imposer une perturbation casuelle pour observer leur mouvement.

Considérons donc, dans une chaîne de KG avec potentiel de Morse, une onde de vecteur $Q = \pi$ avec un code 0 ajouté à $C_K = 0$. Comme montré en Fig. 4.1 cette solution est instable pour une instabilité oscillatoire.

Y. S. Kivshar, M. Johansson et autres, [27, 28] ont trouvé, pour le modèle DNLS, que l’instabilité oscillatoire cause le mouvement de la discommensuration, qui dans ce modèle est plutôt appelée *soliton obscur* (*dark soliton*). Ils ont trouvé qu’elle acquiert une vitesse bien définie pour longtemps, bien qu’elle continue à rayonner et donc décroît. Feddersen [29] a aussi calculé numériquement des solutions exactes qui correspondent à la discommensuration en mouvement avec une certaine vitesse donnée, et ensuite M. Johansson [35] à calculer sa queue étendue, toujours présente, de petites oscillations. Donc, cette solution de discommensuration en mouvement peut aussi être décrite comme une *nanopteron obscur*. Un exemple de soliton obscur en mouvement dans le modèle DNLS est montré en Fig. 4.2.

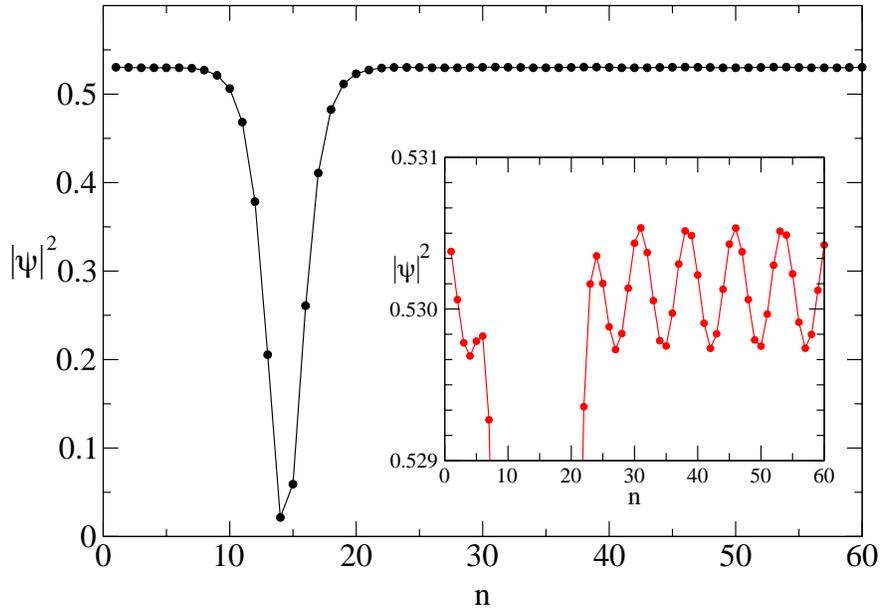


FIG. 4.2 – Amplitude d’un soliton obscur mobile dans le modèle de DNLS (calculée par M. Johansson). Cette solution se déplace d’un site toutes les six unités de temps pendant lesquelles elle effectue une oscillation interne. En insertion, on observe la queue oscillante.

4.2.2 Dans un modèle de KG avec potentiel de Morse

Nous allons maintenant présenter des propriétés de mouvement pour une discommensuration dans une chaîne de KG avec potentiel de Morse.

Le défaut (le code 0) ajouté dans le phonon π et qui constitue la discommensuration, génère une instabilité oscillatoire, qui est causée par quatre valeurs propres complexes conjugués (Fig. 4.1 (b)).

Analysons les propriétés de symétrie du vecteur propre associé à l’instabilité. En effet, puisque nous sommes dans le potentiel de Morse qui n’est pas symétrique, nous ne pouvons pas parler réellement de symétrie de la solution. Donc, comme expliqué dans la Section 1.24 nous ferons référence à la symétrie locale de signe de la solution¹ qui reflète les propriétés de symétrie de sa séquence codante (qui elle, définie à la limite anti-continue à une symétrie précise à la différence de la solution à $C_K \neq 0$). En utilisant le mot “symétrie” avec cette signification, pour les solutions dans le potentiel asymétrique de Morse, nous observons que les vecteurs propres associées aux valeurs propres instables, ont une symétrie opposée à la solution autour du site de discommensuration (Fig. 4.3). Ils constituent donc le mode instable (que nous pouvons considérer comme un mode de pinning en sens large), dans la

¹Si nous associons le signe + or - aux points respectivement de maximum ou de minimum local de l’amplitude de l’onde, nous obtenons une séquence de signes à laquelle nous pouvons associer une symétrie

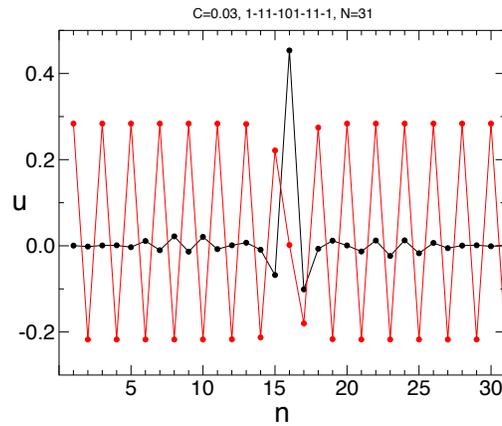


FIG. 4.3 – Amplitudes de la discommensuration (courbe rouge) et du vecteur propre relatives à l’instabilité, dans une chaîne de KG de $N = 31$ oscillateurs avec potentiel de Morse, pour $C_K = 0.03$ et $\omega_b = 1.028$.

direction duquel nous pouvons perturber la solution pour la mettre en mouvement. En effet, la discommensuration est déjà instable, et la simple imposition d’une petite perturbation aléatoire croîtra toute seule dans la direction du mode instable. La solution se mettra en mouvement toute seule, après des temps plus ou moins longs, nécessaires pour que l’instabilité croisse suffisamment jusqu’à un certain seuil critique, après lequel le mouvement oscillatoire de la discommensuration commencera. Par contre, si nous imposons une perturbation (plus ou moins forte) dans la direction du mode instable, nous forcerons la croissance de l’instabilité directement dans la bonne direction en faveur de la mise en mouvement. Celle-ci se manifeste donc très vélocement, et plus tôt elle commence, plus la perturbation est grande (Fig. 4.4). En effet, une perturbation $\epsilon(t)$ croît de façon exponentielle ($\epsilon(t) \sim |v|_{max}^{t/t_b}$, avec $t_b = 2\pi/\omega_b$, et $|v|_{max}$ est la valeur absolue de la plus grande valeur propre), et donc le temps d’attente t_m pour la mise en mouvement est proportionnel à l’inverse du logarithme du $|v|_{max}$, $t_m \sim \frac{t_b}{\ln |v|_{max}}$. Par contre, on observe aussi que la vitesse de mouvement acquise par la discommensuration est indépendante de la perturbation, et donc du temps t_m de sa mise en mouvement (Fig. 4.4).

Comme il est montré en Fig. 4.5, si nous analysons plus en détail la dynamique d’une discommensuration dans la région d’instabilité oscillatoire, nous pouvons typiquement distinguer trois régimes. Initialement, les petites perturbations augmentent exponentiellement et ils produisent un comportement oscillatoire de la discommensuration (Fig. 4.5 (a) et (c)). Quand l’amplitude d’oscillation arrive à un certain seuil, le mouvement de la discommensuration devient translationnel avec une vitesse qui augmente graduellement dans le temps. Ensuite, à long temps, le mouvement perd graduellement sa composante translationnelle,

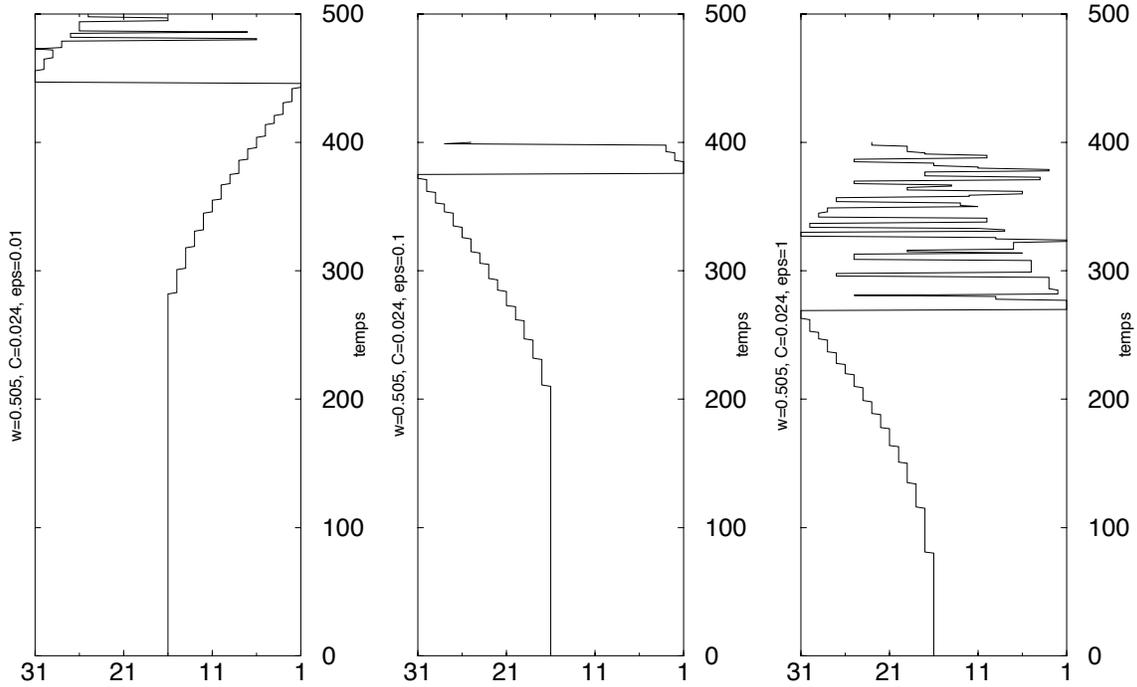


FIG. 4.4 – Mouvement d’une discommensuration, visualisé par le déplacement de la position du minimum de l’énergie de chaque oscillateur dans une chaîne de $N = 31$ oscillateurs, avec potentiel de Morse à $C_K = 0.024$ et $\omega_b = 0.505$. On impose une perturbation d’amplitude (a) $\epsilon = 0.01$, (b) $\epsilon = 0.1$, (c) $\epsilon = 1$.

gagne de fortes oscillations et enfin devient, au moins pour un système de petite taille, apparemment chaotique (Fig. 4.5 (b) et (d)).

4.3 Dynamique des ondes stationnaires

Etudions maintenant la dynamique d’une onde stationnaire, en utilisant les résultats obtenus pour la dynamique de la discommensuration simple. En plus, il faudra maintenant tenir en compte du fait que les discommensurations sont en interaction entre elles.

Dans notre analyse, nous observerons un comportement qualitativement différent selon la valeur du vecteur d’onde, inférieure ou supérieure à $\pi/2$. En effet, la description d’une onde stationnaire comme super-réseau de discommensurations présentée en Sec. 3.3.2.1 s’applique parfaitement au cas $Q > \pi/2$ pour un potentiel mou. Par contre, dans un potentiel mou, si $Q < \pi/2$, la séquence codant de l’onde stationnaire contient des zéros consécutifs et donc les discommensurations dans l’onde stationnaire initiale ne sont pas isolées. Il est donc naturel, dans le cas de Q petit, d’interpréter l’onde stationnaire comme composée de breathers indi-

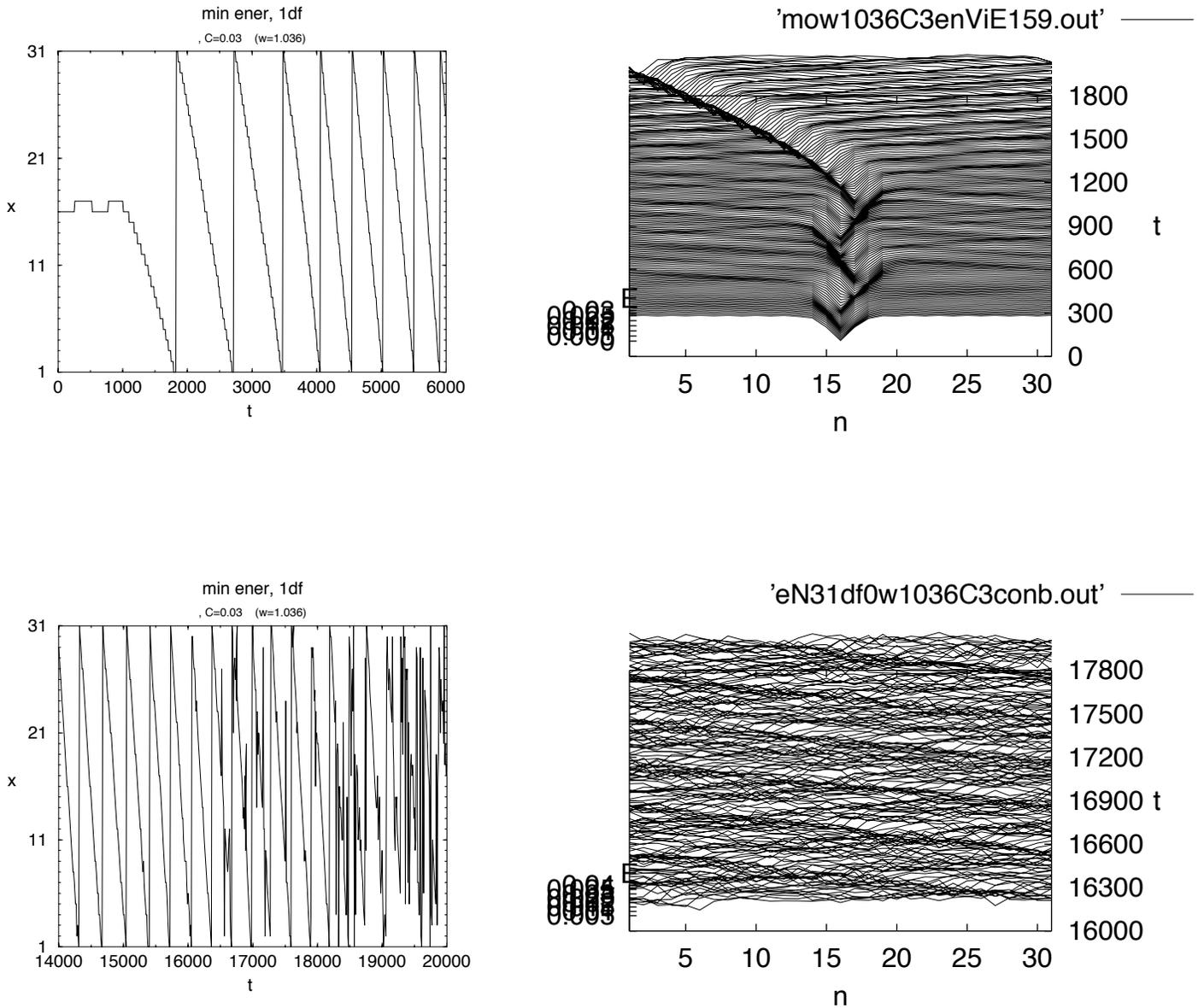


FIG. 4.5 – Evolution en temps (calculée en nombre de périodes de la solution initiale) de ((a) et (b)) la position du minimum et de ((c) et (d)) l'amplitude, de l'énergie totale de chaque oscillateur, pour une chaîne de KG légèrement perturbée dans un potentiel de Morse, initialement à $C_K = 0.03$ et $\omega_b = 1.036$. Le minimum indique la position de la discommensuration. En (a) et (b) on observe le régime oscillatoire initial et le régime translationnel, en (c) et (d) le régime translationnel et le final, qui devient pratiquement chaotique.

viduels qui correspondent chacun à un site avec code ± 1 . En diminuant la valeur de Q vers zéro, ces breathers individuels seront de plus en plus loin, puisque le nombre de zéros dans le code augmente.

4.3.1 Régime oscillatoire

Quand l'amplitude des petites perturbations (numériques ou que nous imposons dans la direction du mode instable) qui augmentent de façon exponentielle à cause de l'instabilité, arrive à une certaine valeur critique, les discommensurations dans une onde stationnaire commencent à osciller autour de leur site (définie par les positions des codes 0 dans le code de l'onde) comme en Fig. 4.6.

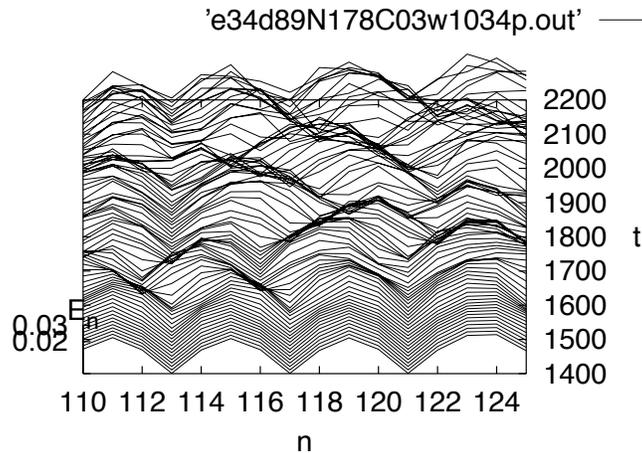


FIG. 4.6 – Evolution en temps de l'énergie totale d'une partie d'une onde stationnaire avec $Q/2\pi = 34/89$ dans une chaîne de KG à $C_K = 0.05$ et $\omega_b = 1.034$. On observe le régime oscillatoire initial des discommensurations simples.

4.3.2 Régime translationnel

Par analogie au comportement rencontré pour la discommensuration simple, un régime intermédiaire principalement translationnel peut être prévu même pour les ondes stationnaires, comme montré en Fig. 4.7. En effet, quand l'amplitude d'oscillation arrive à un seuil critique, chaque discommensuration dans l'onde stationnaire commence à translater. Cependant le comportement de l'onde stationnaire entière se manifeste de façon différente selon ses propriétés d'analyticité.

Pour les ondes stationnaires non-analytiques, comme montré en Fig. 4.7 (a) et (c), le mouvement translationnel des discommensurations est inhomogène, et l'onde reste localement cohérente même si ses différentes parties se déplacent les unes par rapport aux autres. Le comportement dans ce deuxième régime, à l'exception de ses parties initiales et finales, est similaire à des particules rigides qui rentrent en collision, et il est signe d'une interaction à courte portée entre les discommensurations. Par contre, aux extrêmes de cette région le comportement est assez différent, et cette analogie n'est plus valable. En effet, au commencement du mouvement translationnel, il n'y a pas une définition claire des discommensurations car, comme on observe en Fig. 4.7 (c) et (d), des discommensuration naissent ou disparaissent. A la fin de ce régime, les discommensurations ne sont pas conservées en nombre, puisque certaines fusionnent entre elles et donc disparaissent.

Avec l'évolution du temps, le mouvement de chaque discommensuration devient indépendant avec, en plus, une augmentation des vitesses et des changements de direction, tant qu'il devient enfin presque chaotique. On observe aussi que les discommensurations décroissent lentement en amplitude, et elles deviennent donc moins clairement définies et plus diffuses. On rentre donc dans le troisième et dernier régime, que nous analyserons ensuite.

Pour les ondes stationnaires analytiques (Fig. 4.7 (b) et (d)) le comportement est assez différent. Nous observons en effet que dans ce régime intermédiaire les discommensurations se déplacent plus au moins simultanément et restent bien séparées entre elles. Le mouvement est presque homogène et bien ordonné. Ce scénario, qui apparaît presque comme une translation de l'ensemble en bloc, est un signe d'une interaction à très longue portée entre les discommensurations [37]. ?? Ce mouvement simultané des discommensurations est lié au fait que la longueur d'onde du vecteur propre instable est proche de $Q = 0$. ?? Avec le temps, le mouvement devient de plus en plus erratique, avec de brusques changements de direction et augmentations de vitesse, et les discommensurations commencent à collisionner et perdent enfin leur cohérence.

Nous observons aussi que dans le cas analytique, par rapport à celui non-analytique, l'évolution de l'instabilité est très lente. Nous pouvons donc considérer cette onde comme "quasi-stable", comme nous avons fait dans la Sec. 3.4.4. En effet les instabilités plus fortes apparaissent seulement à l'ordre $p = 4$, selon l'Eq. (3.50).

Pour le cas d'ondes stationnaires avec $Q < \pi/2$, si nous considérons l'onde comme composée de breathers simples en correspondance des sites de code +1, plutôt que constituée de l'ensemble des nombreuses discommensurations, le régime intermédiaire peut être interprété comme le mouvement de ces breathers simples qui rentrent en collision entre eux de façon inélastique (Fig. 4.8). Nous observons comme, avec l'évolution en temps, les collisions entre breathers amènent à leur fusion en faveur de la survivance des plus grands.

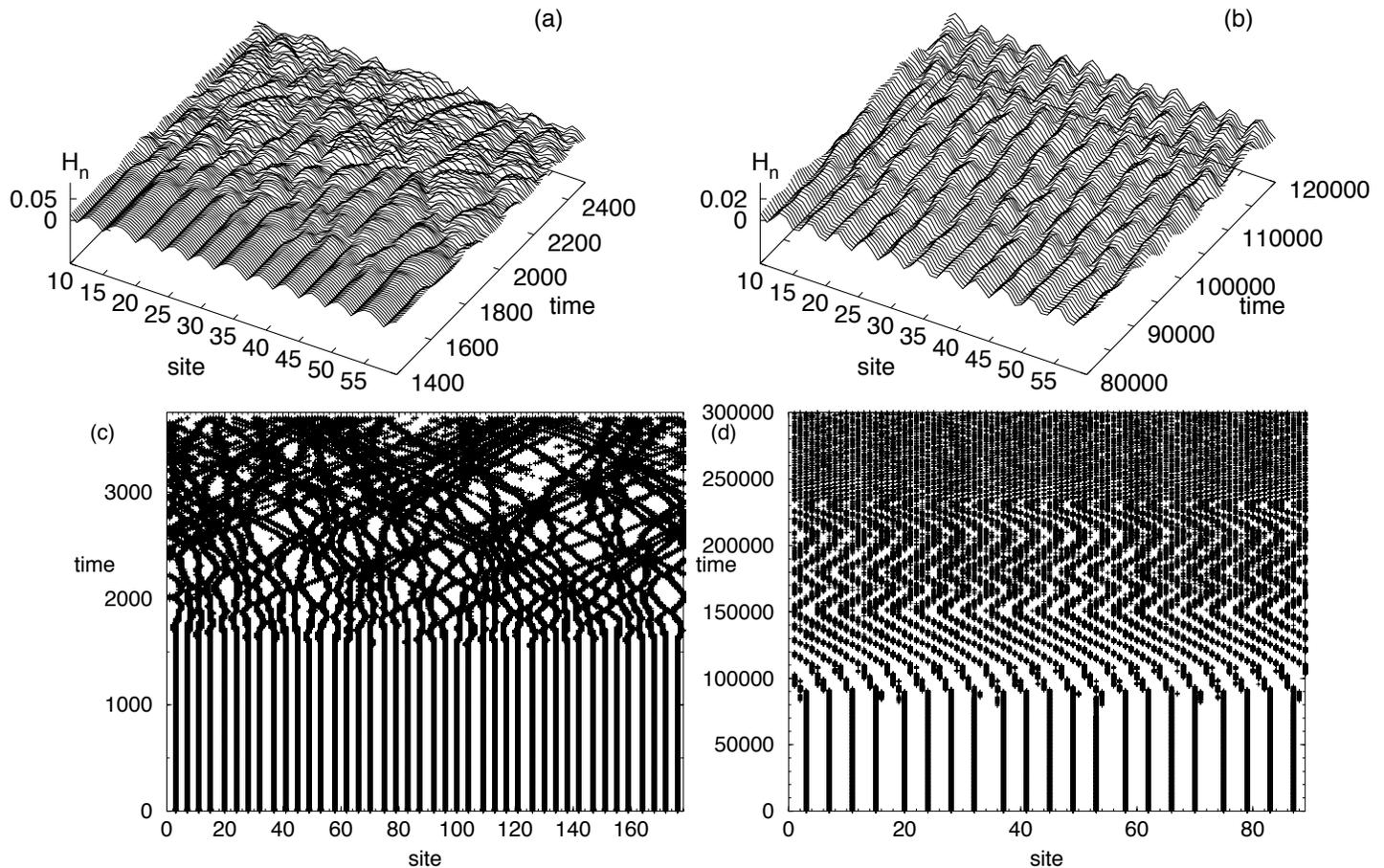


FIG. 4.7 – Evolution en temps sur échelles de temps courtes et intermédiaires, de part des ondes stationnaires légèrement perturbées avec $Q/2\pi = 34/89 \approx \sigma_G$ dans une chaîne de KG (1.3) de $N = 178$ oscillateurs avec potentiel de Morse à (a),(c) $C_K = 0.03$ et $\omega_b = 1.034$ (cas non-analytique, onde de type H), et (b),(d) $C_K = 0.05$ et $\omega_b = 1.075$ (cas analytique). (a) et (b) montrent l'énergie totale de chaque oscillateur, (c) et (d) l'évolution et l'interaction des 'discommensurations', définie comme les sites où l'énergie est (c) $H_n < 0.01$ et respectivement (d) $H_n < 0.00232$ (correspondant aux sites de code 0 pour les ondes initiales).

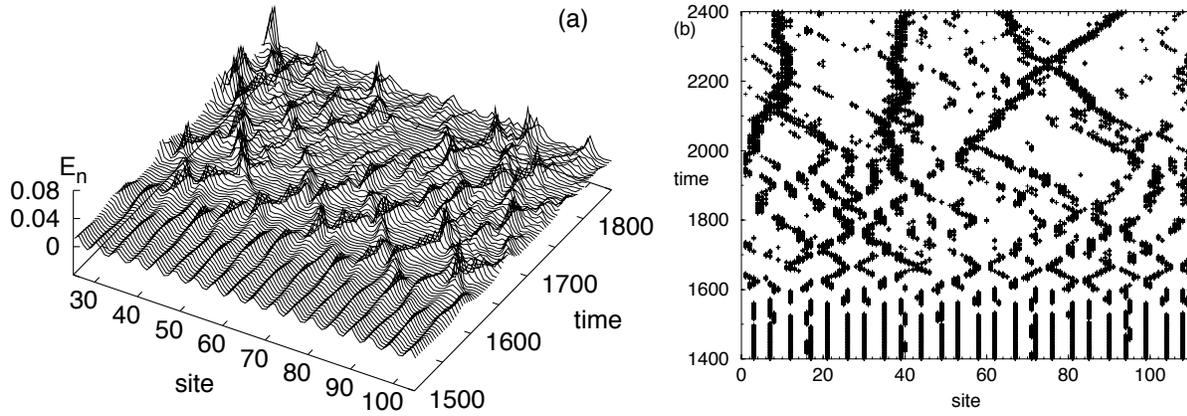


FIG. 4.8 – Evolution en temps sur échelles de temps courtes et intermédiaires de parts d’une onde stationnaire avec $Q = 12\pi/55$ ($< \pi/2$) et $\omega_b = 1.0015$ (qui correspond à une onde analytique dans la limite incommensurable) légèrement perturbée, dans une chaîne de KG (1.3) avec potentiel de Morse à $C_K = 0.05$. (a) illustre l’énergie totale de chaque oscillateur, (b) l’évolution en temps et l’interaction des sites de haute énergie (‘breathers’), définis comme les sites où l’énergie est $H_n > 0.012$ (qui correspondent aux sites avec code ± 1 pour l’onde stationnaire initiale).

4.3.3 Régime asymptotique

Dans tous les cas présentés, nous avons observé qu’à la fin du régime translationnel et donc, en entrant dans le régime final asymptotique, le mouvement général des discommensurations perd sa cohérence en devenant pratiquement chaotique. Nous allons analyser la nature des états asymptotiques à long temps pour différents vecteurs d’onde Q .

Commençons par présenter des résultats déjà connus sur les propriétés de la thermalisation d’un système DNLS.

4.3.3.1 Thermalisation ou formation des breathers pour DNLS

L’équation DNLS (3.11), à différence des autres équations pour les réseaux non-linéaires, a la particularité d’avoir en plus à l’Hamiltonien

$$\mathcal{H}(\{\psi_n\}, \{-i\psi_n^*\}) = \sum_{n=1}^N \left(-\delta |\psi_n|^2 + \frac{\sigma}{2} |\psi_n|^4 + C |\psi_{n+1} - \psi_n|^2 \right) \quad (4.3)$$

aussi une deuxième quantité conservée, la *norme*

$$\mathcal{N} = \sum_{n=1}^N |\psi_n|^2. \quad (4.4)$$

Il a été récemment démontré par Rasmussen et autres [30] que, pour cette équation, la nature de la dynamique au régime asymptotique, avec des conditions initiales H et N complètement générales, dépend de la valeur des deux quantités conservées. Il existent, évidemment, des valeurs particulières des conditions initiales pour lesquelles le comportement sera différent (par exemple, si on considère l'onde stationnaire exacte sans la perturber, elle persistera pour toujours). Pour reporter la notation utilisée par les auteurs de [30] à celle que nous avons utilisée, nous pouvons redéfinir l'Hamiltonien (4.3) par $\mathcal{H}' = \mathcal{H} + (\delta - 2C)\mathcal{N}$ (qui équivaut à appliquer une transformation de gauge $\psi_n \rightarrow \psi_n \epsilon^{-i(\delta - 2C)t}$ aux variables conjuguées $\{\psi_n\}, \{-i\psi_n^*\}$). Dans cette notation, ils ont trouvé que, à la limite thermodynamique $N \rightarrow \infty$, une transition de phase se manifeste le long de la courbe

$$\frac{\mathcal{H}'}{N} = \sigma \left(\frac{\mathcal{N}}{N} \right)^2. \quad (4.5)$$

d'un coté de cette ligne (au-dessous pour $\sigma > 0$ et au-dessus pour $\sigma < 0$), le système thermalise en sens standard de Gibbs avec une température et un potentiel chimique bien définis. La fonction de distribution de probabilité à l'équilibre (PDF) pour $|\psi_n|^2$ décroît rapidement pour $|\psi_n|^2$ grands et donc les excitations de grandes amplitudes sont très improbables. Cependant, de l'autre coté de la courbe (4.5) le système manifeste un comportement du type à *température négative* où la PDF pour $|\psi_n|^2$ acquière une courbure positive. Cela correspond à la création des breathers stationnaires qui persistent, localisés, avec de grandes amplitudes. La ligne de transition de phase correspond à la limite de température infinie dans le sens de Gibbs, et elle est obtenue en considérant que chaque site thermalise indépendamment, c'est-à-dire en négligeant les termes de couplage dans l'Hamiltonien.

4.3.3.2 Comportement des ondes stationnaires

Pour notre cas en étude, nous observons que, pour une onde stationnaire de type H avec $Q = \pi/2$, le terme de couplage est exactement zéro car selon la séquence codant (3.22) cette onde doit avoir la structure $\psi_{2m+1} = (-1)^m \sqrt{\frac{\delta}{\sigma}}$, $\psi_{2m} = 0$ pour tous δ . Donc, *l'onde stationnaire avec $Q = \pi/2$ se trouve exactement sur la ligne de transition de phase (4.5)*. En conséquence, comme montré en Fig. 4.9, les ondes stationnaires de type H avec un certain vecteur Q appartiennent toujours à la même phase, indépendamment de la valeur de δ' . En plus, *les ondes stationnaires avec $Q < \pi/2$ et celles avec $Q > \pi/2$ appartiennent toujours à deux phases différentes.*²

²Il est intéressant de remarquer que les ondes progressives ne présentent pas ce type de comportement. En effet, pour certains vecteurs d'onde Q , elles peuvent traverser la ligne de transition (4.5) quand l'amplitude est changée [30].

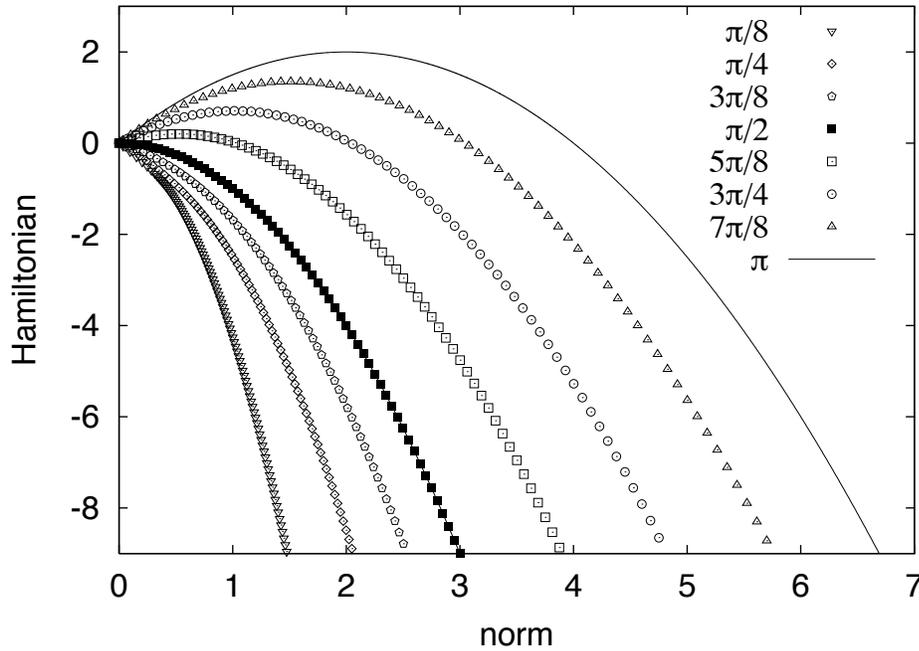


FIG. 4.9 – Hamiltonien moyenné \mathcal{H}'/N par rapport à la norme moyennée \mathcal{N}/N pour une onde stationnaire de type H dans le modèle de DNLS ($\sigma = -1, C = 1$) avec vecteur d'onde (de gauche à droite) $Q = \pi/8, \pi/4, 3\pi/8, \pi/2, 5\pi/8, 3\pi/4, 7\pi/8$, et π . Les points correspondants à $Q = \pi/2$ (carrés pleins) coïncident exactement avec la ligne de transition de phase (4.5). (Tirée de [21]).

En considérant une onde stationnaire de vecteur $Q = \pi r'/s'$ comme un multi-breather avec r' breathers (ou, de façon équivalente, $s' - r'$ discommensurations) dans chaque (demi-)période de s' sites, il a été obtenu [21] que près de la limite anti-continue (c'est-à-dire, asymptotiquement pour \mathcal{N}/N grande) :³

$$\frac{\mathcal{H}'}{N} \approx \sigma \frac{s'}{2r'} \left(\frac{\mathcal{N}}{N} \right)^2 + 2C \frac{2r' - s'}{r'} \Theta(2r' - s') \left(\frac{\mathcal{N}}{N} \right), \quad (4.6)$$

où $\Theta(x)$ est la fonction marche ($\Theta(x) = 0$ pour $x < 0$, $\Theta(x) = 1$ pour $x > 0$).

Donc, dans l'approximation DNLS et avec un potentiel mou ($\sigma = -1$), pour un système de grande taille les ondes stationnaires de type H avec $Q > \pi/2$ doivent avoir un état asymptotique thermalisé, donc avec équipartition d'énergie, pour tous les états initiaux instables perturbés. Par contre, pour les ondes stationnaires avec $Q < \pi/2$, dans l'état asymptotique, on aura création des breathers isolés et persistantes. Le scénario opposé se manifeste dans le cas de potentiel dur.

³Cette expression est exacte pour $Q = \pi/2$ et $Q = \pi$.

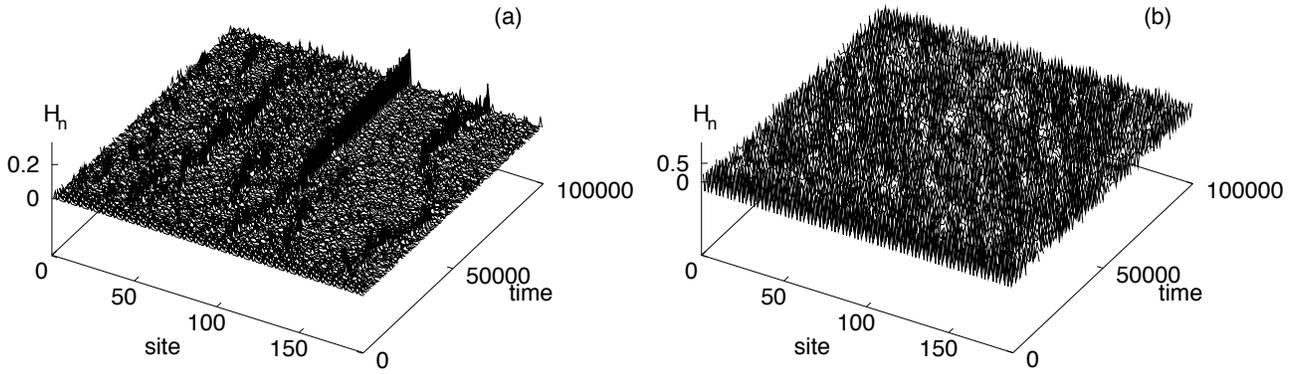


FIG. 4.10 – Dynamiques à long temps d’une onde stationnaire de type H , instable et légèrement perturbée, dans un réseau de KG avec potentiel de Morse avec $C_K = 0.035$ et $N = 189$. (a) montre la formation de breathers pour $Q = 2\pi/7 < \pi/2$ et $\omega_b = 0.995$, tandis que (b) montre la thermalisation pour $Q = 6\pi/7 > \pi/2$ et $\omega_b = 1.035$.

Nous avons confirmé cette théorie par une simulation numérique. En effet, dans le cas des vecteurs Q proches mais inférieurs à $\pi/2$, il est nécessaire que la taille N du système soit assez grande pour permettre la formation des breathers. En tout cas, nous confirmons numériquement que même pour le réseau original de KG pour de petits couplages, une transition entre phase thermalisée et “phase breather” est présente à $Q = \pi/2$, comme montré en Fig. 4.10.

Néanmoins, les résultats dérivés en [30] dépendent de façon cruciale de l’existence de la deuxième quantité conservée, la norme, et donc il est naturel de s’interroger sur l’existence réelle de cette transition aussi dans un autre modèle que DNLS. En particulier, il peut être mis en cause si la phase-breather, qui nous avons observé pour le modèle de KG, décrit seulement la dynamique sur des temps longs mais finis, ou si asymptotiquement une thermalisation finale est toujours présente. En tous cas, sur les échelles de temps que nous avons pu suivre numériquement nous n’avons vu aucun signe de décroissance des breathers. Il est donc clair que la transition de phase obtenues dans l’approximation DNLS a une forte validité même pour la dynamique à temps long dans le modèle de KG.

Troisième partie

Systeme de KG hors de l'approximation DNLS

Chapitre 5

Introduction

Nous retournons maintenant au modèle original de KG (1.3), et nous allons étudier numériquement la validité de nos résultats précédents, quand les conditions de petites amplitudes et de petits couplages ne sont pas nécessairement satisfaites. En générale, quand l'amplitude des ondes stationnaires n'est pas négligeable, la dynamique sera aussi influencée par les harmoniques $a_n^{(p)}$ avec $|p| \neq 1$ dans l'expansion de Fourier (3.2). De plus, comme déjà mentionné dans la Sec. 3.2.1 en connexion avec les Eqs. (3.7)-(3.10), quand le couplage C_K augmente, les termes non-linéaires d'interaction à grande distance dans l'équation DNLS généralisée deviennent non négligeable. En conséquence, la dynamique sera en général aussi influencée à petites amplitudes. En particulier si des harmoniques d'ordre supérieurs de la solution rentrent dans la bande des phonons linéaires, on peut aussi avoir des résonances pour des ondes stationnaires de petite amplitude.

Nous allons encore considérer les cas particuliers de potentiel mou de Morse (1.7) et de potentiel dur quartique (1.8). Comme nous avons décrit dans la Sec. 3.3, les ondes stationnaires sont obtenues par continuation numérique d'un multibreather avec séquence codant définie par les Eqs. (3.21)-(3.22) pour le cas de potentiel mou. Pour le cas de potentiel dur, les équations doivent être modifiées selon 1.24. Une méthode de Newton modifié [36] (voir Section. 1.6) est utilisé pour calculer numériquement ces solutions $\{u_n(t)\}$, qui sont exactes, symétriques par renversement du temps et avec une période temporelle $T_b = 2\pi/\omega_b$.

5.1 Stabilité linéaire pour un system de KG à petits couplages

La stabilité linéaire de ces solutions hors de l'approximation DNLS et à small C_K est déterminée par la théorie de Floquet présenté en paragraphe 1.4.1. On observe donc qu'à

la limite anti-continue $C_K = 0$, à chaque site de code $|\tilde{\sigma}_n| = 1$ correspond un couple de valeurs propres dégénérées à $+1$, tandis qu'à chaque code $\tilde{\sigma}_n = 0$ correspond un couple de valeurs propres complexes conjuguées à $e^{\pm i2\pi/\omega_b}$. Quand on augmente C_K depuis la valeur zéro, les dégénérescences sont enlevées et le mouvement des valeurs propres est analogue au cas de DNLS discuté dans le chapitre précédent. Pour les ondes stationnaires de type H toutes les valeurs propres restent initialement sur le cercle unitaire, en constituant des bandes dans le cas commensurable, et un spectre de Cantor dans le cas incommensurable, comme pour le model DNLS. La stabilité linéaire est donc préservée juste à la première instabilité oscillatoire, qui se manifeste par une collision sur le cercle unitaire entre valeurs propres de signature de Krein différent, et provenant de $+1$ et $e^{\pm i2\pi/\omega_b}$ respectivement. Pour les ondes stationnaires de type E , des couples de valeurs propres qui proviennent de $+1$ sortent sur l'axe réel dès que $C_K > 0$. Donc, en général, le scénario d'instabilité que nous observons pour le modèle de KG est égal à celui pour le modèle de DNLS, tant que les amplitudes et le couplage restent petits et n'apparaissent pas des résonances d'ordre supérieur.

Le scénario hors de ce régime est pourtant assez différent pour le potentiel dur quartique et pour le potentiel mou de Morse. Nous allons donc présenter ces deux cas séparément.

Chapitre 6

Le potentiel quartique

Commençons par analyser les ondes stationnaires de vecteur d'onde Q dans le potentiel quartique dur, (1.8). Comme nous avons vu précédemment, ces ondes auront une fréquence $\omega_b > \omega_l(Q) > 1$ (depuis l'Eq. (1.6) et Fig. 3.5).

6.0.1 Propriétés de symétrie

Le cas du potentiel quartique (1.8) est assez simple, par le fait qu'il est un potentiel de site spatialement symétrique, $V(u) = V(-u)$. En conséquence, les solutions périodiques en temps avec période fondamentale $T_b = 2\pi/\omega_b$ satisfont la relation

$$u_n(t + T_b/2) = -u_n(t). \quad (6.1)$$

Cela signifie que les solutions, qui sont symétriques par renversement du temps, sont aussi anti-symétriques par rapport à $t = T_b/4$, comme montré en Fig. 6.1 (a)). Nous pouvons donc utiliser cette propriété pour restreindre l'algorithme numérique de Newton de façon à chercher les solutions qui satisfont la condition (6.1). Il est important d'observer que toutes les harmoniques d'ordre supérieur pair de la solution, c'est-à-dire, avec période T_b/p , avec p pair, ne satisfont pas la condition (6.1). Cela signifie qu'il ne peut pas y avoir des résonances avec les harmoniques paires qui puissent déranger la continuation unique de l'onde stationnaire. En effet, comme nous avons déjà remarqué dans le paragraphe 3.2.1, il n'y a pas de couplage entre harmoniques paires et impaires de la solution pour le potentiel quartique, puisque la symétrie de ces harmoniques est opposée autour de $t = \frac{T_b}{2}$ (voir Fig. 6.1). Les harmoniques paires et impaires appartiennent donc à différents groupes de translation dans le temps : par une translation de demi-période $T_b/2$ pour les harmoniques paires les amplitudes se superposent ($u \rightarrow u$), tandis que pour les harmoniques impaires elles sont opposées ($u \rightarrow -u$).

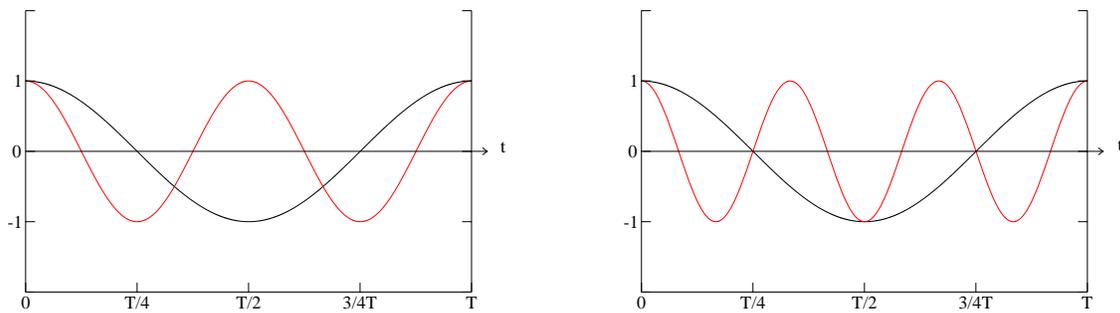


FIG. 6.1 – Amplitudes (renormalisées) des harmoniques d’une onde stationnaire dans une période T . La courbe rouge représente en (a) la deuxième harmonique et en (b) la troisième harmonique, tandis que la courbe noire représente l’harmonique fondamentale. Les propriétés de symétrie autour de $T/4$ de la figure (a) (resp. (b)) sont valables pour toutes les harmoniques d’ordre pairs (resp. impair). En effet, on observe que, par rapport à $T/4$, les harmoniques impaires ont la même symétrie que la fondamentale, tandis que les harmoniques paires ont une symétrie opposée.

De plus, puisque pour le potentiel quartique dans les équations de Hill (1.4) $V''(u_n)$ a une période fondamentale $T_b/2$ plutôt que T_b , il est très convenable, pour une meilleure interprétation du spectre de Floquet, de redéfinir la matrice de Floquet (1.20) comme

$$\begin{pmatrix} \{-\epsilon_n(T_b/2)\} \\ \{-\dot{\epsilon}_n(T_b/2)\} \end{pmatrix} = \mathbf{F}'_0 \begin{pmatrix} \{\epsilon_n(0)\} \\ \{\dot{\epsilon}_n(0)\} \end{pmatrix}. \quad (6.2)$$

De cette façon, les valeurs propres de \mathbf{F}'_0 qui correspondent aux sites avec code $\tilde{\sigma}_n = 0$ à la limite anti-continue seront situées à $e^{\pm i\pi/\omega_b}$, c’est-à-dire, à un angle qui est la moitié par rapport à celle des valeurs propres correspondantes de \mathbf{F}_0 . Le cercle de Floquet est donc replié d’un facteur deux.

Dans l’Appendice A seront présentés les détails numériques pour la construction des ondes stationnaires ayant une symétrie particulière imposée.

6.0.2 Conditions pour les résonances

Considérons maintenant des solutions de petite amplitude à la limite anti-continue, et augmentons par continuation le couplage C_K . Nous trouvons, pour différents vecteurs d’onde Q , trois scénarios qualitativement différents selon le cas où la deuxième et/ou la troisième harmonique de la fréquence ω_b de l’onde stationnaire rentre ou non dans la bande linéaire des phonons. En général, la condition que la p -ième harmonique d’une onde stationnaire de

vecteur d'onde Q rentre dans la bande des phonons, peut être écrite comme

$$\sqrt{1 + 4C_K \sin^2 \frac{Q}{2}} < \omega_b < \frac{1}{p} \sqrt{1 + 4C_K}. \quad (6.3)$$

(voir Fig. 6.6 pour $p = 3$). Cette condition peut être satisfaite seulement quand

$$\sin \frac{Q}{2} < \frac{1}{p} \quad \text{and} \quad C_K > \frac{p^2 - 1}{4(1 - p^2 \sin^2 \frac{Q}{2})}. \quad (6.4)$$

6.1 Sans résonances

Selon l'Eq. (6.4) pour $p = 2$, les ondes stationnaires de vecteur d'onde $Q > \pi/3$ ne présentent pas de résonance d'ordre supérieur. Dans ce cas, l'onde stationnaire peut être continuée (comme illustré en Fig. 6.5 (a)) par rapport à C_K à une fréquence fixée ω_b sans bifurcation jusqu'à sa limite linéaire $C_K = \frac{\omega_b^2 - 1}{4 \sin^2 \frac{Q}{2}}$ (où $\omega_b = \omega_l(Q)$ selon (1.6)). Le scénario d'instabilité le long de cette continuation est complètement analogue à celui observé dans l'approximation de DNLS discutée dans le chapitre précédent, même quand ω_b est loin de 1. Le comportement des ondes pour $Q > \pi/3$ est donc comme une extension de l'approximation DNLS même pour des grandes amplitudes. En Fig. 6.2 sont présentés l'amplitude et les multiplicateurs de Floquet pour la continuation d'une onde stationnaire de vecteur $Q = 2/7\pi > \pi/3$, depuis la limite anti-continue jusqu'à la limite linéaire.

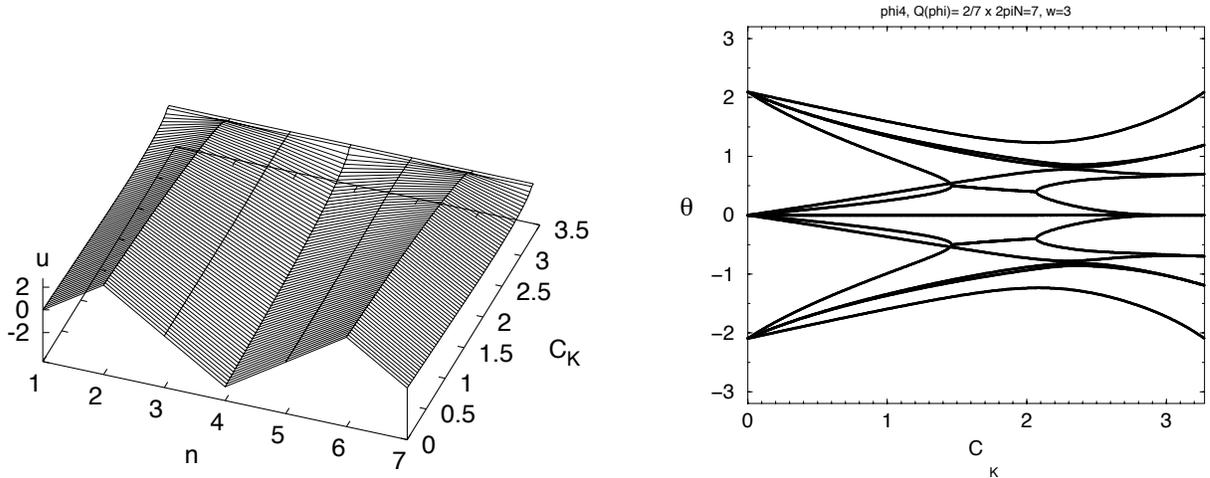


FIG. 6.2 – (a) amplitudes et (b) arguments des valeurs propres de F'_0 , pour une onde stationnaire de type H avec vecteur $Q = 2/7\pi > \pi/3$, dans un système de taille $N = 7$, avec le potentiel quartique (1.8), $\omega_b = 3.0$, et en augmentant C_K . La continuation est effectuée sans collision à $+1$ depuis $C_K = 0$ et jusqu'à la limite linéaire.

6.2 Résonance avec la deuxième harmonique

Pour les ondes stationnaires avec $Q < \pi/3$, si la fréquence ω_b est suffisamment grande, la deuxième harmonique rentrera dans la bande des phonons avant que l'onde arrive à sa limite linéaire. En tout cas, nous avons déjà expliqué précédemment que, à cause de la symétrie différente, cette résonance ne compromet pas la continuation unique de l'onde stationnaire qui est encore continuable jusqu'à sa limite linéaire, comme il est montré en Fig. 6.3 (a) et (b).

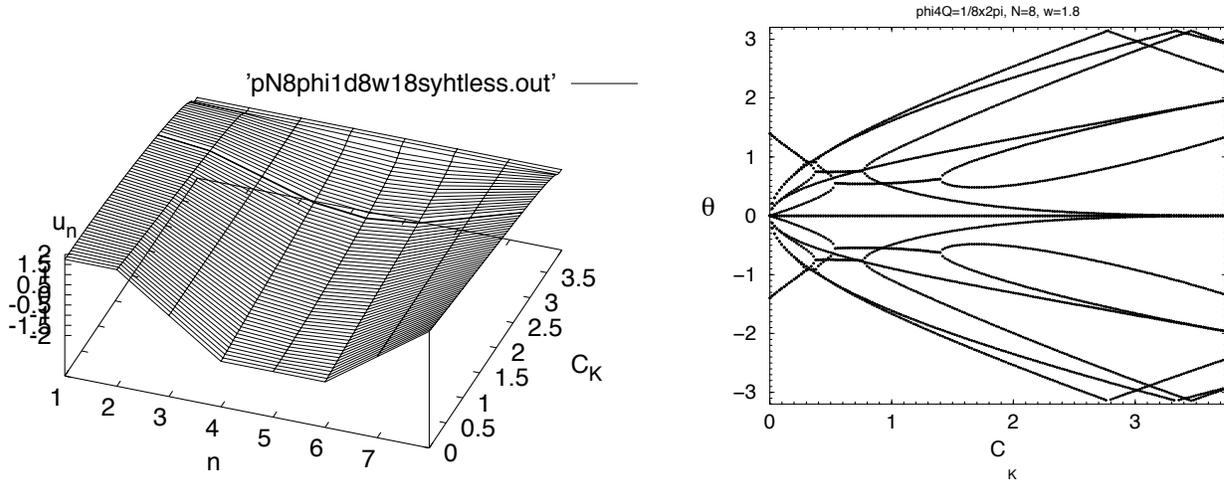


FIG. 6.3 – Amplitude (a) et angles des valeurs propres (b) pour l'onde stationnaire de type H de vecteur d'onde $Q = 1/4\pi$ (donc $0.216\pi < Q < \pi/3$) dans un potentiel quartique (1.8), pour un system de taille $N = 8$, en augmentant C_K à fréquence fixée $\omega_b = 1.8$.

L'effet de cette résonance est de produire des instabilités non oscillatoires additionnelles, qui sont signalées par des collisions des valeurs propres de la matrice \mathbf{F}'_0 à -1 (Fig. 6.3 (b)). Un exemple du scénario des instabilités observées dans ce régime est illustré en Fig. 6.4. Il est aussi visible en Fig. 6.3 (b), où des gaps apparaissent à $-\pi$.

6.3 Résonance avec la troisième harmonique

Le troisième régime se manifeste quand

$$\sin \frac{Q}{2} < \frac{1}{3}, \quad (6.5)$$

c'est-à-dire, quand $Q \lesssim 0.216\pi$. Considérons des ondes stationnaires à la limite anti-continue, avec vecteur d'onde satisfaisant la condition (6.5). Par continuation, augmentons le couplage

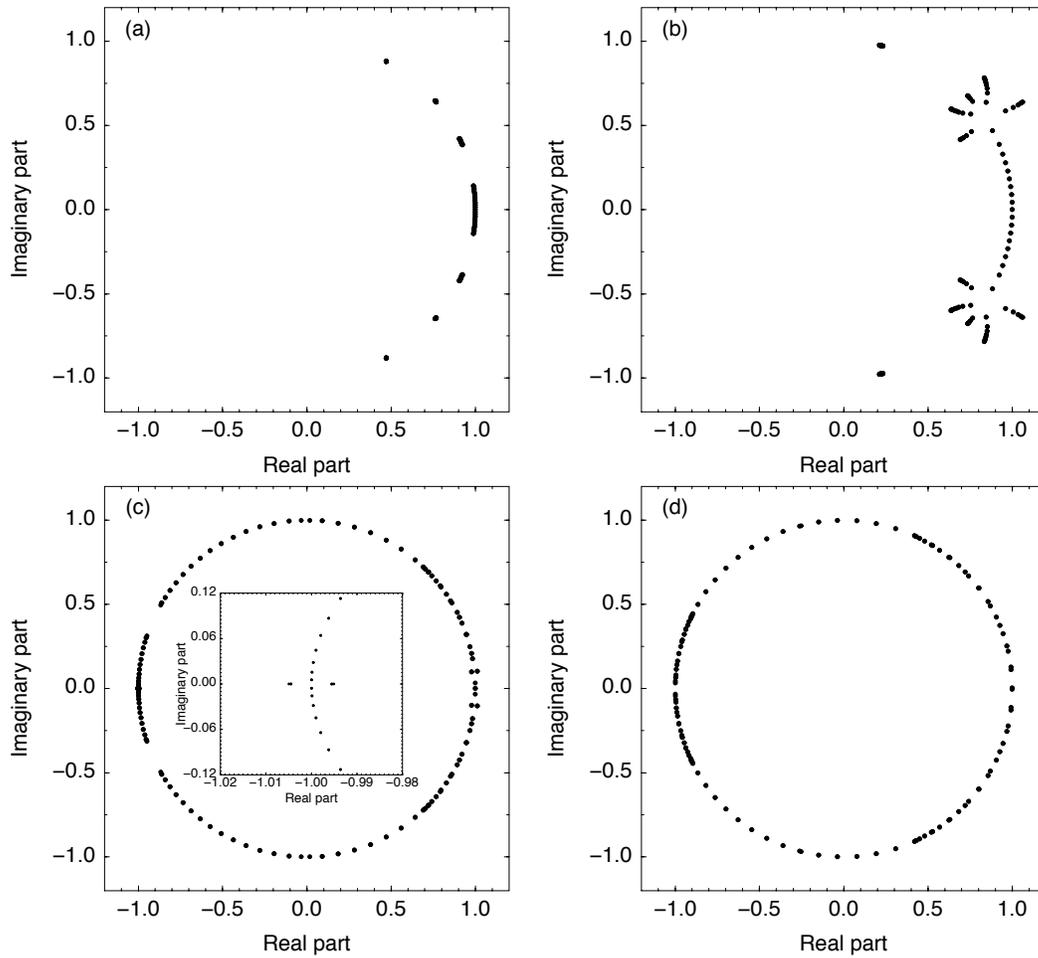


FIG. 6.4 – Valeurs propres de la matrice de Floquet \mathbf{F}'_0 pour la même onde stationnaire que Fig. 6.3 mais dans un système de taille finie $N = 120$, avec : (a) $C_K = 0.199$ (onde stable), (b) $C_K = 0.699$ (instabilités oscillatoires), (c) $C_K = 2.773$ (instabilités additionnelles causées par des collisions à -1 , qui proviennent des résonances de la deuxième harmonique, voir insert), et (d) $C_K = 3.399$ (retour à la stabilité près de la limite linéaire pour un système de taille finie).

à fréquence fixée $\omega_b = 2.0$ (Fig. 6.5). Si ω_b est suffisamment grande de façon à ce que les conditions (6.3)-(6.4) soient satisfaites pour $p = 3$, l'onde stationnaire avec fréquence ω_b bifurquera généralement avec la solution de fréquence $3\omega_b$ avant d'arriver à la limite linéaire. En effet, si l'on considère, par exemple, $Q = \pi/6$ à $\omega_b = 2.0$, on observe (voir Fig. 6.5), que la troisième harmonique $3\omega_b = 6.0$ rentre dans la bande des phonons en croisant la limite de bande (courbe noire épaisse) à $C_K \approx 8.750$, donc avant que la fréquence fondamentale $\omega_b = 2.0$ de la solution arrive à sa limite linéaire (courbe rouge épaisse) à $C_K \approx 11.20$. Le même scénario peut être présenté en utilisant le diagramme alternatif qui représente plusieurs bandes des phonons, et dans lequel le croisement de $3\omega_b$ avec la limite de bande $\sqrt{1 + 4C_K}$ équivaut à la rentrée de la fréquence fondamentale $\omega_b = 2.0$ dans ce que nous représentons comme la "troisième harmonique" $\omega_b = \frac{1}{3}\sqrt{1 + 4C_K \sin^2(Q/2)}$ (courbe noire en tirets en Fig. 6.5) à $C_K \approx 8.750$. Ces bifurcations sont signalées par des collisions à $+1$ dans le spectre de Floquet de \mathbf{F}' .

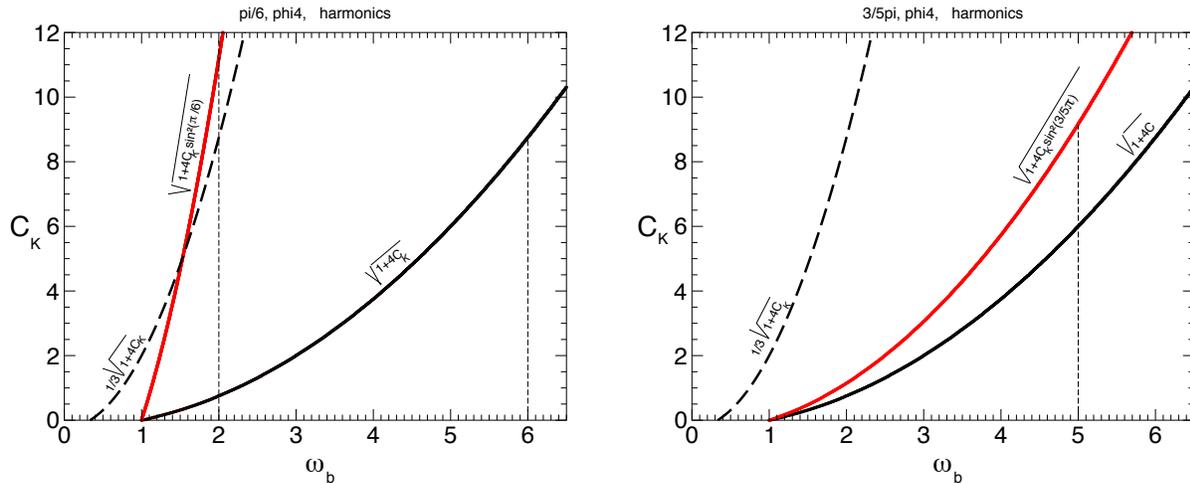


FIG. 6.5 – Représentation, dans l'espace de phases (ω_b, C_K) , de la continuation d'une onde stationnaire dans un potentiel dur quartique, (a) avec $Q = \pi/6$ et à fréquence fixée $\omega_b = 2.0$, (b) avec $Q = 3/5\pi$ et à fréquence fixée $\omega_b = 5.0$. Le même scénario pour la représentation dans le diagramme alternatif est aussi reportée (courbes en tirets).

L'analyse des résonances de la solution avec la troisième harmonique est intéressante. Puisque deux ondes peuvent résonner seulement si elles ont la même symétrie, une onde stationnaire doit satisfaire une condition particulière pour qu'elle puisse avoir une résonance de troisième ordre.

Condition de résonance Une onde de vecteur Q et fréquence ω_b , dans un potentiel dur quartique et qui satisfait la condition (6.5), peut entrer en résonance avec une onde de vecteur

Q' et fréquence $3\omega_b$ (donc appartenant à sa troisième harmonique) si et seulement si Q' est un multiple impair entier de Q

$$Q' = mQ \text{ mod } 2\pi, \quad m \text{ impair} \quad (6.6)$$

et la première résonance se réalisera avec le vecteur Q' le plus proche de π .

Le fait que le coefficient m soit impair dans la relation (6.6) entre Q et Q' , nécessaire pour avoir résonance, est évidemment liée à la symétrie du potentiel quartique (1.8).

6.3.0.1 Résultats de la résonance

Si la condition (6.6) est accomplie, le résultat de cette résonance est une transformation totale de la solution, qui change de vecteur d'onde. En effet la solution de vecteur Q et fréquence ω_b (donc de période $T_b = \frac{2\pi}{\omega_b}$, et avec un code ne contenant que des 0, ± 1) devient une onde de vecteur Q' (satisfaisant la condition (6.6)) et fréquence $3\omega_b$ (donc de période $T_b/3$ et de code ne contenant que des 0 et ± 3). Le passage entre ces deux solutions très différentes s'effectue en passant par une solution intermédiaire, plus compliquée à décrire.

En effet, comme nous verrons dans les exemples qui suivront, chaque fois que la condition (6.6) est accomplie, on rencontre une bifurcation. Cependant, il sera parfois assez compliqué de pouvoir suivre la continuation à travers la résonance (quand on effectue la continuation à C_K ou ω_b fixés), en particulier quand l'ordre de l'harmonique résonante est très élevé. Nous verrons qu'il sera nécessaire de suivre la solution le long d'une continuation curvilinee, comme montré en Fig. 6.10 (f). Ce type de solution sera étudié en détail dans la Section 7.0.1.2. A part ce comportement particulier qui se manifeste, les résonances se vérifient selon la règle générale expliqué.

Nous allons maintenant voir en détails le comportement des résonances de troisième ordre pour le potentiel quartique, en utilisant des exemples d'ondes de plus en plus compliqués. De façon très similaire à ce que nous avons présenté au chapitre 2.1.3 en décrivant le breather fantômes, nous allons maintenant découvrir l'existence d'une nouvelle solution, au-delà de la résonance : la *solution fantôme pour l'onde stationnaire*.

6.3.1 Changement de vecteur d'onde

Le changement de vecteur d'onde causé par la résonance de troisième ordre est détectable par deux collisions consécutives des valeurs propres à $+1$. En effet, si on effectue la continuation en augmentant C_K à fréquence fixée, pour l'onde stationnaire de vecteur $Q = \frac{\pi}{6}$ à $\omega_b = 2.0$, on observe la première collision à $C_K \approx 9.07$. Comme il est montré en Fig. 6.6 (a) et (b), il est possible de continuer de façon monotone la solution à travers cette bifurcation,

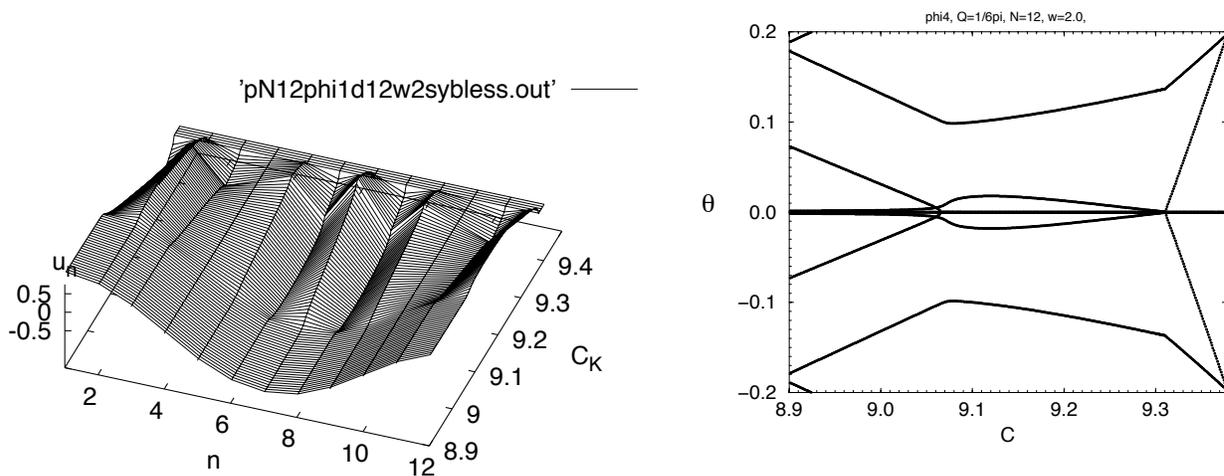


FIG. 6.6 – Onde stationnaire initialement de vecteur d'onde $Q = 1/6\pi$ et $\omega_b = 2.0$, qui, avec une première bifurcation par une résonance du troisième ordre à $C_K \approx 9.07$, devient une solution intermédiaire, et avec une deuxième à $C_K \approx 9.3104$ devient finalement l'onde finale $Q' = Q' = 5/6\pi$. Cette dernière onde, rejoint sa limite linéaire à $C_K \approx 9.3775$, selon l'équation $\omega_b = \frac{1}{3} \sqrt{(1 + 4C_K \sin^2(Q'/2))}$

mais la nature de la solution change radicalement. Ce scénario se manifeste typiquement en deux parties. Au premier point de bifurcation, la solution change en devenant une solution intermédiaire (instable), et ensuite, au deuxième point de bifurcation (à $C_K \approx 9.311$ pour l'onde en Fig. 6.6 (b)) elle devient la solution finale. Celle-ci est l'onde stationnaire avec vecteur d'onde Q' qui coïncide avec le vecteur d'onde du vecteur propre résonant. Puisque c'est une résonance avec la troisième harmonique, l'onde finale oscille à une fréquence $3\omega_b$. En conséquence, sa séquence codant à la limite anti-continue est encore générée par les Eqs. (3.21)-(3.22), mais avec des codes ± 3 plutôt que ± 1 , comme nous l'avons expliqué. Par exemple, selon la condition (6.6), l'onde avec $Q = \pi/6$ et ω_b doit résonner avec l'onde $Q' = Q' = 5/6\pi$, l'onde à $Q = 2/11\pi$ avec l'onde $10/11\pi$, l'onde à $Q = 4/21\pi$ avec l'onde $20/21\pi$, l'onde à $Q = 6/31\pi$ avec l'onde $30/31\pi$, l'onde à $Q = 1/12\pi$ avec l'onde $11/12\pi, \dots$, de fréquence $3\omega_b$. Nous avons vérifié aussi numériquement toutes ces résonances.

Après la résonance et le changement de vecteur Q en Q' , la continuation en C_K à ω_b fixée de la nouvelle onde Q' est effectuée de façon monotone et sans bifurcations ultérieures, jusqu'à ce qu'elle arrive à sa limite linéaire à $C_K = \frac{9\omega_b^2 - 1}{4 \sin^2 \frac{Q'}{2}}$, comme montré en Fig. 6.6 (a). L'onde finale de vecteur Q' est codifiable et on peut vérifier sa fréquence $3\omega_b$ par l'étude des oscillations sur une période.

6.3.2 La solution intermédiaire

La solution existant entre la première et la deuxième collision à $+1$ est une solution intermédiaire entre l'onde initiale de vecteur Q et fréquence ω_b et l'onde finale de vecteur Q' et fréquence $3\omega_b$. Si nous voulons effectuer une analogie avec l'étude du chapitre 2, elle correspond en effet au breather fantôme. Cette solution intermédiaire, qui est instable et assez complexe à décrire, apparaît comme un mélange entre l'onde Q et Q' . Chaque tentative de la reporter vers la limite anti-continue pour pouvoir en connaître le codage se conclut par une continuation numérique sans discontinuités, soit à l'onde initiale (si on diminue C_K ou si on augmente ω_b) soit à l'onde finale (si on augmente C_K ou si on diminue ω_b).

En étudiant le spectre spatial de Fourier ¹ pour les amplitudes, on confirme que cette solution intermédiaire est un mélange du vecteur initial Q et final Q' , et éventuellement d'un autre composant qui s'agrandit seulement dans le régime intermédiaire, comme il est montré, par exemple, en Fig. 6.7 (a) et (b). En effet, en Fig. 6.7 (a) on observe, pour l'onde $Q = 1/6\pi$, comme pendant le régime de la solution intermédiaire, la composante de Fourier de l'onde initiale $Q = 1/6\pi$ décroît très vite, pendant que celle correspondant à l'onde finale $Q' = Q' = 5/6\pi = 5 \times Q$ augmente et devient la composante principale. En Fig. 6.7 (b) on peut voir le scénario pour l'onde initiale $Q = 6/55\pi$ à $\omega_b = 1.4$, autour de la solution intermédiaire (qui existe entre $C_K \approx 4.63$ et $C_K \approx 4.698$) qui, pour une résonance du troisième ordre, devient l'onde $Q' = 42/55\pi = 7 \times Q$. On observe que pendant le régime intermédiaire, d'autres composantes, comme $19 \times Q$, sont aussi présentes, mais avec beaucoup moins d'importance. Nous rencontrerons ce même scénario aussi plus tard.

6.3.3 L'onde fantôme

Si on effectue la continuation de la solution initiale de vecteur Q et fréquence ω_b en augmentant le couplage C_K depuis la limite anti-continue avec des pas suffisamment grands dans la routine numérique de Newton, on sautera les résonances de troisième ordre et on arrivera à la limite linéaire du vecteur initiale $C_K = \frac{\omega_b^2 - 1}{4 \sin^2 Q/2}$. Evidemment, cette continuation n'est pas rigoureuse, parce qu'une continuation précise fera rencontrer les résonances avec le changement du vecteur Q en Q' . Néanmoins, elle annonce l'existence d'une solution avec le même vecteur Q au-delà de la résonance, et en tout cas, proche de la limite linéaire. Nous appelons ces solutions, qui ont le même vecteur d'onde Q de la solution initiale, mais qui ne sont pas reductibles par continuation jusqu'à la limite anti-continue, *solutions fantômes*.

¹Nous utilisons la Transformée de Fourier spatiale : $f_Q = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=1}^N u_i e^{-i \frac{2\pi Q}{N}}$

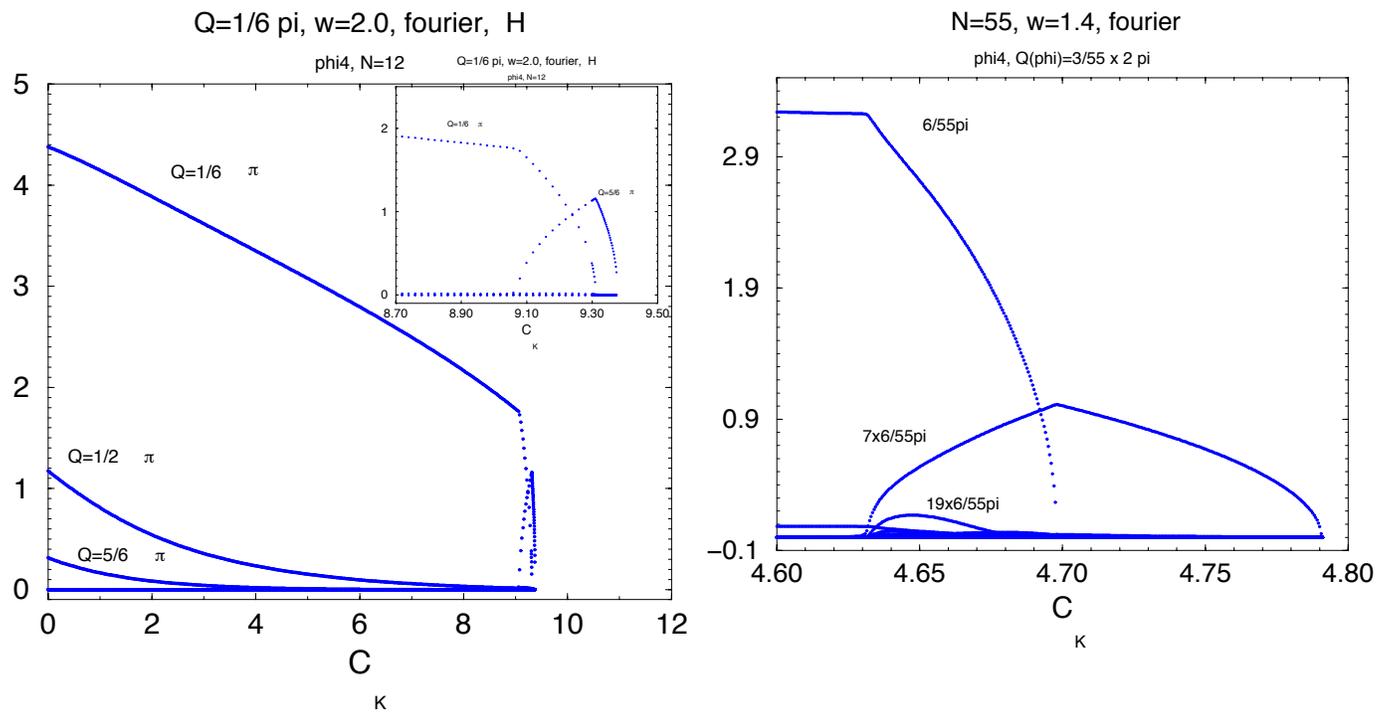


FIG. 6.7 – Spectre spatial de Fourier pour l'onde stationnaire de vecteur (a) $Q = 1/6\pi$, $\omega_b = 2.0$ et (b) $Q = 6/55\pi$, $\omega_b = 1.4$. On peut observer le changement de vecteur d'onde et les composantes de Fourier pour l'onde intermédiaire.

6.3.3.1 Solution fantôme simple

Commençons par considérer le cas simple d'une onde stationnaire de vecteur Q tel qu'une seule résonance de troisième ordre est rencontrée avant d'arriver à la limite linéaire. La relation :

$$\sqrt{1 + 4C_K \sin^2 \frac{Q}{2}} < \frac{1}{3} \sqrt{1 + 4C_K \sin^2 \frac{Q'}{2}} \quad (6.7)$$

avec Q' qui satisfait la condition (6.6), est donc accomplie pour une seule valeur de Q' . Considérons par exemple l'onde de vecteur $Q = \frac{\pi}{6}$.

Nous avons expliqué comment en effectuant une continuation pas assez précise (avec des pas dans la routine de Newton de l'ordre de $\approx 10^{-2}$) on peut arriver de la limite anti-continue à la limite linéaire en sautant les résonances. Par contre, avec une continuation précise à partir de $C_K = 0$ on rencontrera la résonance avec changement de vecteur d'onde.

Considérons maintenant la solution fantôme, calculée en sautant la résonance et qui, nous le rappelons, existe jusqu'à la limite linéaire (qui pour $Q = \pi/6$ et $\omega_b = 2.0$ est à $C_K \approx 11.196$), et effectuons une continuation précise en diminuant le couplage. Nous observons que cette continuation s'arrête (voir Fig. 6.8) près de la valeur de C_K où il y a la résonance de troisième ordre.

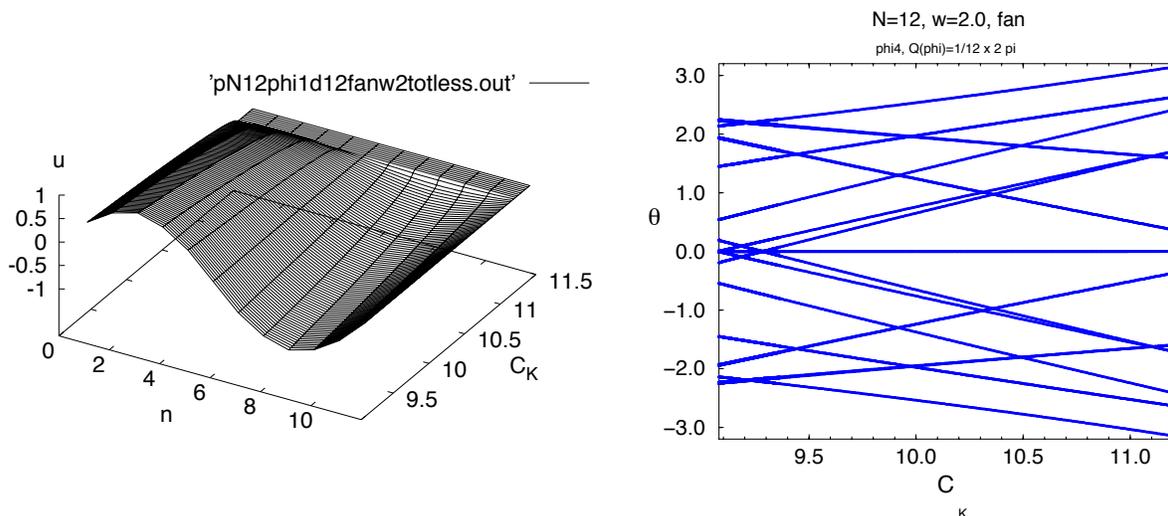


FIG. 6.8 – Solution fantôme pour l’onde stationnaire de type H de vecteur d’onde $Q = \pi/6$, $\omega_b = 2.0$ et dans un potentiel quartique. En augmentant C_K elle rejoint la limite linéaire à $C_K \approx 11.196$, tandis qu’en diminuant C_K la continuation s’arrête pour $C_K \approx 9.08$.

Il existe donc deux solutions, du même type, H ou E , avec le même vecteur d’onde Q (donc pour chaque Q il existe en effet quatre solutions) : une est continuable depuis la limite anti-continue, et l’autre depuis la limite linéaire (la solution fantôme), mais elles ne sont pas continuables entre elles à fréquence ou couplage fixé (par une continuation précise et monotone !) à cause de la résonance de troisième ordre avec les phonons non-linéaires.

La Fig. 6.8 (b) montre les arguments des multiplicateurs de Floquet pour l’onde fantôme de l’onde stationnaire de type H avec $Q = \pi/6$. La continuation précise en diminuant C_K s’arrête en correspondance avec la résonance du troisième ordre, donc avec une collision des valeurs propres à $+1$. En effet, dans cette figure, on peut observer deux collisions à $+1$, dont la deuxième (en diminuant C_K) correspond à l’arrêt de la continuation, tandis que la première est apparemment traversée sans problèmes. En réalité, ces deux collisions sont générées par deux bandes des valeurs propres qui se rejoignent à la limite linéaire. Elles correspondent aux résonances de troisième ordre avec les ondes de type H et E de vecteur Q' .

Puisque les ondes stationnaires de type H et E relatives au même vecteur d’onde ont une symétrie différente, seulement une des deux collisions à $+1$ pourrait donner la résonance du troisième ordre. Pour le cas de Fig. 6.8 la solution fantôme de l’onde type H de vecteur Q s’arrête en correspondance de la bifurcation avec l’onde type H de vecteur Q' ($C_K \approx 9.08$), tandis que celle avec l’onde type E de vecteur Q' ($C_K \approx 9.283$) cause simplement des instabilités, sans déranger la continuation.

En Fig. 6.9 une schématisation qualitative du scénario total pour l’onde stationnaire de type H avec $Q = \pi/6$ est résumé.

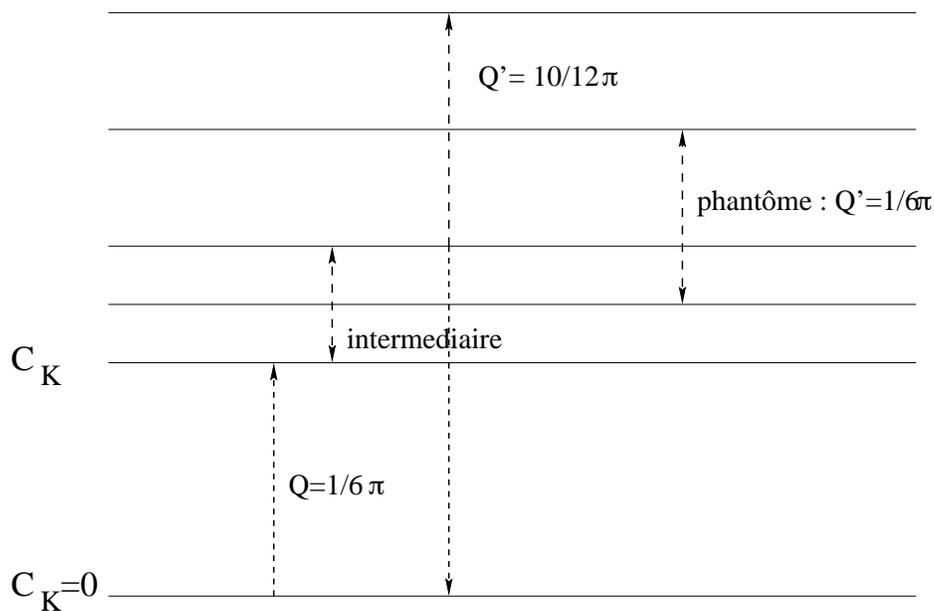


FIG. 6.9 – Schématisation qualitative du scénario total de la continuation en C_K d'une onde stationnaire de type H de vecteur $Q = \pi/6$ et $\omega_b = 2.0$.

6.3.3.2 Solutions fantômes multiples

Considérons maintenant des ondes stationnaires avec vecteur Q tel que plusieurs résonances de troisième ordre peuvent être rencontrées avant que l'harmonique fondamentale n'arrive à la limite linéaire. La condition :

$$\sqrt{1 + 4C_K \sin^2 \frac{Q}{2}} < \frac{1}{3} \sqrt{1 + 4C \sin^2 \frac{Q''}{2}} \quad (6.8)$$

est donc accomplie pour plusieurs vecteurs Q'' qui satisfont la condition (6.6). En utilisant l'équation (6.8), avec $Q'' = m'Q = m' \frac{r'}{s'} \pi$, il est possible de prédire le numéro des résonances car $1 < m' < [s'/r']$ (r', s' entiers irréductibles)², et

$$C_K > \frac{2}{\sin^2(m'Q/2) - 9 \sin^2(Q/2)} \quad (6.9)$$

qui implique donc la condition pour m' :

$$\sin^2(m'Q/2) - 9 \sin^2(Q/2) > 0 \quad (6.10)$$

La valeur de Q'' sera le $Q'' = m'Q \bmod 2\pi$ tel que m' impair. La première résonance sera avec le vecteur Q'' le plus proche de π , qui satisfait la condition (6.8) et, ensuite, avec les multiples impairs successifs de Q jusqu'à arriver à la limite linéaire. Puisque plusieurs résonances sont

²Nous indiquons $[a/b]$ le numéro entier le plus proche mais inférieur au numéro réel a/b

présentes, on aura plusieurs solutions fantômes, de façon similaire à celle étudiée, une au-delà de chaque bifurcation.

Nous allons analyser le scénario de cette résonance pour le cas de l'onde stationnaire de vecteur $Q = \frac{4}{21}\pi$, prise comme exemple.

6.3.3.3 Un exemple : l'onde de $Q = 4/21\pi$

En utilisant les conditions (6.6) et (6.10) nous pouvons déjà prédire que l'onde stationnaire avec $Q = 4/21\pi$ présentera des résonances du troisième ordre avant d'arriver à sa limite linéaire, et à chaque résonance correspond un changement du vecteur d'onde Q . Effectuons donc la continuation à $\omega_b = 4.5$ fixée.

Par une continuation précise en augmentant C_K depuis la limite anti-continue, une première résonance est rencontrée, qui comporte le changement de vecteur initial $Q = \frac{4}{21}\pi$ en onde finale $Q' = Q' = 20/21\pi$, en passant par une solution intermédiaire (Fig. (6.10 a)). Le changement de vecteur d'onde advient en passant à une solution intermédiaire avec une première collision à $C_K \approx 44.18$ (Fig. 6.10 d)). Nous observons que cette valeur du couplage est un peu inférieure à celle correspondant à la rentrée de la troisième harmonique de la solution dans la bande des phonons (qui, depuis l'Eq. (6.3) est à $C_K \approx 45.3125$). En effet l'amplitude de l'onde est non-négligeable ($u_n \sim 1.5$) et l'onde résonante est non-linéaire plutôt que linéaire.

Avec la deuxième collision à $C_K \approx 44.8$ (Fig. 6.10 (d)) la continuation rejoint l'onde finale de vecteur $Q' = \frac{20}{21}\pi$, qui arrivera à sa limite linéaire ($C_K \approx 45.56697$) sans bifurcations ultérieures.

Par contre, en effectuant, depuis la limite anti-continue, une continuation intentionnellement non précise (avec pas suffisamment grands dans la méthode de Newton, $dC \approx 10^{-2}$), on sautera les résonances et on rencontrera les solutions fantômes. On peut observer en Fig. 6.10 (c) les arguments des multiplicateurs de Floquet pour cette "continuation imprécise", qui révèlent la présence de trois résonances. En effet, au-delà de la première bifurcation il existe le premier fantôme de l'onde avec $Q = \frac{4}{21}\pi$, au-delà de la deuxième bifurcation, le deuxième fantôme, et de même pour la troisième bifurcation. Ces solutions fantômes ont toutes le même vecteur d'onde Q et la dernière (la troisième dans ce cas) arrive à la limite linéaire à $C_K = \frac{\omega_b^2 - 1}{4 \sin^2 Q/2} \approx 55.39210$.

Considérons maintenant le premier fantôme et effectuons une continuation précise en diminuant le couplage. Sa continuation s'arrête à $C_K \approx 44.22$ (en correspondance de la première résonance, voir Fig. 6.10 (d)). Par contre, en augmentant le couplage, il rencontrera une résonance du troisième ordre avec l'onde du vecteur $Q'' = m''Q = (m' - 2)Q$, Q'' multiple impaire de Q le plus proche de π mais successive par rapport à Q' . Dans notre cas, le premier

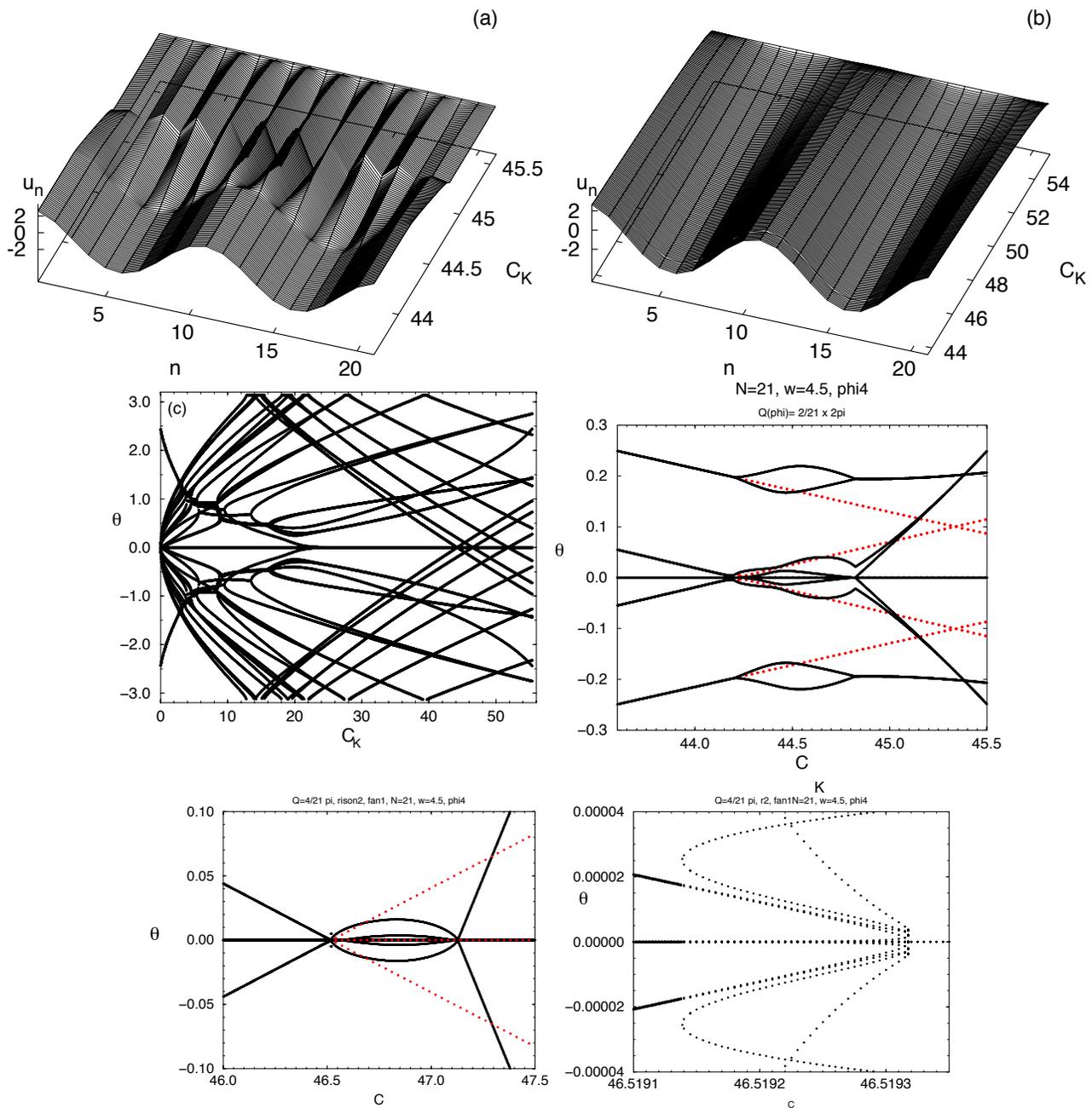


FIG. 6.10 – Scénario de la bifurcation résultant des résonances de troisième ordre dans le modèle quartique pour l'onde stationnaire initiale de type- H , $Q = 4\pi/21$ et $\omega_b = 4.5$. En (a) continuation précise depuis la limite anti-continue en augmentant C_K de l'onde initiale Q et ω_b , dans une onde de type H avec fréquence $3\omega_b$ et vecteur $Q' = 20\pi/21$. En (b) continuation intentionnellement 'sans précision' depuis la limite linéaire en diminuant C_K pour l'onde initiale Q , avec une taille du pas en C_K suffisamment grande pour sauter tous les régimes de résonance (en (b) on peut observer le petit gap à $C_K \approx 44.2$ qui correspond à la résonance). En (c) arguments de toutes les valeurs propres $re^{i\theta}$ de la matrice de Floquet \mathbf{F}'_0 en fonction du couplage pour une celle unitaire ($N = 21$) de l'onde de vecteur Q in (b).

FIG. 6.11 – En (d) et (e) resp. grandissement de la première et deuxième résonance (avec l'onde $Q'' = 18/21\pi$ et $3\omega_b$) en (c). La ligne continue représente la continuation lisse en augmentant C_K comme en (a), la ligne en pointillés rouge est la continuation en diminuant C_K , comme en (b), qui s'arrête à $C_K \approx 44.22$ et à $C_K \approx 46.51941$, resp. En (f) agrandissement de la première collision à $C_K \approx 46.5193$ en (e) pour la deuxième résonance, avec le comportement de courbe sineuse (voir Sec. 7.0.1).

fantôme de $Q = \frac{4}{21}\pi$ bifurque avec l'onde de vecteur $Q'' = Q'' = \frac{18}{21}\pi \bmod 2\pi$, c'est-à-dire, $Q'' = 15 \times \frac{4}{21}\pi$. La continuation de la solution à travers cette résonance se effectue selon un parcours différent que la simple continuation à un paramètre fixé (dans notre cas, par augmentation de C_K à ω_b fixé). Il est en effet nécessaire de suivre la solution le long d'une continuation curviligne en diminuant et en suite re-augmentant C_K , comme montré en Fig. 6.10 (f). Nous parlerons amplement de cette "solution sineuse" dans la Section 7.0.1.2. Ce type de comportement qui se manifeste lors de la première collision à $+1$, conduit quoi-même à la résonance avec l'onde Q'' , et le scénario se déroule, en suite, normalement. En effet après la première bifurcation, qui arrive à $C_K \approx 46.5193$, la solution se transforme dans l'onde finale de la troisième harmonique $Q'' = \frac{18}{21}\pi$, qui rejoint sa limite linéaire, pour $\omega_b = 4.5$, à $C_K \approx 47.673$.

De la même façon au-delà de la deuxième résonance, c'est-à-dire, au-delà du premier fantôme, il existe le deuxième fantôme, que l'on trouve par une continuation "imprécise" depuis le premier fantôme, effectuée avec de grands pas ($dC \sim 10^{-2}$) dans la routine de Newton. En continuant avec précision ce deuxième fantôme vers un couplage inférieur, la continuation s'arrête à $C_K \approx 46.51941$ en correspondance de la première bifurcation qui produit la deuxième résonance (Fig. 6.10 (e)). De la même façon, en continuant ce deuxième fantôme vers de grands couplages, la solution rencontre une résonance avec l'onde de vecteur $Q''' = m'''Q = (m' - 5)Q = \frac{16}{21}\pi \bmod 2\pi = 25 \times \frac{4}{21}\pi$ à $3\omega_b$. (Pour des harmoniques d'ordres tellement élevés, il est indispensable d'utiliser une telle précision de calcul sinon une apparente bonne continuation de la solution est observée, même avec $dC = 10^{-8}$).

Bien sûr, au-delà de cette troisième résonance, il existe un autre fantôme, qui, puisque c'est la dernière résonance, arrivera à la limite linéaire à $C_K = \frac{\omega_b^2 - 1}{4 \sin^2 Q/2}$ pour le vecteur $Q = \frac{4}{21}\pi$ à la fréquence ω_b ($C_K \approx 55.39210$ pour $\omega_b = 4.5$). Le dernier fantôme de la série est en effet l'onde du vecteur Q construite depuis la limite linéaire. Nous appellerons donc cette solution soit *dernier fantôme* de vecteur Q soit, simplement, onde de vecteur Q depuis la limite linéaire.

En Fig. 6.12 nous avons schématisée de façon qualitative l'histoire totale' de l'onde de vecteur $Q = 4/21\pi$ depuis la limite anti-continue.

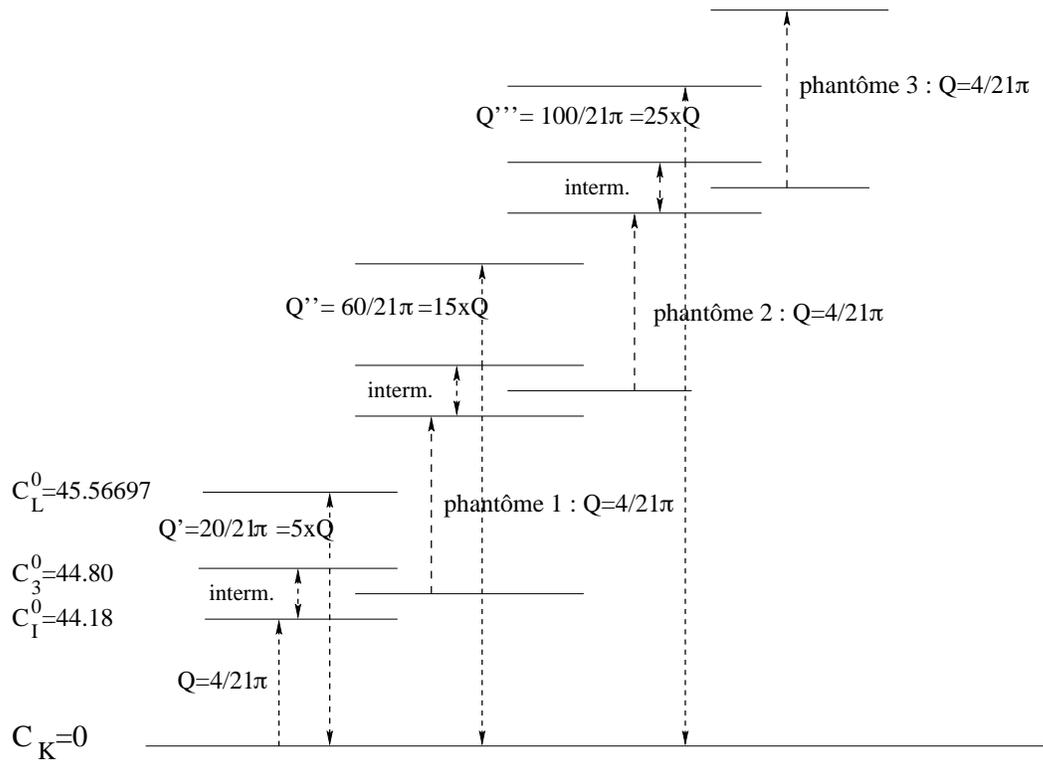


FIG. 6.12 – Schématisation qualitative du scénario total de la continuation en couplage, à fréquence fixée $\omega_b = 4.5$, de l'onde stationnaire de type H avec $Q = 4/21\pi$. On peut observer les trois résonances, chacune qui comporte un changement de vecteur d'onde depuis l'initial Q en, respectivement, Q' , Q'' et Q''' . Au-delà de chaque résonance, il existe une solution fantôme. On a donc trois ondes fantômes, de même vecteur Q , et qui sont continuables jusqu'à la limite anti-continue. Le dernier fantôme est l'onde de vecteur Q depuis sa limite linéaire.

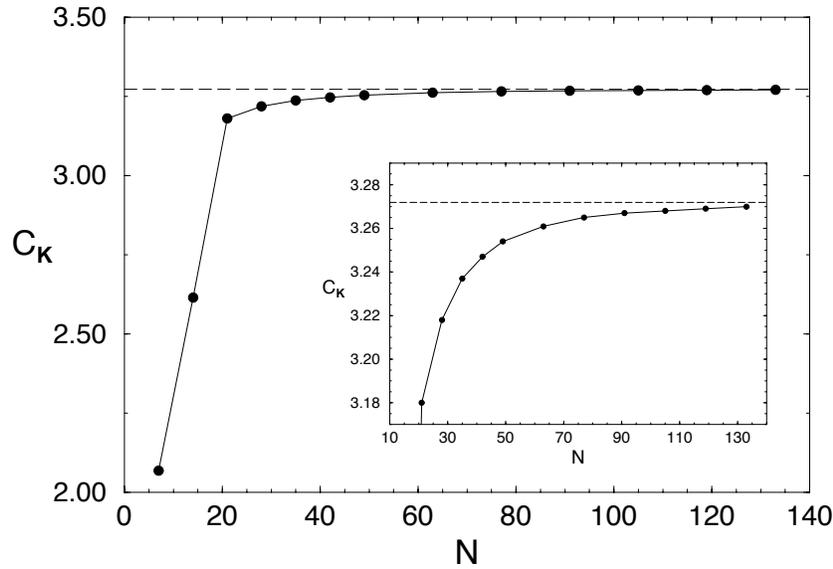


FIG. 6.13 – Limite inférieure pour l’intervalle de stabilité près de la limite linéaire, en fonction de la taille du système, pour un’onde stationnaire de type H avec $Q = 4/7\pi$ et $\omega_b = 3.0$, dans un modèle de KG quartique. La ligne en tirets représente la limite linéaire, $C_K \approx 3.27192$, selon l’Eq. (1.6).

6.4 Stabilité pour effet de taille

Après avoir analysé les différents comportements des ondes stationnaires dans le potentiel quartique selon la valeur de leur vecteur d’onde Q , discutons maintenant, enfin, une de leur propriété plus générale. En effet, tous les ondes stationnaires de type H dans un système fini et avec conditions périodiques au bord, deviennent toujours stables dans un intervalle près de la limite linéaire (voir Fig. 6.4 (d)). Si la taille du système augmente, la dimension de cet intervalle diminue jusqu’à s’annuler pour un système infini. Ce retour à la stabilité advient par la réentrance sur le cercle unitaire des valeurs propres instables, avec un scénario tout à fait similaire à celui de l’approximation DNLS étudié dans le chapitre II. La diminution de l’intervalle de stabilité avec l’augmentation de la taille du système est illustrée en Fig. 6.13.

Chapitre 7

The Morse potentiel

Nous allons étudier maintenant la continuation des ondes stationnaires dans le potentiel de Morse, en considérant aussi les régimes loin du domaine de l'approximation DNLS, donc à grands couplages et grandes amplitudes. Il est nécessaire de préciser que les résultats de cette étude sont caractéristiques du potentiel de Morse, et donc probablement ils ne sont pas universels. Sûrement d'autres potentiels présenteront des comportements similaires, mais leur énumération n'a pas été l'objet de notre travail. Néanmoins, nous présentons cette analyse, parfois très riche en détails et particularités, soit pour approfondir la connaissance de ce potentiel, soit parce que nous rencontrerons des phénomènes déjà observés dans des autres études, aussi que des phénomènes tout à fait nouveaux. Il sera intéressant d'observer le différent comportement par rapport au potentiel quartique ainsi que les points de similarité.

Pour le potentiel mou de Morse les ondes stationnaires non-linéaires de vecteur d'onde Q ont fréquences $\omega_b < \omega_l(Q)$, et la continuation depuis la limite anti-continue juste à la limite linéaire doit être effectuée en deux parties, comme illustrée en Fig. 3.5 : on augmente d'abord C_K pour fréquence fixée $\omega_b < 1$, et après on augmente ω_b à C_K fixé.

7.0.0.4 Propriétés de symétrie

Bien que le potentiel de site (1.7) maintenant soit asymétrique, nous pouvons utiliser les propriétés de symétrie de la séquence codante de l'onde stationnaire, discutées en Sec. 3.3, pour restreindre l'espace des solutions pour le schéma numérique de Newton. Pour trouver les ondes stationnaires de type H , invariantes par renversement du temps et avec séquence codante anti-symétrique centrée sur site (par exemple l'onde avec $Q = 4/5\pi$ de type H de code $[1 - 101 - 1]$) nous imposons la condition $u_n(T_b/2) = u_{-n}(0)$, $\dot{u}_n(T_b/2) = \dot{u}_n(0) = 0$ dans l'algorithme de Newton. Pour un'onde stationnaire anti-symétrique centrée sur intersite (par exemple l'onde $Q = 3/10 \times 2\pi$ de type H de code $[10 - 110 - 101 - 10]$) la première condition

sera remplacée par $u_n(T_b/2) = u_{-n+1}(0)$. Pour onde stationnaire de type E (par exemple l'onde $Q = 4/5\pi$ de code $[1 - 11 - 11]$ et $Q = 3/10 \times 2\pi$ de code $[1 - 101 - 1 - 110 - 11]$) on peut toujours utiliser la condition de symétrie $u_n(t) = u_{-n+1}(t)$.

7.0.0.5 Condition de résonance

Dans le cas d'un potentiel mou, selon l'Eq. (6.3) l'harmonique p -ième de l'onde stationnaire de vecteur d'onde Q rentre dans la bande linéaire des phonons si

$$\frac{1}{p} < \omega_b < \min \left\{ \sqrt{1 + 4C_K \sin^2 \frac{Q}{2}}, \frac{1}{p} \sqrt{1 + 4C_K} \right\}. \quad (7.1)$$

Donc, au contraire par rapport au cas du potentiel dur, nous pourrions trouver résonances d'ordre supérieures pour tous les Q si, à C_K fixé, la fréquence ω_b est suffisamment petite, c'est-à-dire, si l'onde stationnaire est suffisamment non-linéaire. En particulier, quand les conditions (6.4) sont satisfaites, les résonances se manifestent immédiatement de la limite linéaire. Comme le potentiel est non-symétrique, déjà les résonances de deuxième harmonique produisent généralement des bifurcations pour les ondes stationnaires. Donc nous trouvons un comportement qualitativement différent pour ondes stationnaires de petite amplitude, selon si la condition (6.4) avec $p = 2$,

$$Q < \frac{\pi}{3} \quad \text{and} \quad C_K > \frac{3}{4(1 - 4\sin^2 \frac{Q}{2})}, \quad (7.2)$$

est ou n'est pas satisfaite. En Fig. ?? (a) et (b) le scénario de continuation pour un cas de onde avec $Q = 4/5\pi > \pi/3$ (donc sans résonance) et de onde avec $Q = 2/11\pi < \pi/3$ (donc avec résonance) sont montrés respectivement.

7.0.1 La transition du premier ordre

Une caractéristique particulière des ondes stationnaires dans le potentiel de Morse, pas observée dans le cas quartique, est la présence d'une transition du premier ordre. En effet, si on effectue, dans l'espace des phases (ω_b, C_K) , la continuation numérique en couplage d'une onde stationnaire à ω_b fixée, il existe une valeur critique de la fréquence en dessous duquel la continuation présente une discontinuité qui correspond, en effet, à un point triple de la transition du premier ordre. Au-dessus de cette fréquence critique la continuation suit une courbe monotone. De la même façon, si on effectue la continuation en ω_b à C_K fixé, il existe une valeur critique du couplage, au-dessus duquel on trouve la transition du premier ordre. La valeur du paramètre critique et de l'amplitude de la transition dépendent du vecteur

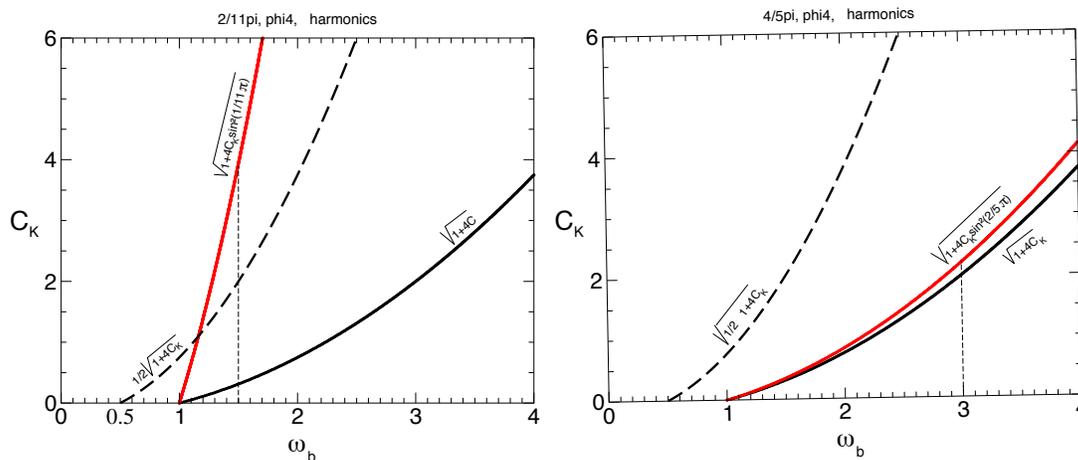


FIG. 7.1 – Représentation, dans l’espace de phases (ω_b, C_K) , de la continuation d’une onde stationnaire dans le potentiel mou de Morse, (a) avec $Q = 4/5\pi$ et à fréquence fixée $\omega_b =$, (b) avec $Q = 2/11\pi$ et à fréquence fixée $\omega_b =$. Le même scénario pour la représentation dans le diagramme alternative est aussi reportée (courbes en tirets).

d’onde Q comme aussi de son type, H ou E . Donc, pour chacun onde stationnaire il existe une courbe dans le plan (ω_b, C_K) correspondante aux points de transition.

Cette transition ce présent tout à fait similaire à une transition de phase thermodynamique du premier ordre, comme nous montrent les figures proposées. Nous allons maintenant analyser en détail cette transition, qui, en premier regard, se manifeste comme un point de discontinuité pour la continuation de la solution. En réalité la continuation de l’onde stationnaire n’est pas interrompue, mais pour pouvoir la suivre il est nécessaire d’effectuer un parcours différent que la simple continuation à un paramètre fixé, en calculant une solution intermédiaire qui nous appellerons *onde sinueuse*.

A cause de cette transition une typique comportement “curviligne” sera présente dans les différents diagrammes des variables pour les ondes stationnaires .

7.0.1.1 Le point triple de transition

Nous allons maintenant décrire le scénario de cette transition.

Considérons une onde stationnaire de type H de vecteur $Q = 4/5\pi$ et effectuons la continuation en couplage depuis la limite anti-continue à fréquence fixée. Un comportement différent se manifeste en dessous ou au-dessus de la fréquence critique ¹ $\omega_b = \omega_T^H(4/5\pi) \approx 0.72$.

¹Comme nous avons dit, la fréquence critique dépend du vecteur d’onde et aussi du type, H ou E , de l’onde. Nous indiquerons donc $\omega_T^H(Q)$ et $\omega_T^E(Q)$, la valeur critique pour l’onde H et E respectivement

Pour $\omega_b > \omega_{TH}(4/5\pi)$ il est possible d'effectuer la continuation de la solution sans discontinuité comme est montré en Fig. 7.2. Nous étudierons dans le paragraphe 7.0.2 le comportement final de l'onde.

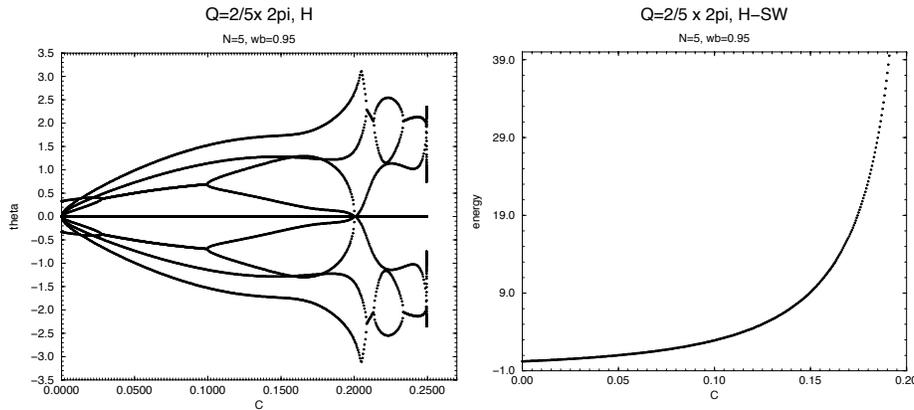


FIG. 7.2 – Arguments des valeurs propres (a) et énergie (b) versus le couplage pour une onde stationnaire de type H avec $Q = 4/5\pi$ à $\omega_b = 0.95 > \omega_T^H(Q)$. La continuation est effectuée sans discontinuité.

En effectuant, par contre, la continuation à fréquence fixée $\omega_b < \omega_T^H(4/5\pi)$ une apparente discontinuité est rencontrée à un particulier valeur du couplage. Si on effectue la continuation “traditionnelle” en C_K , comme montré en Fig. 7.3 (a), à $\omega_b = \omega_1$ fixé, en augmentant C_K depuis A la solution, soit pour des pas très petites s’arrête à T_1 , soit avec discontinuité saute sur une solution très proche à l’initiale (ligne $[T_1 - B]$ en Fig. 7.3 (a) et ligne $[T_1 - T_{1B} - B]$ en Fig. 7.3 (b)). Cette dernière solution au-delà du saute est encore l’onde initiale : on retrouve en effet le même code à la limite anti-continue à $\omega_b > \omega_T^H(Q)$ par un parcours (par exemple, $[B-C-D]$ en Fig. 7.3 (a)) qui évite la transition. Si par contre, à $\omega_b = \omega_1$ fixée on diminue C_K par des petites pas ($dC \sim 10^{-7}$) depuis $[T_1 - B]$, soit la continuation s’arrête à T_2 , soit elle saute selon le chemin $[T_2 - T_{2A} - A]$ en Fig. 7.3 (b).

Comme montré en Fig. 7.3 (a), un recouvrement $[T_1 - T_2]$ se présente entre les deux continuations. Pour raccorder les 2 branches de solutions (Fig. 7.3 (a)) $[A - T_1]$ et $[D - C - B - T_2]$ qui on construit depuis la limite anti-continue par la continuation en C_K à ω_b fixé, et vice-versa, il faut effectuer un particulier chemin curviligne qui donne la solution sinueuse.

Régime intermédiaire Vu le scénario de transition, comme observé en Fig. 7.3, entre C_{T_1} et C_{T_2} il y a coexistence de 3 solutions avec la même fréquence et couplage, mais différente amplitude, énergie, valeurs propres,...

On définit classe de solutions équivalentes l’ensemble des solutions qui peuvent être connectés par continuité en suivant un certain paramètre. Les 3 solutions sont donc équiva-

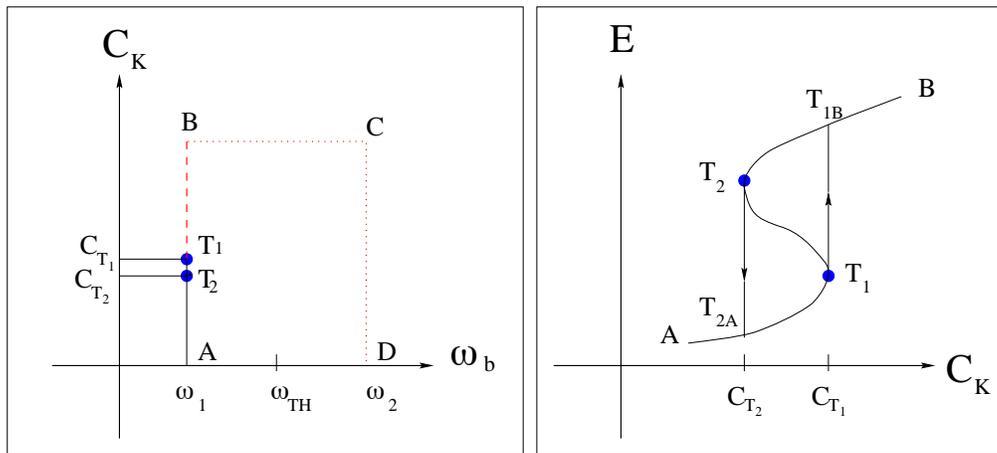


FIG. 7.3 – Chemins de continuation dans le plan (ω_b, C_K) (a) et (E, C_K) (b) pour une onde stationnaire de vecteur Q avec $\omega_b < \omega_T^H(Q)$. Si on effectue la continuation ‘traditionnelle’ dans le plan (ω_b, C_K) une apparente discontinuité est rencontrée à T_1 (et T_2) en augmentant (diminuant C_K). Ceci est en effet le signe de la transition du premier ordre. En (b) la continuation complète de l’onde stationnaire à travers la transition, avec l’onde sinueuse, est représentée.

lents, en observant que la continuation qui les suit une après l’autre à travers la transition, doit être effectuée en variant un troisième paramètre, à C_K et ω_b fixés. La solution sinueuse, à différence des deux branches $[A - T_1]$ et $[B - T_2]$ de Fig. 7.3, ne peut pas être continuée jusqu’à la limite anti-continue. Elle existe seulement entre les points T_1 et T_2 , et elle est toujours instable pour une instabilité réelle.

Ce type de scénario est complètement similaire à une transition de phase thermodynamique du premier ordre. Nous l’appelons donc “transition du premier ordre” pour l’onde stationnaire et, comme telle, par définition la solution ne présente pas de discontinuités. Il est possible d’interpréter ce phénomène comme un artefact du choix des variables C_K et ω_b pour effectuer la continuation. Si on voulait suivre la solution de façon monotone, il sera nécessaire d’utiliser une troisième dimension hors du plan (ω_b, C_K) , où effectuer la continuation avec la solution sinueuse.

En Fig. 7.4 sont reportés les angles des multiplicateurs de Floquet et l’énergie en fonction de C_K pour l’onde stationnaire de type E avec $Q = 2/3\pi$ pour trois différentes valeurs de ω_b autour de la zone de transition. La valeur de transition est $\omega_b = \omega_T^E(2/3\pi) \approx 0.65$. Pour $\omega_b > \omega_T^E(2/3\pi)$ il n’y a pas de transition et les courbes sont monotones (Fig. 7.4 (a) et (b)). Pour $\omega_b < \omega_T^E(2/3\pi)$ on observe la transition et le comportement tortueux des courbes s’accroît de plus en plus on diminue ω_b (à $\omega_b = 0.6$ en Fig. 7.4 (c) et (d), et à $\omega_b = 0.55$ en Fig. 7.4 (e) et (f)). On observe aussi que le domaine d’existence de la solution sinueuse augmente de

plus $\omega_b < \omega_T^E(Q)$, tandis que pour la valeur limite $\omega_b = \omega_T^E(Q)$ il se réduit à un seul point.

En Fig. 7.5 la transition pour un'onde stationnaire de vecteur $Q = 4/5\pi$ de type H est présentée. On peut observer comment le scénario se complique, avec des boucles dans les solutions sinueuses, en augmentant, par exemple, la taille de la cellule unitaire.

Position de la transition La transition du premier ordre est présente soit pour les ondes de type H , soit pour celles de type E . Néanmoins le point de transition est différent ($\omega_T^H(Q) \neq \omega_T^E(Q)$), et on observe toujours $\omega_T^H(Q) < \omega_T^E(Q)$. Par exemple, pour l'onde de vecteur $Q = 4/5\pi$, nous avons que $\omega_T^H(4/5\pi) \approx 0.72$, et $\omega_T^E(4/5\pi) \approx 1.1$. La raison de cette diversité de point de transition dépende de la séquence codant. De plus de codes ± 1 sont présents et plus facilement l'onde manifestera la transition du premier ordre, c'est-à-dire, la fréquence critique sera plus grande. Les ondes stationnaires contenant beaucoup de codes 0, nécessitent des fortes non-linéarités pour avoir ce comportement, donc la transition se manifeste à des fréquences inférieures. La position de la fréquence critique dépend donc du vecteur d'onde Q , qui détermine le code. Pour $Q = \pi$ le code ne contient que des ± 1 , tandis que le plus Q sera proche de zéro, le plus des 0 seront présentes. En Fig. ?? la dépendance du valeur de la fréquence critique de transition pour l'onde type H et type E sont reportés en fonction du vecteur d'onde Q . (STILL TO CALCULATE)

7.0.1.2 Repliement de la solution

Si on effectue la continuation de l'onde stationnaire à fréquence fixée de plus en plus petites, le scénario devient de plus en plus compliqué. En effet le comportement tortueux de l'onde sinueuse s'accroît en descendant en fréquence, comme on peut observer en Fig. 7.6 pour l'onde stationnaire de type E de vecteur $Q = 4/5\pi$ à $\omega_b = 0.99, 0.9$ et 0.8 .

Après une certaine valeur de fréquence ce phénomène est tellement accentué que, (Fig. 7.6 (e) et (f) pour $\omega_b = 0.8$), la courbe de l'énergie se coupe elle-même pour deux valeurs du couplage ($C_K \approx 0.1428$ et $C_K \approx 0.1393$). En ces points il y a donc *deux solutions différentes avec le même couplage, la même fréquence et aussi la même énergie*.

Dans la suite de notre étude des principales caractéristiques des ondes stationnaires dans le potentiel de Morse (1.7), nous considérerons la continuation totale de l'onde stationnaire depuis la limite anti-continue vers grand couplage sans nous occuper de l'éventuelle présence de la transition du premier ordre. En effet, les deux branches de solution qui arrivent par continuation depuis $C_K = 0$ et qui rejoignent la transition et l'onde sinueuse des deux côtés, ont le même vecteur Q et le même code.

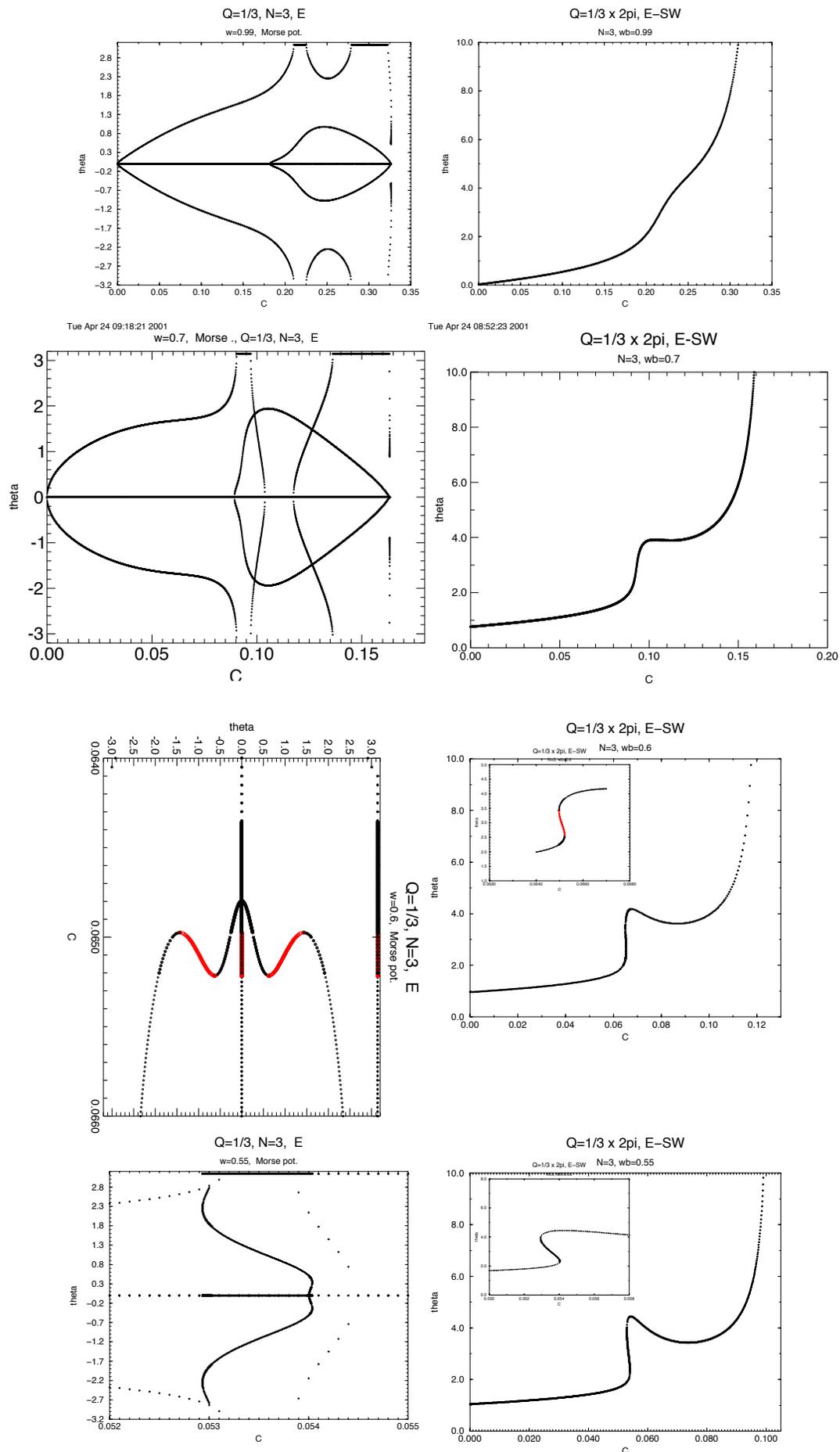


FIG. 7.4 – Angles des multiplicateurs de Floquet et énergie pour la continuation en couplage de l'onde stationnaire type E de vecteur $Q = 2/3\pi$ à ((a) et (b)) $\omega_b = 0.99 > \omega_T^E(Q) \approx 0.65$,

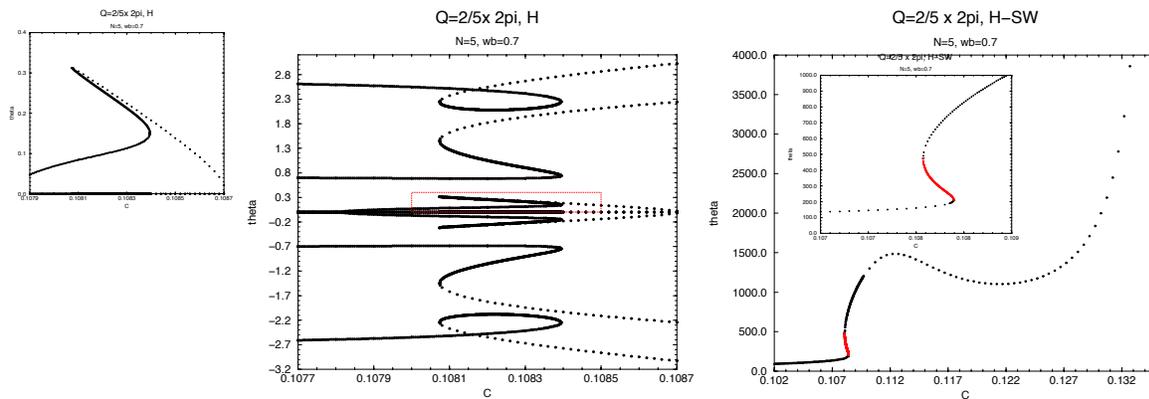


FIG. 7.5 – Angles des multiplicateurs de Floquet et énergie pour la continuation en couplage de l’onde stationnaire type H de vecteur $Q = 4/5\pi$ à $\omega_b < \omega_T^H(4/5\pi) = 0.72$. Depuis $C_K = 0$ le premier point de transition est à $C_K = C_{T_1} \approx 0.108395$, où la solution, en diminuant C_K continue sur l’onde sinueuse. Au deuxième point de transition $C_K = C_{T_2} \approx 0.108073$, elle rejoint, en augmentant C_K , la solution continue “traditionnellement”.

7.0.2 La limite d’existence

Il est intéressant d’étudier le comportement final des ondes stationnaires loin soit de la limite anti-continue soit de la limite linéaire, donc à grands couplages et grandes amplitudes. Si on continue les solutions à ω_b fixée, nous observons que les amplitudes des solutions divergent pour les ondes de type H comme pour celles de type E . Le même comportement divergent est observé si on diminue la fréquence à C_K fixé suffisamment grande, comme montré en Fig. 7.7.

Les points de divergence, qui coïncident pour l’onde H et E , constituent une courbe dans le plan (ω_b, C_K) , illustrée en Fig. 7.10 (a) comme la ligne à carrés. Ce comportement divergent des solutions est lié à la forme du potentiel de Morse (??, Fig. ??) qui pour grandes amplitudes devient plat. Donc vers régimes de plus en plus non-linéaires l’amplitude d’oscillation augment juste à une valeur critique où l’oscillateur sort du puits de potentiel.

7.0.3 Instabilités réelles

Si nous considérons une onde stationnaire dans un potentiel de Morse et nous augmentons, par continuation, les couplages à fréquence ω_b fixée (donc aussi l’amplitude de l’onde augment), des instabilités réelles, pas présentées ni dans DNLS ni dans le potentiel quartique, apparaissent. Elles sont obtenues par des collisions des valeurs propres à $+1$ à des valeurs critiques du couplage, et elles se manifestent de façon différente selon la valeur de la fréquence, comme aussi selon le vecteur d’onde Q . Nous allons présenter le scénario de

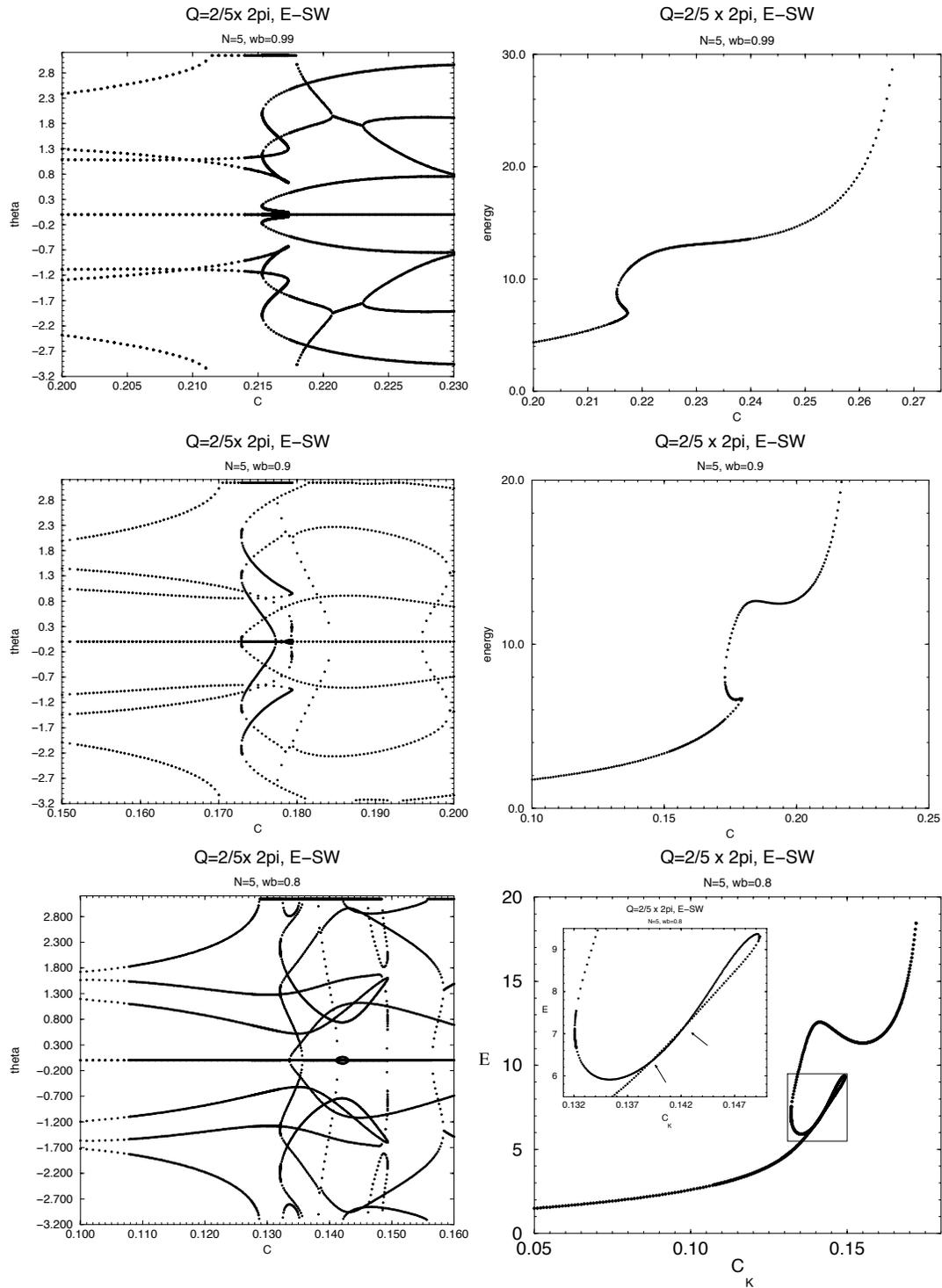


FIG. 7.6 – (a) Angles des multiplicateurs de Floquet et (b) énergie en fonction de C_K pour l'onde stationnaire de type E avec $Q = 4/5\pi$ et ((a) et (b)) $\omega_b = 0.99$, ((c) et (d)) $\omega_b = 0.9$, et ((e) et (f)) $\omega_b = 0.8$. Dans le zoom en Fig. (f) on peut observer les deux points d'intersection de la courbe d'énergie.

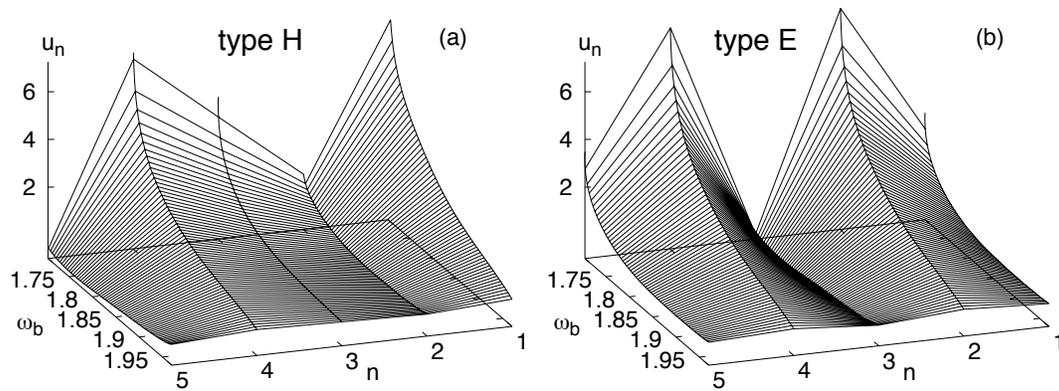


FIG. 7.7 – Continuation depuis la limite linéaire à couplage fixé $C_K = 0.8$ en diminuant la fréquence, pour une onde stationnaire de type H (a), et de type E (b), avec $Q = 4\pi/5$ dans le model de KG avec potentiel de Morse. Dans les deux cas, l’amplitude de l’onde diverge à $\omega_b \approx 1.701$.

ces bifurcations en commençant par des cas simples et, en suite, des cas plus complexes. Evidemment à ces collisions à $+1$ est associé un changement de stabilité. Nous montrerons qu’il existe un comportement dual entre onde de type H et E , et, de façon plus ou moins complexe en dépendant du valeur de fréquence, que un *inversion de stabilité* entre onde H et E est observable en correspondance de ces collisions.

7.0.3.1 L’inversion de stabilité

Déjà lors de l’étude sur les breathers simples, T. Cretegny [22, 24] a décrite le phénomène d’inversion de stabilité entre le breather sur un seule site (code ...0001000...) et celui sur deux sites (code ...0011000...) dans le potentiel de Morse et dans d’autres potentiels mous asymétriques. Nous retrouvons maintenant un scénario analogue d’inversion de stabilité entre le type H et E d’une onde stationnaire avec un certain vecteur Q .

Le mécanisme de collision des valeurs propres, qui amène au changement de stabilité, dépend du vecteur d’onde Q et du valeur de la fréquence. Nous rappelons aussi que, en diminuant la fréquence près de $\omega_b = 0.5$, on commence à observer des effets de résonances d’ordre deuxième ou supérieur (voir section 7.0.4.2). Tout ça influence l’observation claire du phénomène d’inversion de stabilité.

Commençons donc, à raison pédagogique, par un cas simple d’onde stationnaire avec petite celle unitaire et fréquence près de $\omega_b = 1$.

Inversion de stabilité simple Considérons une onde stationnaire avec $Q < \pi/3$ et près de la limite linéaire, où la condition (7.2) est vérifiée. Elle ait petite celle unitaire tel que

son onde de type E contient dans le code seulement une paire de consécutives $[+1 + 1]$ or $[-1 - 1]$ (par exemple, $Q = 4/5\pi$ ou $2/3\pi$).

Effectuons la continuation pour l'onde $Q = 4/5\pi$, à ω_b fixé et supérieur à une certaine valeur $\omega_b = \omega_I$ ($\omega_I \approx 0.9$ pour $Q = 4/5\pi$). On observe à un particulier valeur du couplage que pour l'onde H , qui est stable depuis la limite anti-continue, une couple de valeurs propres se déplacent sur le cercle unitaire, collident à $+1$ et sortent sur l'axe réel. L'onde devient instable pour une instabilité réel. Très près de cette valeur de C_K aussi l'onde de type E du même vecteur Q et ω_b , change ses propriétés de stabilité. En effet, les deux valeurs propres normalement présentes sur l'axe réel et que lui donne l'instabilité depuis $C_K > 0$, collident à $+1$ et rentrent sur le cercle unitaire. L'onde type E sera instable seulement pour éventuelles collisions de Krein ou collisions à -1 . Le scénario de cette collisions, pour l'onde type H et E sont illustrées en Fig. 7.8.

Le mode associé à l'instabilité réel a symétrie différente de la solution : en effet l'onde stationnaire de type H avec $Q = 4/5\pi$ est anti-symétrique en espace (code $[1-101-1]$), tandis que les vecteurs propres correspondantes aux valeurs propres réels sont symétrique en espace (voir Fig. 7.9). Cela signifie que ce mode n'interagit pas avec le mode de phase et donc il ne compromet pas la continuation de la solution. En effet cette collision à $+1$ ne correspond pas à un minimum de l'énergie. Ce mode est similaire au mode de pinning et il est (comme pour le cas du breather simple) associé a une forte augmentation de la mobilité [24, 25, 26].

Si nous calculons précisément les points de changement de stabilité pour l'onde stationnaire de type H et E , nous observons que la collision à $+1$ à une certaine fréquence fixée, pour l'onde de type E arrive pour des valeurs de C_K le germent inférieures que la correspondante onde de type H (voir le inset de Fig. 7.10 a) (DON'T DONE YET)). Ca signifie que, en absence d'autres mécanisme d'instabilité (comme dans le cas de systèmes de petite taille près de la limite linéaire) il y a un petit régime dans le plan (ω_b, C_K) où les deux ondes sont contemporement stables. (Nous rappelons que, au contraire, dans le cas du breather simple il y a un petit régime d'instabilité simultané [24]). Quand on augment le couplage la zone de stabilité simultané diminue, comme montré en Fig. 7.10 (b), juste à que à un certain point ($\omega_b \approx 2.1$ et $C_K \approx 1.0$ pour le cas en Fig. 7.10 (a)) les 2 courbes qui définissent le changement de stabilité pour l'onde H et E convergent et croisent la courbe de dispersion linéaire (??). Donc, pour valeur de C_K supérieures à ce point, le scénario près de la limite linéaire est opposée à celui trouvé précédemment dans l'approximation DNLS. En effet l'onde type H devient immédiatement instable, pour la présence de valeur propre sur l'axe réel, tandis que l'onde E reste stable dans un intervalle près de la limite linéaire pour des systèmes de taille finie. Des instabilités de Krein pourront en suite apparaître loin de la limite linéaire.

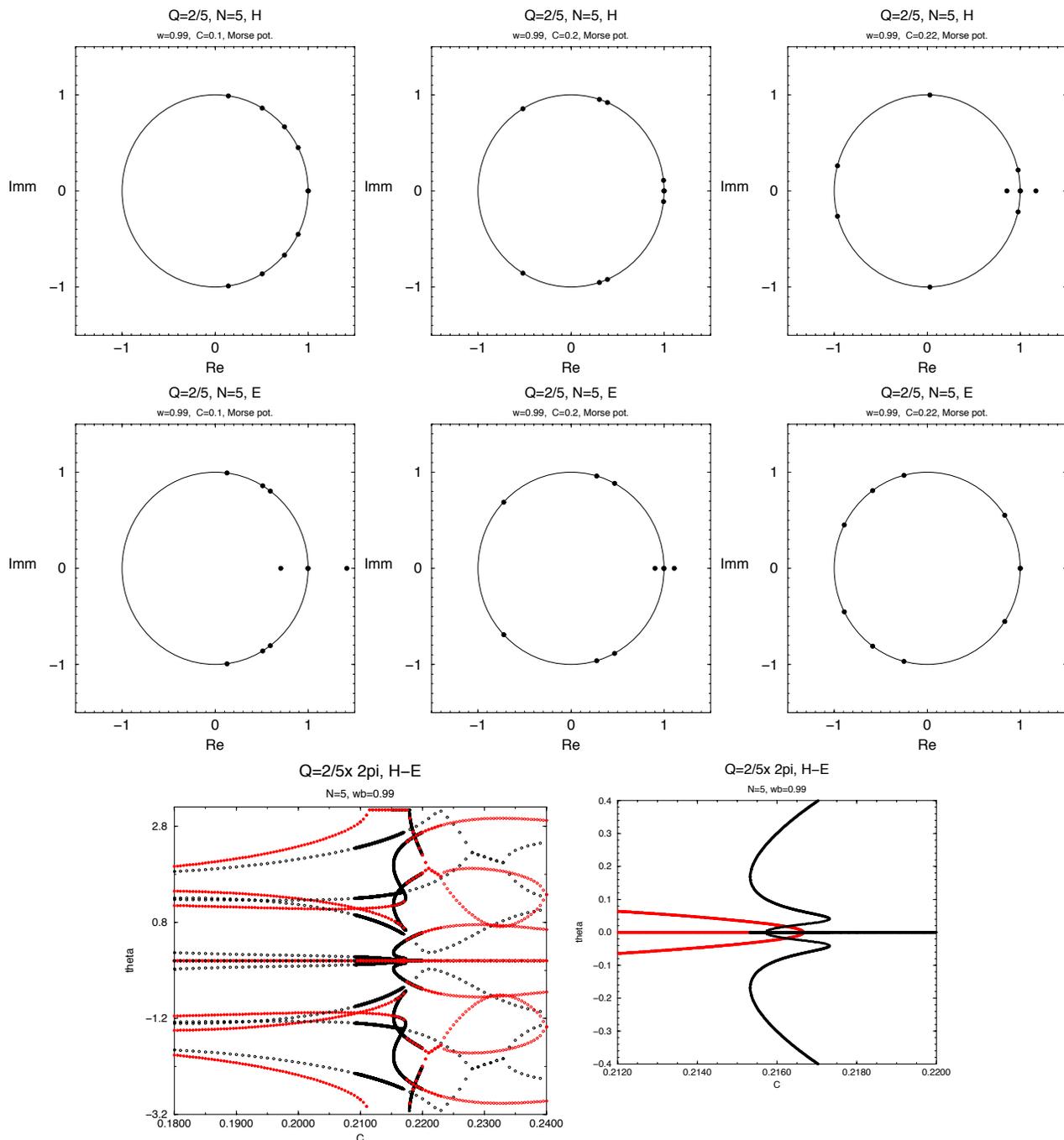


FIG. 7.8 – Scénario de la collision à $+1$ des valeurs propres pour l'onde type H ((aH),(bH) et (cH)) et type E ((aE),(bE) et (cE)) pour l'onde stationnaire avec $Q = 4/5\pi$ à $\omega_b = 0.99$. Une couple de valeurs propres sur le cercle unitaire (aH) (onde type H) ou sur l'axe réel (aE) (onde type E), approchent (bH-bE) et collident à $+1$ (à $\omega_b \approx 0.21666$ pour l'onde H et $\omega_b \approx 0.21573$ pour l'onde E). Les valeurs propres de l'onde H sortent sur l'axe réel (cH) et l'onde devient instable pour une instabilité réelle, tandis que ceux de l'onde E rentrent sur le cercle unitaire (cE) et l'onde E devient stable. En (f) sont montrés les angles des multiplicateurs de Floquet, avec in grandissement en (g), pour l'onde H (courbe rouge) et E (courbe noir) lors de l'inversion de stabilité.

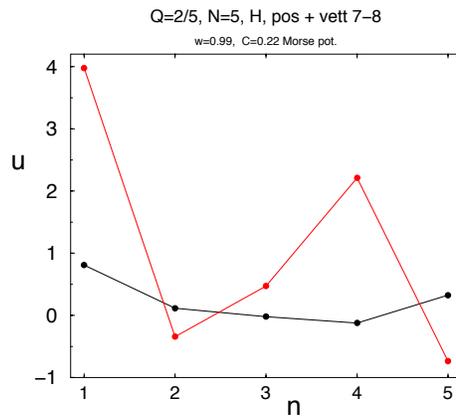


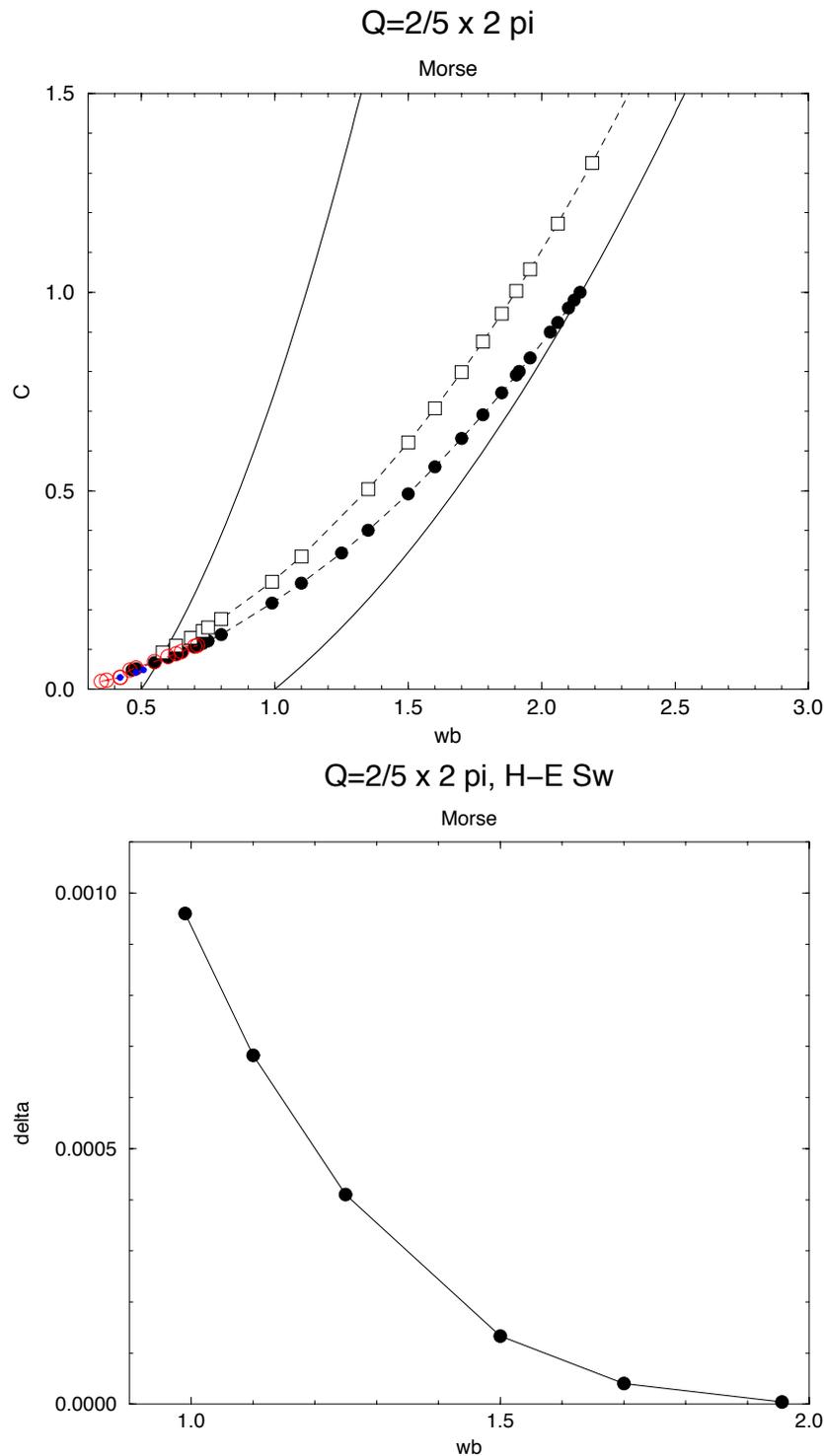
FIG. 7.9 – Amplitude de l’onde stationnaire (courbe rouge) de vecteur $Q = 4/5\pi$, à $\omega_b = 0.99$ et $C_K = 0.22$, en correspondance de l’instabilité réelle. Elle est anti-symétrique par rapport au site central. La courbe noire est l’amplitude du mode instable, correspondante aux valeurs propres réels pour les même C_K et ω_b . Elle est, au contraire de la précédente, symétrique par rapport au centre.

Evidemment nous retrouvons le même type de scénario si on diminue la fréquence à C_K fixé. En Fig. 7.11 nous reportons l’exemple pour la continuation en ω_b de l’onde de $Q = 4/5\pi$ à $C_K = 0.8$ fixé, en montrant le module des valeurs propres de la matrice de Floquet \mathbf{F}_0 .

Inversion multiple de stabilité. Considérons maintenant le cas d’une onde stationnaire de vecteur Q tel que la celle unitaire de son onde de type E contient plus que un seul couple de consécutives $[+1+1]$ or $[-1-1]$. Etudions, par exemple, l’onde $Q = 3/10 \times 2\pi = 3/5\pi > \pi/3$) dont le code de son onde E est $[01-1-110-111-1]$.

Le mécanisme d’inversion de stabilité est maintenant plus complexe, parce qu’il concerne non plus 1 seule couple de valeurs propres, mais deux (en générale il concerne un numéro égal au numéro des paires de $[+1+1]$ et $[-1-1]$ dans le code de l’onde E). Il se decompose en plusieurs passages intermediaires, et plusieurs collisions à $+1$ sont présentes.

Les Figs. 7.12 et 7.13 illustrent le comportement des valeurs propres pour l’ondes stationnaires de type H et E de vecteur $Q = 3/5\pi$. L’instabilité est causée par 4 valeurs propres réelles et, comme montré en Fig. 7.13, l’inversion stable-instable se manifest par étapes. On obtient, par collisions de couples de valeurs propres à $+1$ en points plus au moins proches pour l’onde E et l’onde H , deux régimes dans lesquelles l’onde H , initialement stable (Fig. 7.12 (aH)), devient instable pour 4 valeurs propres réels (dH-fH) pendant que l’onde E , qui depuis la limite anti-continue était instable pour 4 valeurs réels (Fig. 7.12 (aE, bE)), devient stable (Fig. 7.12 (dE, fE, gE)). Néanmoins ce changement de stabilité se manifeste de façon graduelle avec passage intermédiaire, sur l’axe réel ou sur le cercle unitaire, de un seul couple



Tue Mar 20 16:12:46 2001

FIG. 7.10 – Diagramme de phase pour l'onde stationnaire avec $Q = 4\pi/5$ dans le model KG avec potentiel de Morse. La courbe inférieure noire est la courbe de dispersion linéaire (?), celle avec les cercles pleins (qui en effet sont deux courbes très proches, comme illustré dans la figure incluse) indique la ligne d'inversion de stabilité entre les ondes stationnaires de type H et E (caractérisées par les collisions des valeurs propres de \mathbf{F}_0 à $+1$). La courbe à carrés indique la ligne de divergence des amplitudes, et la ligne supérieure bleue est la limite de la bande de la deuxième harmonique. En (b) est illustrée la différence, à fréquence fixée, entre les valeurs de couplage auxquelles la stabilité pour l'onde H et E change.

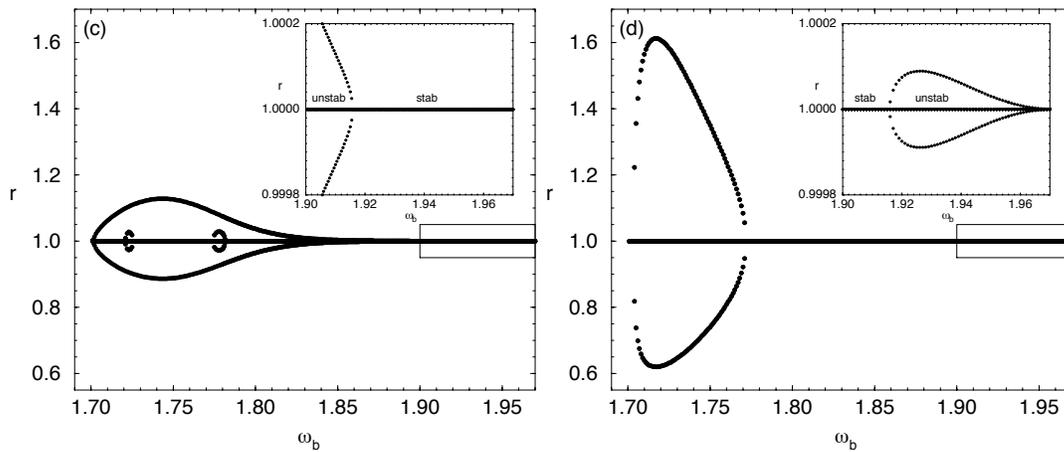


FIG. 7.11 – Module des valeurs propres $r\epsilon^{i\theta}$ de \mathbf{F}_0 correspondante à une celle unitaire ($N=5$) de l’onde stationnaire avec $Q = 4/5\pi$ de type H et E pour la continuation comme en Fig. 7.7. Dans les figures en insertion sont présentés l’agrandissement de la région entre la limite linéaire et le point d’inversion de stabilité, qui est à $\omega_b \approx 1.9155$. Les autres instabilités sont oscillatoires données par des collisions de Krein.

de valeurs propres à la fois qui collision à $+1$. Les régimes de stabilité simultanée observés précédemment sont maintenant des régimes d’instabilité simultanée “intermédiaire” (deux valeurs propres sur l’axe réel soit pour l’onde H soit pour l’onde E) (Fig. 7.12 (cH-cE, dH-dE)), si on considère que la “pleine” instabilité est donnée par tous les quatre valeurs propres sur l’axe réel.

Une situation toutes à fait similaire au cas de simple inversion de stabilité (Fig. 7.8 et 7.11) apparaît, enfin, à grandes couplages avant que l’amplitude diverge, où (Fig. 7.13 (g) et (h)) l’inversion de stabilité est causée par deux seules valeurs propres.

7.0.4 Inversion à plus petites fréquences

Si on effectue la continuation en couplage à des fréquences fixées de plus en plus petites, nous avons vu que la transition du premier ordre se manifeste de façon de plus en plus compliqué et donc pouvoir individuer l’inversion de stabilité devient assez compliqué. Il serai nécessaire de déplier les courbes pour pouvoir suivre l’histoire des valeurs propres et pouvoir comparer le changement de stabilité de l’onde H et l’onde E . Comme nous avons expliqué précédemment (paragraphe 1.24=Position de la transition), les problèmes de ‘pliure’ de la solution se manifestent initialement pour l’onde E , pendant que le comportement de l’onde H est encore régulier. Nous présentons comme exemple illustrative en Fig. 7.14 les angles des multiplicateurs de Floquet pour l’onde stationnaire type H et E de $Q = 4/5\pi$ autour de

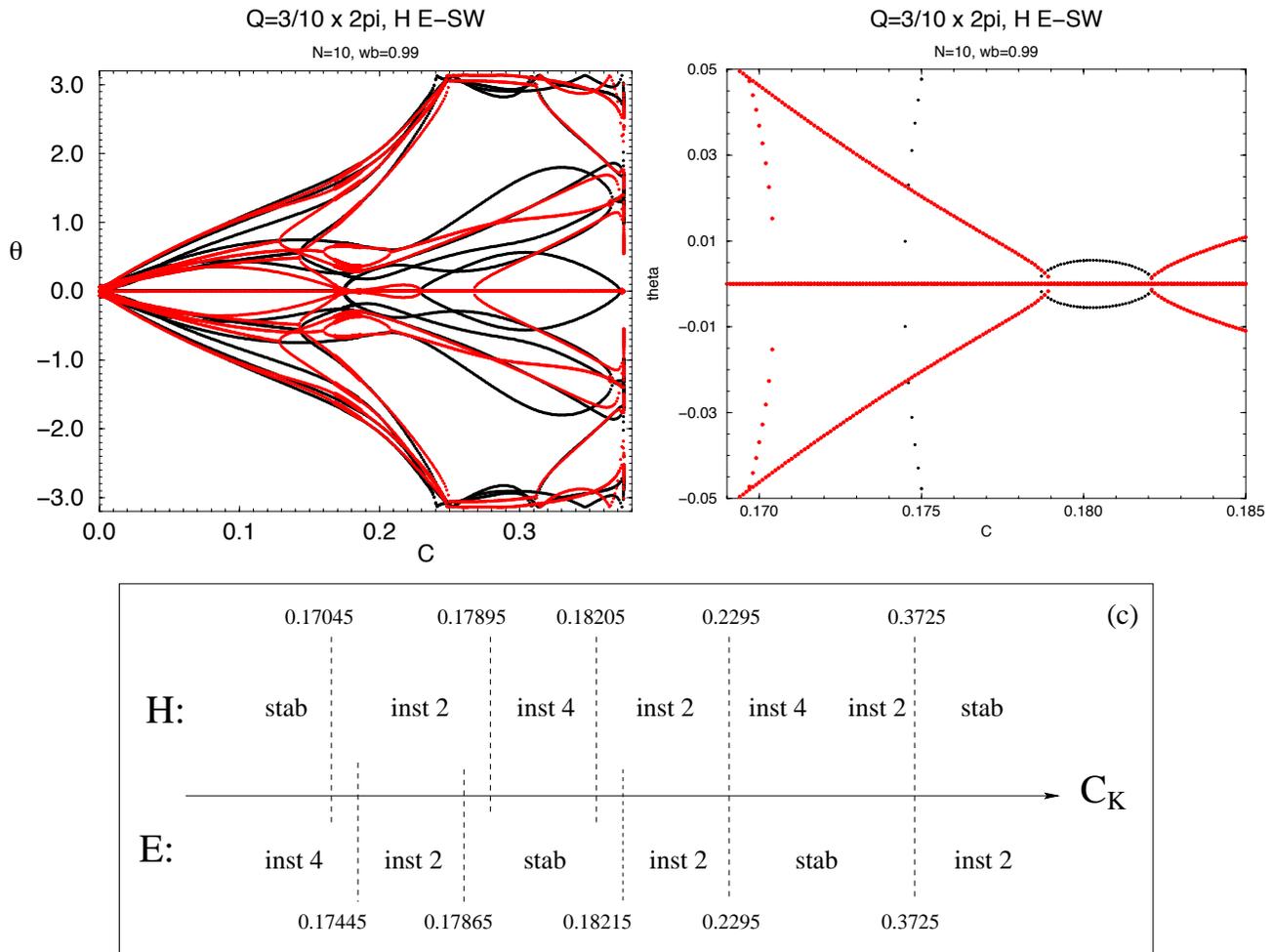


FIG. 7.12 – Angles des multiplicateurs de Floquet pour une onde stationnaire de type H (courbe rouge) et E (courbe noir) avec $Q = 3/5\pi$, à $\omega_b = 0.99$ et en augmentant C_K . En (b) un agrandissement des premières collisions à $+1$ pour les deux ondes est illustré. En (c) le scénario d'inversion de stabilité entre onde H et E est schématisé. Les valeurs de C_K auxquelles il y a collision à $+1$ sont reportés, ainsi que les propriétés de stabilité de chaque onde dans l'intervalle, selon la légende : *stab*=stable, *inst 2*=instable pour deux valeurs propres réelles, *inst 4*=instable pour quatre valeurs propres réelles

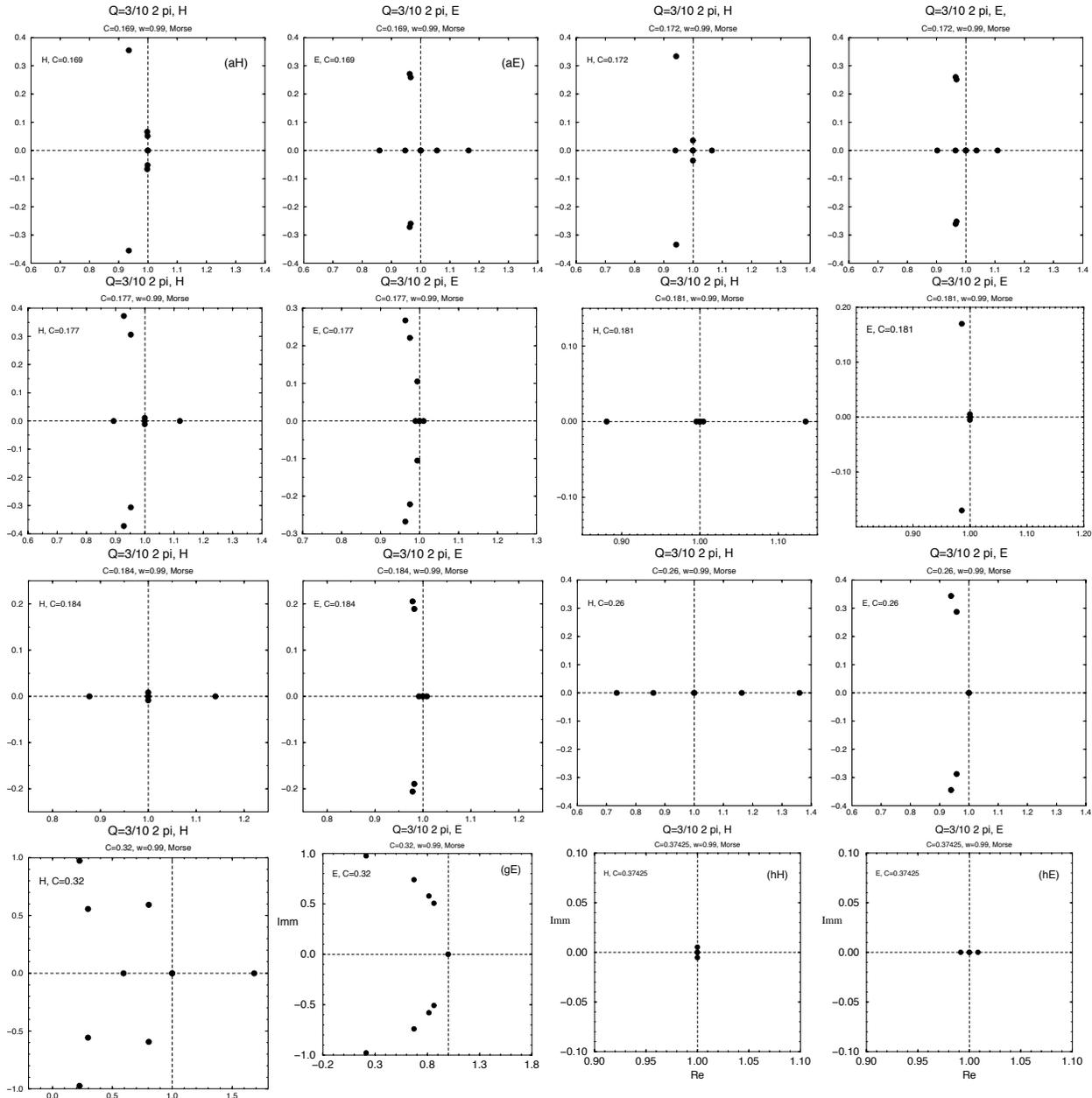


FIG. 7.13 – Comportement des multiplicateurs de Floquet sur le cercle unitaire lors de l'inversion de stabilité entre onde H (première et troisième colonne) et E (deuxième et quatrième colonne), comme pour Fig. 7.12. En Figs. (a), (d), (f) on a "pleine" inversion de stabilité (une onde est stable et l'autre instable avec tous les quatre valeurs propres réelles). En Figs. (c) et (e) on a un régime de instabilité "intermédiaire simultané" (chaque onde a deux valeurs propres sur l'axe réel). En Figs. (g) et (h) on observe un scénario comme celui d'inversion simple d'instabilité.

la zone où on doit observer l'inversion de stabilité, qui se superpose, pour l'onde E à la zone de transition de premier ordre.

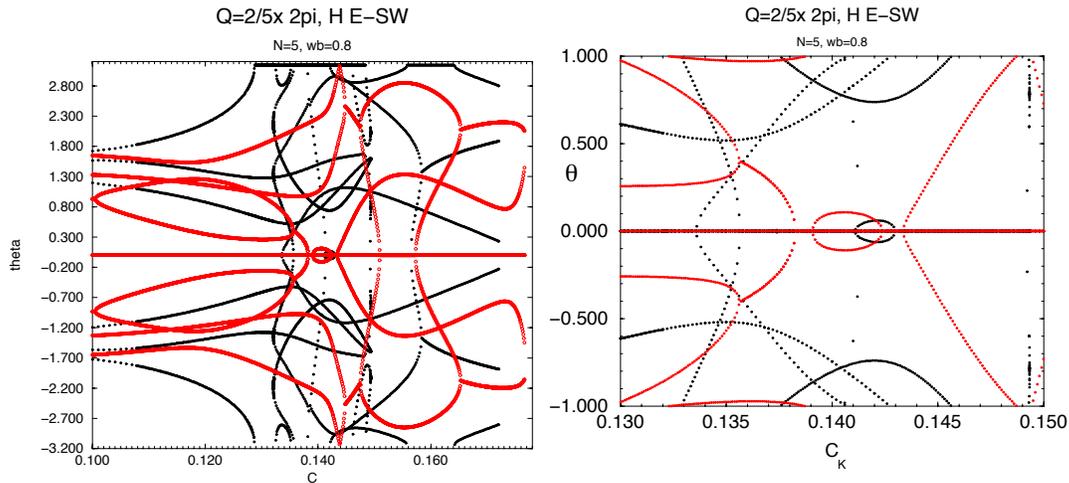


FIG. 7.14 – Angles des multiplicateurs de Floquet pour une onde stationnaire de type H (courbe rouge) et E (courbe noir) avec $Q = 4/5\pi$ à $\omega_b = 0.8$ en augmentant C_K . En (b) agrandissement de la zone des collisions à $+1$.

Nous n'analyserons pas en détails l'inversion de stabilité dans ces cas. Cependant, nous pouvons hypothèse que le phénomène d'inversion de stabilité se manifeste encore, car, une fois dépliée l'onde E le scénario de stabilité sera sostantialement complémentaire à celui de l'onde H .

Néanmoins, nous allons dans la suite illustrer un autre mécanisme d'instabilité qui apparaît à ces valeurs de fréquence plus petites et qui nous appellerons *double instabilité*.

7.0.4.1 Double instabilité

En effectuant la continuation en couplage à fréquence fixée et inférieure à une certaine valeur dépendant de Q , (par exemple, pour $Q = 4/5\pi$ $\omega_b \lesssim 0.9$ (à contrôler exactement), pour $Q = 3/5\pi$ $\omega_b \lesssim 0.85$ STILL TO CHECK) on observe que les instabilités de Krein se superposent aux instabilités réels.

La particularité de cette double instabilité est la collision de deux couples de valeurs propres complexes conjugués, provenant soit d'un précédent instabilité de Krein soit d'une bifurcation à $+1$, sur l'axe réel.

Nous allons présenter des exemple de cette instabilité double, dans le cas d'instabilité réel simple et multiple, sans l'intention, en tout cas, de analyser en détail le phénomène.

Avec instabilité réelle simple En Fig. 7.15 le comportement des valeurs propres pour une onde stationnaire de type H avec $Q = 4/5\pi$, à $\omega_b = 0.8$ a présenté. Nous observons que pour l'onde H la double instabilité se manifeste par deux couples de valeurs propres qui par collision de Krein sortent cercle unitaire (une instabilité de Krein) qui collident en suite en couples sur l'axe réel en devenant aussi des instabilités réels.

Avec instabilité réelle multiple Le scénario de double instabilité pour l'onde E , par rapport à celui pour l'onde H , se présent de façon complémentaire, avec une instabilité réelle que devient aussi instabilité de Krein. Comme exemple, nous présentons en Fig. 7.16 et 7.17 l'évolution des valeurs propres pour les ondes stationnaire de type E avec vecteur $Q = 3/5\pi$, à $\omega_b = 0.6$. Le comportement se présent plus complexe à cause de la double couple de $[+1 + 1]$ et $[-1 - 1]$ dans la séquence codant de l'onde et donc, comme expliqué précédemment, quatre valeurs propres seront impliqué dans l'instabilité réel. En Fig. 7.17 on observe les deux couples de valeurs propres réels, dont une provenant d'une bifurcation à $+1$, qui collisionent entre eux. Ce scénario ressemble à une collision de Krein mais qui ne s'effectue pas sur le cercle, mais sur l'axe réel. Les mêmes couples retournent en suite sur le cercle par une collision de Krein (rentrent). On a donc superposition d'instabilité réelle et de Krein, en séquence inverse que pour l'onde H .

7.0.4.2 Résonance de deuxième ordre

Si on effectue la continuation à petites fréquences (mais $\omega_b > 0.5$), près du point final de divergence, on observe des nouvelles collisions à $+1$ (referons nous, par exemple, à l'onde type H avec $Q = 4/5\pi$ à $\omega_b = 0.8$ en Fig. 7.15 (a), qui présent deux collisions à $+1$ à $C_K \approx 0.1501$ et $C_K \approx 0.157$). Elles sont générées par des valeurs propres qui ont effectué un entier tour du cercle unitaire en collisionnant aussi à -1 , et nous les associons donc à des résonances de deuxième ordre. En effet, si on considère l'Eq. ??, nous devrions avoir des résonances de deuxième ordre seulement à des couplages plus élevés (par exemple à $C_K \approx 0.431$, pour $Q = 4/5\pi$ à $\omega_b = 0.8$), où parfois, comme dans le cas considéré, n'existe plus à ces valeurs de couplage car elle a déjà divergé. En effet, pour les valeurs où on observe ces résonances l'amplitude est assez grande ($u \approx 7.4$) et donc l'onde est fortement non-linéaire. Cela peut justifier un si grand écart entre le point de résonance pour les phonons linéaires et celui trouvé numériquement (pour les phonons non-linéaires).

En suite, pour fréquence près de $\omega_b = 0.5$ la courbe de limite d'existence de la solution (Fig. 7.10 (a)) rencontre la courbe de dispersion pour la deuxième harmonique, et une résonance du deuxième ordre est nécessairement rencontrée. Nous n'analyserons pas ce demain de fréquence, où beaucoup de nouvelles collisions apparaissent, mais nous analyserons un phé-

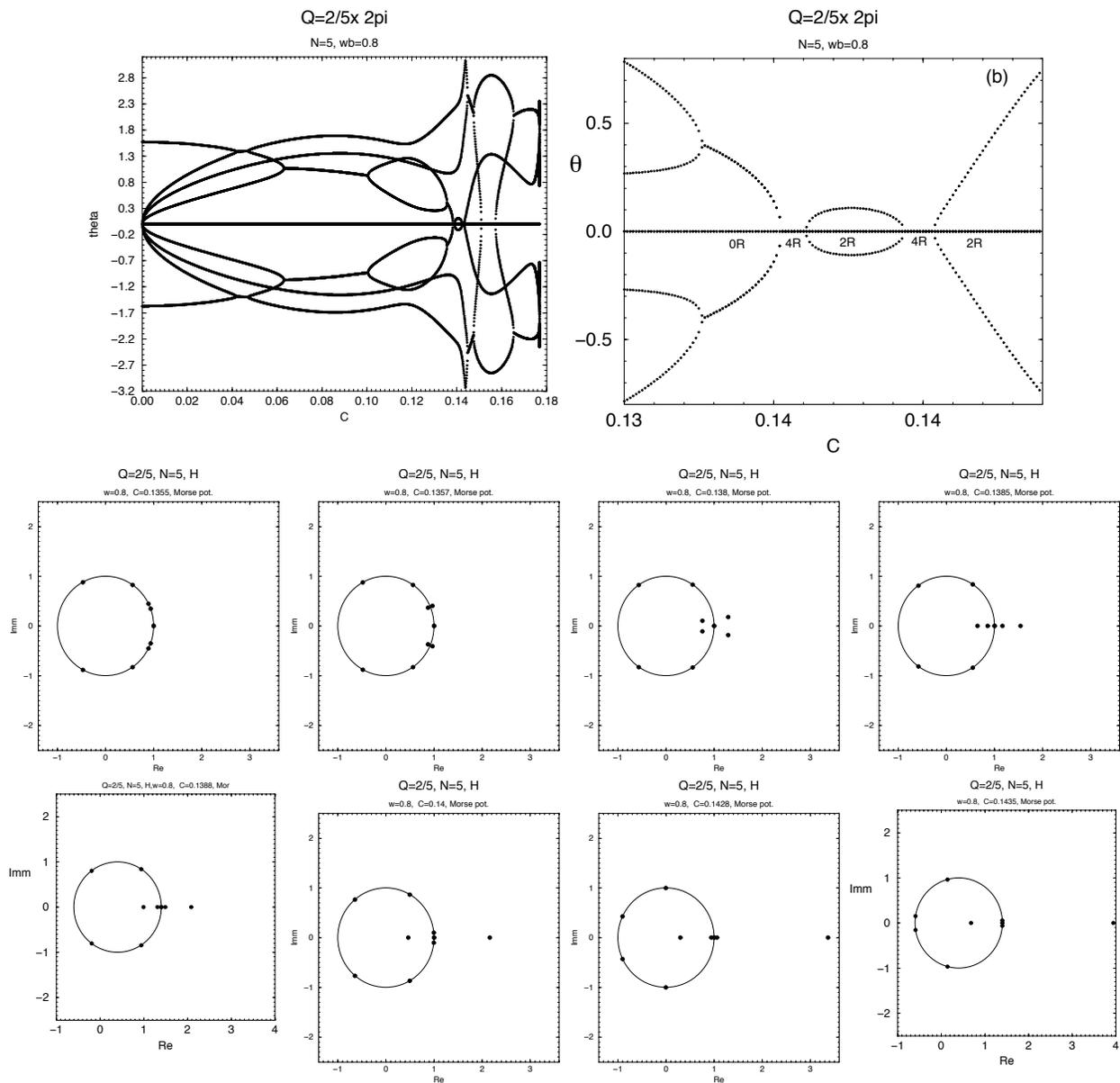


FIG. 7.15 – Multiplicateurs de Floquet pour une onde stationnaire de type H avec $Q = 4/5\pi$, à $\omega_b = 0.8$, en augmentant C_K . En (a) est reporté leur angle et en (b) l'agrandissement de la zone de double instabilité (le numéro de valeurs propres réels, aucun (0R), deux (2R) ou quatre (4R), est indiqué). Deux couples de valeurs propres complexes conjuguées (c) collisionnent sur le cercle unitaire en donnant des instabilités de Krein (d). Elles se déplacent vers l'axe réel (e) où, à des certaines valeurs de C_K collisionnent en couple (f) et restent sur l'axe en donnant une instabilité réelle de 4 valeurs propres. Deux entre ces valeurs propres qui se éloignent le long de l'axe réel (g), collisionnent en suite à $+1$ (bifurcation à $+1$) et il rentrent sur le cercle unitaire (h). Le systeme diminue dont son instabilité à seulement 2 valeurs propres sur l'axe réel. Les 2 valeurs propres rentrés collisionnent à nouveau à $+1$, en ressortant sur l'axe réel (i) pour collisionner encore à $+1$ et rentrer sur le cercle (l).

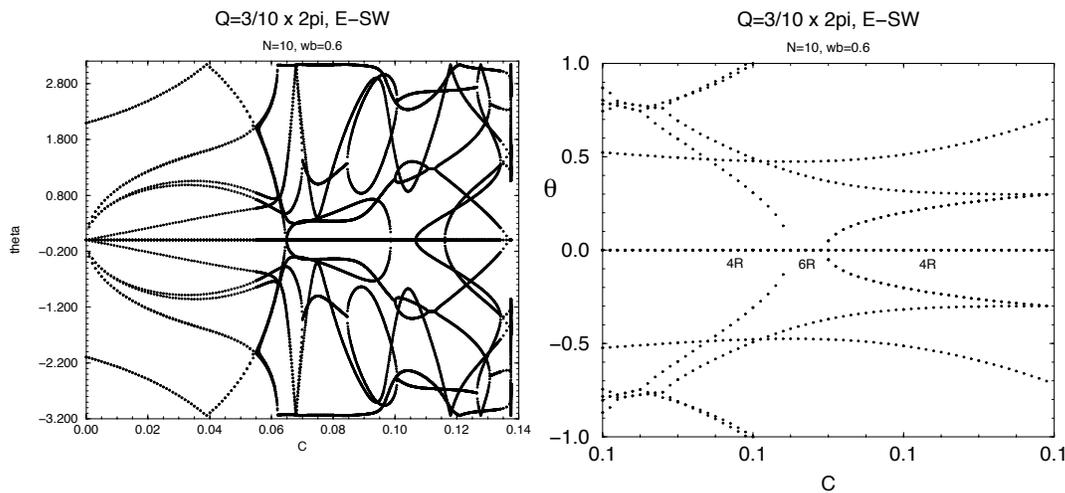


FIG. 7.16 – Angles des multiplicateurs de Floquet (a) pour une onde stationnaire de type E avec $Q = 3/5\pi$, à $\omega_b = 0.6$, en augmentant C_K . En (b) agrandissement de la zone des premières collisions à $+1$. Le numéro de valeurs propres réels est indiqué en figure selon la légende expliquée en Fig. 7.15.

nomène que se vérifie en croisant la valeur de bande $\omega_b = 0.5$, c'est-à-dire, un changement dans le code de la solution.

Changement de code Considérons une onde stationnaire de vecteur Q . Selon l'Eq. 3.22, à la limite anti-continue on lui associe une séquence codant. Cependant, nous allons montrer que ce code n'est pas univoque pour une même solution. En effet, si nous effectuons la continuation d'une onde stationnaire en diminuant ω_b à C_K fixé, en croisant la valeur $\omega_b = 0.5$ les codes qui étaient des 0 à $\omega_b > 0.5$ deviennent des codes ± 2 à $\omega_b < 0.5$. En Fig. 7.19 est schématisé ce scénario pour l'onde de type H de vecteur $Q = 4/5\pi$, dont la séquence codant change de $[1 - 101 - 1]$ à $[1 - 121 - 1]$.

Ce changement, comme est montré en Tab. 7.1, se réalise pour tous les code 0 dans la séquence définie à $\omega_b > 0.5$, en suivant des simples règles de signe. Si le code 0 est entre deux codes ± 1 il change en $+2$, si plusieurs code 0 sont en succession ils changent en code $+2$ et -2 alternés.

En plus on observe que pour des couplages très petits ($C_K < 0.03$ REALLY I MUST STILL CHECK IT), ce changement de code se réalise sans aucune bifurcation des valeurs propres (Fig. 7.18).

Les résultats trouvés prouvent donc que une même solution avec un certain vecteur d'onde Q a deux différents codes, et donc deux différentes limites anti-continues. La continuation de la solution entre les 2 limites anti-continue (à fréquence inférieure et supérieure à $\omega_b = 0.5$,

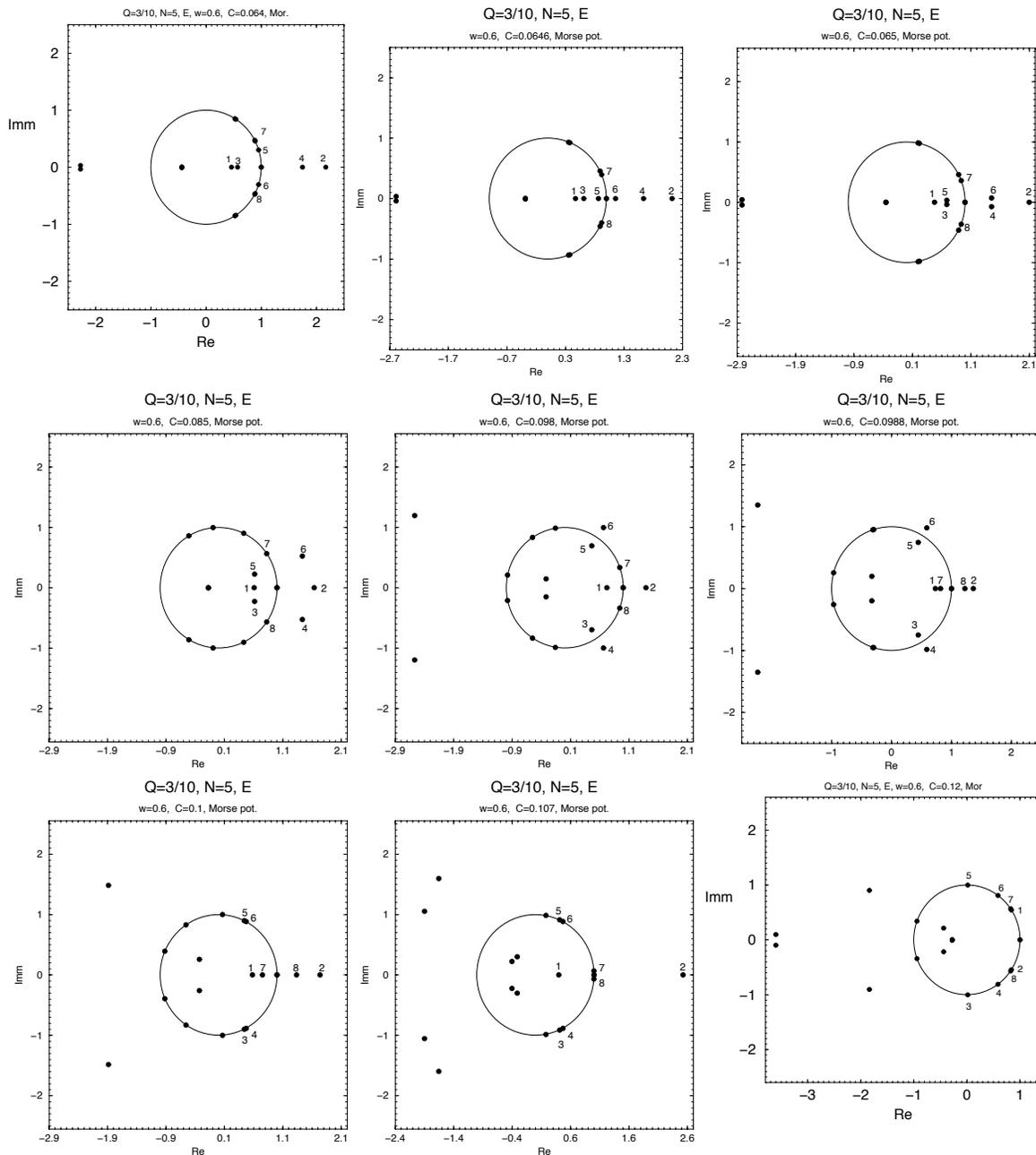


FIG. 7.17 – Représentation sur le cercle unitaire des multiplicateurs de Floquet de la Fig. 7.17. Nous avons numéroté ceux qui sont pertinentes pour cette instabilité. L'onde est initialement instable pour 4 valeurs propres (le 1, 2, 3 et 4) sur l'axe réel (a). Deux valeurs propres (le 5 et 6) bougent sur le cercle, collisionnent à +1 et sortent sur l'axe réel (b). Deux couples de valeurs propres collisionnent sur l'axe réel (le 3 avec le 5, et le 4 avec le 6) et sortent de l'axe (c). Ces deux couples se déplacent dans le plan (d-e) pour rentrer sur le cercle unitaire par une collision de Krein rentrant (f-g). Dans le même temps, deux autres valeurs propres (le 7 et 8) se déplacent sur le cercle, collident à +1, sortent sur l'axe réel (f) et y rentrent après une autre collision à +1 (h). Ce dernier scénario est tout à fait similaire à celui de Fig. 7.8 et nous pensons qu'il est probablement associé à l'inversion de stabilité. En suite, aussi le dernier couple réel rentre sur le cercle en collisionnant à +1.

$Q = 4/5\pi$ (H)										
1	-1	0	1	-1						
1	-1	2	1	-1						
$Q = 3/5\pi$ (H)										
1	0	-1	1	0	-1	0	1	-1	0	
1	2	-1	1	2	-1	2	1	-1	2	
$Q = 2/11\pi$ (H)										
0	0	-1	0	0	0	0	0	1	0	0
-2	2	-1	2	-2	2	-2	2	1	2	-2

TAB. 7.1 – Exemples de changement dans la séquence codant des codes 0 en code ± 2 en traversant la valeur $\omega_b = 0.5$. Pour chaque valeur de Q proposé la première ligne indique le code à $\omega_b > 0.5$, et la deuxième celui à $\omega_b < 0.5$.

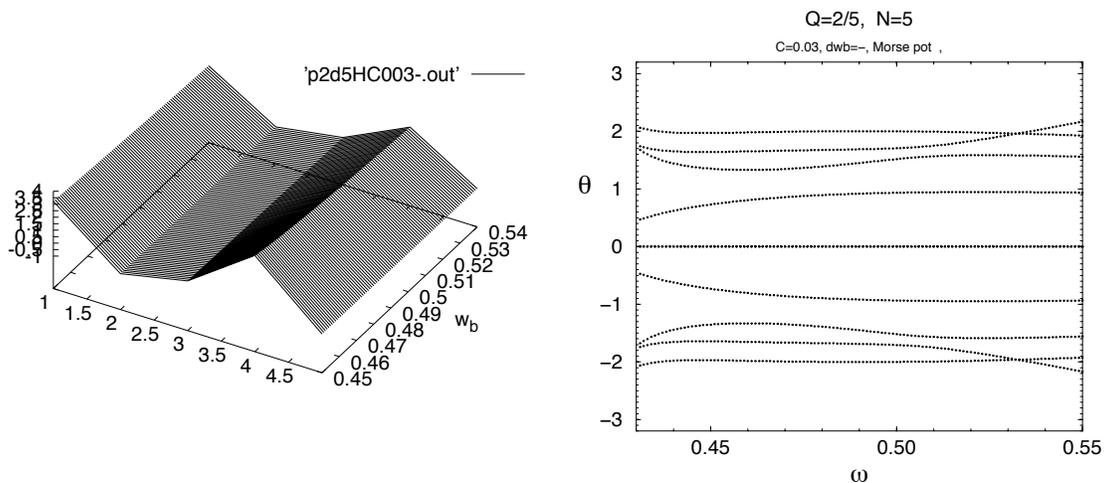


FIG. 7.18 – Amplitude et angles des multiplicateurs de Floquet pour l'onde stationnaire type H avec $Q = 4/5\pi$ à $C_K = 0.03$, en traversant le bord de bande $\omega_b = 0.5$, donc le long du changement des codes 0 en 2. Aucune bifurcation se manifeste et le comportement de l'amplitude est parfaitement lisse.

selon le chemin [A-B-C-D] en Fig. 7.19) est réversible.

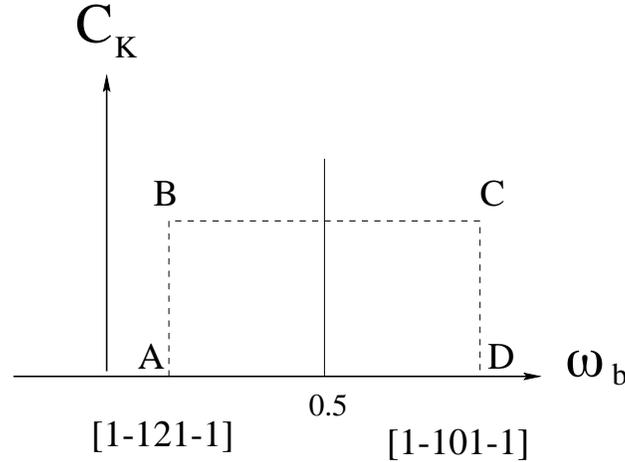


FIG. 7.19 – Continuation de l’onde stationnaire type H de vecteur $Q = 4/5\pi$, en traversant le bord de bande $\omega_b = 0.5$. Le code de cette solution est $[1-101-1]$ à $\omega_b > 0.5$ (selon l’Eq. 3.22), tandis qu’il devient $[1-121-1]$ pour $\omega_b < 0.5$.

Nous savons que l’onde stationnaire avec code contenant des ± 2 ne peut exister que pour $\omega_b < 0.5$, tandis que celle avec codes 0 peut exister pour toute valeur de ω_b . Il est donc naturel de s’interroger sur l’existence de la solution avec code 0 aussi à $\omega_b < 0.5$. Considérons encore l’onde stationnaire de type H avec $Q = 4/5\pi$, dont nous connaissons que le code, $[1-101-1]$ à $\omega_b > 0.5$, devient $[1-121-1]$ à $\omega_b < 0.5$. Construisons maintenant depuis $C_K = 0$ et à $\omega_b < 0.5$ la correspondante onde stationnaire avec code 0 ($[1-101-1]$). Cette onde n’est pas continuable pour $\omega_b > 0.5$ et en effet en augmentant C_K depuis la limite anti-continue à $\omega_b < 0.5$ la solution de code $[1-101-1]$ bifurque avec celle de code $[1-1-21-1]$, comme montré en Fig. 7.20.

7.0.5 Résonance du deuxième ordre

Étudions maintenant les ondes stationnaires avec vecteur $Q < \pi/3$. Dans ce cas les résonances de deuxième harmonique seront présentes aussi dans le régime linéaire pour couplages suffisamment grands. Le scénario pour petites amplitudes, c’est-à-dire à petits couplages et près de la limite linéaire, est similaire à celui étudié dans le modèle quartique pour les résonances de troisième ordre et illustré en Fig. 6.10.

Pour effectuer l’étude nous considérerons l’onde stationnaire de type H avec vecteur $Q = 2/11\pi$. Son code, à $C_K = 0$, est $[00-10000100]$, et donc, comme rappelé au paragraphe (7.0.0.4), est anti-symétrique par rapport au site centrale.

Effectuons la continuation depuis la limite anti-continue en augmentant le couplage à

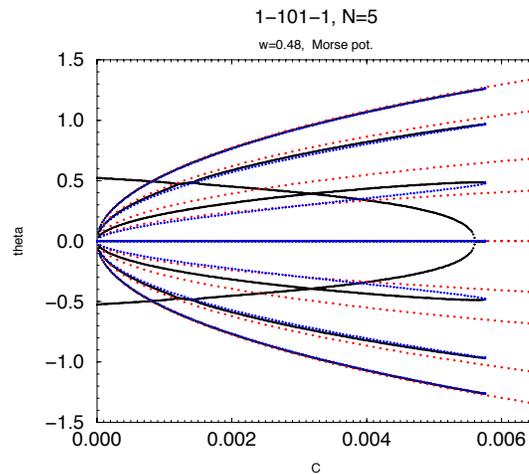


FIG. 7.20 – Angles des multiplicateurs de Floquet pour la continuation à $\omega_b = 0.48$ en augmentant C_K , de l’onde stationnaire type H de code [1-121-1] (courbe tiretée rouge), [1-101-1] (courbe noir), et [1-1-21-1] (courbe bleue). L’onde [1-101-1] et [1-1-21-1] bifurquent ensemble à $C_K \approx 0.00575$, tandis que l’onde [1-121-1] est continuable juste à la divergence à l’infinie.

fréquence fixée. On observe, de façon similaire au cas quartique, que la solution en passant par des collisions à $+1$ des valeurs propres (Fig. 7.21 (a) et (b)) réalise une résonance de deuxième ordre avec une onde dont le vecteur nous indiquerons Q' . Cette onde peut être continuée à grands couplages juste à qu’elle diverge en amplitude à une certaine valeur finie du couplage.

En particulier, la première bifurcation (à $C_K \approx 0.6505$ pour $Q = 2/11\pi$ à $\omega_b = 0.9$ en (Fig. 7.21 (d)) signale le passage à une solution intermédiaire instable, qui en suite, avec une autre bifurcation (à $C_K \approx 0.7865$) passe à l’onde finale Q' (stable par rapport aux instabilités réels), de fréquence double $2\omega_b = 1.8$. Une précise condition doit être accomplie par Q' pour faire résonance avec Q (voir paragraphe 7.0.5.1 “Condition de résonance”).

A différence du cas étudié dans le cas quartique (Fig. 6.10 (d)), la solution intermédiaire présente elle aussi des bifurcations dues à l’éventuelle présence d’autres instabilités réelles, (dont le numéro dépende probablement de nombre de zéro dans le code de l’onde), comme montré en Fig. 7.21 ((d)-(l)).

7.0.5.1 Condition de résonance

Dans le potentiel mou de Morse un’onde stationnaire de type H ou de type E de vecteur Q et fréquence ω_b effectue, à un particulier valeur du couplage, résonance de deuxième ordre avec une onde de vecteur Q' , de type E et, évidemment, de fréquence $2\omega_b$, si et seulement si

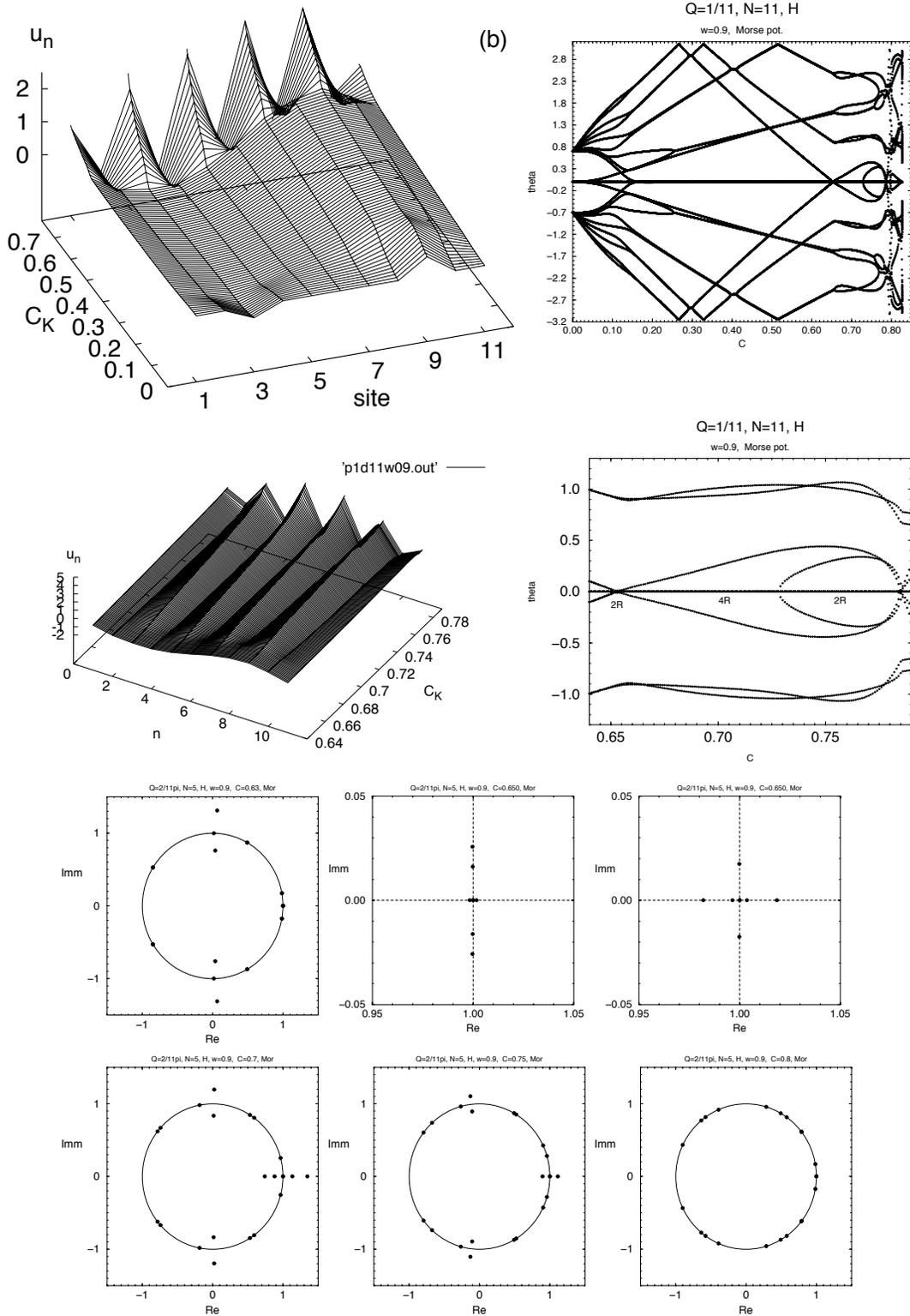


FIG. 7.21 – Amplitudes (a) et angles (b) des multiplicateurs de Floquet pour la première résonance de deuxième ordre pour l’onde stationnaire avec $Q = 2/11\pi$ à $\omega_b = 0.9$, avec agrandissement en (c) et (d) respectivement, de la solution intermédiaire qui existe entre la première bifurcation à $C_K \approx 0.6505$ et la bifurcation à $C_K \approx 0.7865$. En (d) le nombre des valeurs propres réels est indiqué selon la légende de Fig. 7.15. Les multiplicateurs de Floquet pour la solution intermédiaire sont illustrés en (e)-(l)

Q' est un multiple entier de Q :

$$Q' = mQ \text{ mod } 2\pi \quad (7.3)$$

et la résonance se réalise avec le vecteur Q' le plus proche de π . Le fait que l'onde Q' soit de type E , aussi si l'onde initiale est de type H , est conséquence du fait que l'onde Q' doit avoir symétrie compatible avec celle de Q .

La condition (7.3) pour le potentiel de Morse est équivalent à celle (6.6) pour le potentiel quartique à l'exception du fait qu'il n'y a plus de restrictions sur la parité du multiple de Q (m est maintenant un entier pair ou impair).

7.0.5.2 L'onde résonante

Comme il est aussi confirmé par la condition (7.3), l'onde, avec fréquence qui appartient à la deuxième harmonique de ω_b et qui résonne avec l'onde de type H avec $Q = 2/11\pi$, est l'onde de type E de vecteur $Q' = 10/11\pi = 5Q$. En Fig. 7.21 (a) et (b) est représenté sa continuation, lisse, en couplage à $\omega_b = 0.8$ fixée, depuis la limite anti-continue à travers la résonance et juste à la divergence à l'infinie.

Les points ² où se réalise la résonance et donc le changement de vecteur d'onde constituent un courbe dans le plan (ω_b, C_K) (Fig. 7.22). A la limite linéaire cette courbe coïncide avec la courbe de dispersion de la deuxième harmonique pour l'onde résonante Q' , tandis que loin de cette limite elle se trouve au-dessus puisqu'elle représente les phonons non-linéaires résonants (et dans un potentiel mou, aux même fréquences ils sont à C_K supérieure par rapport aux ondes linéaires de même vecteur Q').

Le même scénario de résonance est observé si nous effectuons la continuation à partir de la limite linéaire, en diminuant la fréquence à couplage fixée C_K , à condition que C_K soit inférieure à la valeur où la courbe de la première résonance interseque celle de la dispersion linéaire (voir Fig. 7.22). En effet, au-delà de la première résonance on retrouve, aussi pour le potentiel de Morse, les solutions fantômes, et donc l'onde résonante dépendra de la solution de départ (donc du fantôme et donc de la valeur de C_K). Nous allons analyser ce scénario pour l'onde considérée, $Q = 2/11\pi$ de type H .

7.0.5.3 Solutions fantômes

De façon similaire au cas du potentiel quartique, si nous effectuons une continuation en augmentant le couplage depuis la limite anti-continue, mais avec des pas dC suffisamment

²Pour construire cette courbe nous utilisons le point de la première bifurcation, où l'onde Q change en devenant la solution intermédiaire.

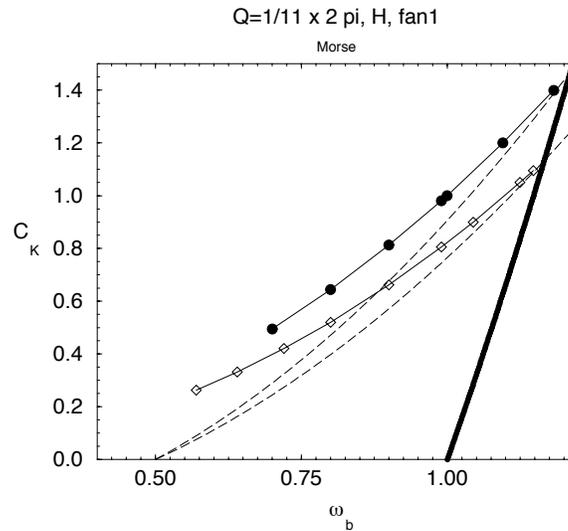


FIG. 7.22 – Courbes de bifurcation pour les premiers deux résonances. La ligne tiretées sont les courbes de dispersion linéaire de deuxième harmonique pour $Q' = 10\pi/11$ (plus bas) et $Q'' = 8\pi/11$ (plus haut). La courbe épaisse est la courbe de dispersion linéaire fondamentale pour $Q = 2\pi/11$. La courbe à carrés correspond à la première résonance de l'onde de type H de vecteur Q à fréquence ω_b avec l'onde de type E , vecteur $Q' = 10\pi/11$ et fréquence $2\omega_b$. La courbe à points correspond à la deuxième résonance, effectuée par le premier fantôme de l'onde Q avec l'onde de type E , vecteur Q'' et fréquence $2\omega_b$.

grandes dans la routine de Newton, il est possible de sauter les résonances et de rencontrer les solutions fantômes de l'onde stationnaire avec vecteur Q .

Pour $Q = 2/11\pi$ la première solution fantôme existe au-delà de la résonance avec l'onde $Q' = 10/11\pi$ et fréquence $2\omega_b$ (courbe à carrés en Fig. 7.22). Si, en diminuant la fréquence depuis la limite linéaire (évidemment à couplage supérieure au valeur d'intersection entre la première courbe de résonance et la courbe de dispersion $Q = 2/11\pi$ à $2\omega_b$ (courbe noir épaisse en Fig. 7.22)) on cherche de rejoindre la limite anti-continue, la continuation s'arrête en correspondance de la première résonance (à $C_K \approx 0.80536$ pour $\omega_b = 0.99$), qui correspond donc à la limite inférieur d'existence pour le première fantôme (Fig. 7.23 (a) et (b)).

Si par contre on continue le premier fantôme soit en augmentant C_K à ω_b fixée (Fig. 7.23 (a) et (b)), soit en diminuant ω_b à C_K fixée (Fig. 7.23 (c), (e) et (f)), la solution bifurque d'abord avec une solution intermédiaire (à $\omega_b \approx 1.1816$ pour $C_K = 1.4$, Fig. 7.23 (f)) et en suite (à $\omega_b \approx 1.1789$) avec l'onde stationnaire de type E et vecteur $Q'' = (m-1)Q$, qui pour $Q = 2/11\pi$ est $Q'' = 8/11\pi = 4Q$ et fréquence $2\omega_b$. Cela est la deuxième résonance pour l'onde Q à ω_b , qui implique le changement de vecteur d'onde de Q à Q'' , et elle correspond à la résonance du premier fantôme. Après cette deuxième résonance la solution peut être continuée vers grandes amplitudes juste à la divergence à un certain couplage finie. En suite, de la même façon, au-delà de la deuxième résonance il existe le deuxième fantôme de Q , et sa continuation vers grands couplages ou petites fréquences amène à la résonance avec l'onde stationnaire type E de $Q''' = (m-2)Q = 6/11\pi$ et fréquence $2\omega_b$. De même la quatrième résonance sera effectuée avec l'onde type E de $Q^{IV} = (m-3)Q = 4/11\pi = 2Q$ et fréquence $2\omega_b$, tandis que la cinquième et dernière sera avec l'onde type E de $Q^V = 2/11\pi = Q$ toujours à fréquence $2\omega_b$.

7.0.5.4 Inversion de stabilité

Le phénomène d'inversion de stabilité entre onde de type H et E se manifeste aussi dans le cas de résonance de deuxième ordre et près de la limite linéaire. Considérons, par exemple, la continuation à $C_K = 1.4$ en diminuant la fréquence depuis la limite linéaire ($\omega_b \approx 1.20187$) pour la solution premier fantôme de $Q = 2/11\pi$. On observe (Fig. 7.24) que l'onde H est stable près de la limite linéaire et devient instable à $\omega_b \approx 1.18225$ à cause de deux valeurs propres qui collisionent à $+1$ et sortent sur l'axe réel. Vice-Versa, l'onde E est instable près de la limite linéaire (instabilité qui décroît exponentiellement vers la limite linéaire, comme montré en Fig. 7.24 (b)) et, à la même valeur de ω_b , par bifurcation devient stable.

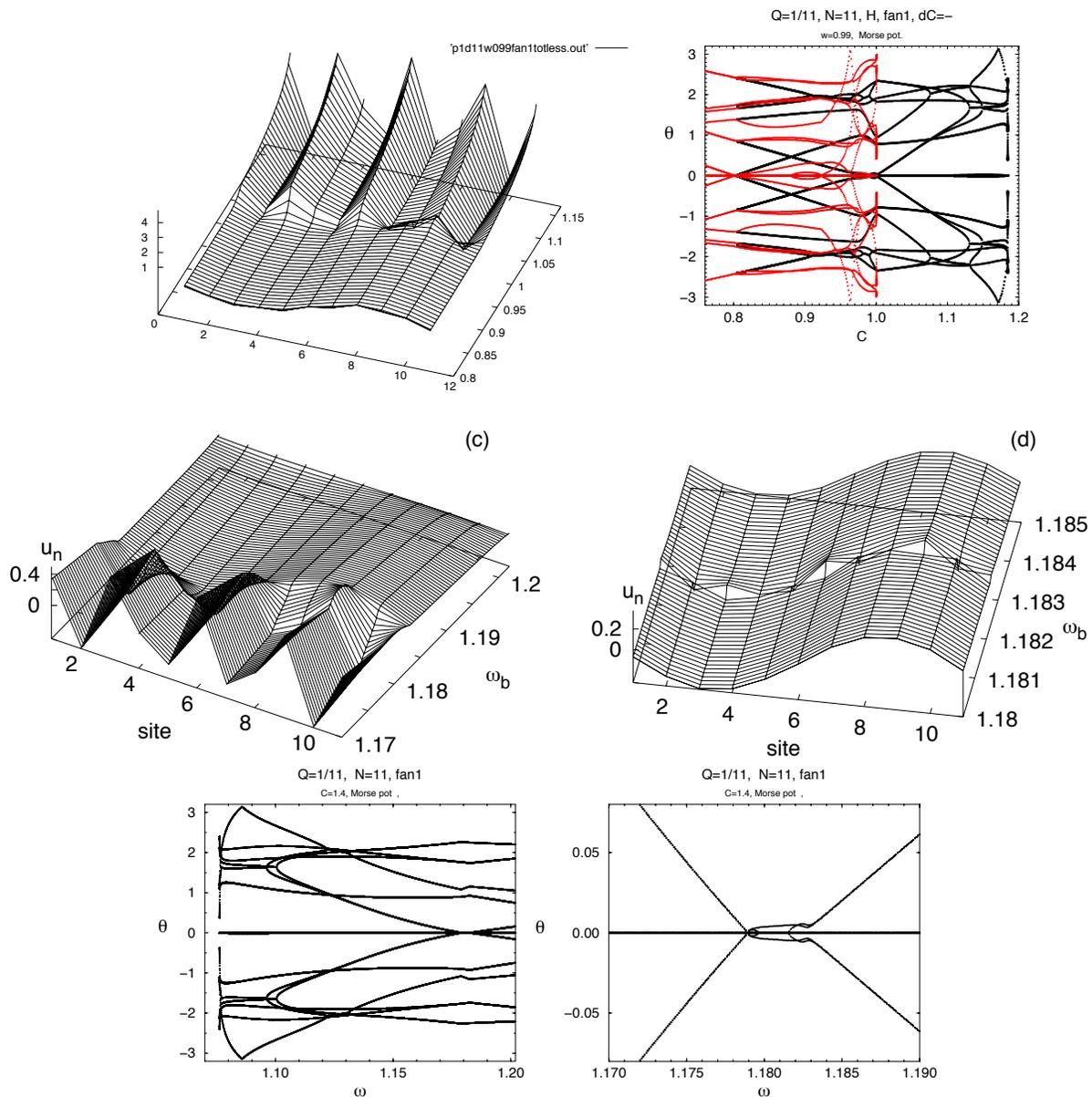


FIG. 7.23 – Amplitudes et angles des valeurs propres du premier fantôme de l’onde stationnaire type H avec $Q = 2/11\pi$. En (a) et (b) (la courbe noire) est présenté sa continuation en C_K à $\omega_b = 0.99$. En diminuant C_K il s’arrête à $C_K \approx 0.805362$, tandis qu’en augmentant C_K il rentre en résonance avec l’onde Q'' à $2\omega_b$, et en suite il diverge à $C_K \approx 1.18451$. La courbe rouge en (b) représente les arguments des valeurs propres de la solution Q qui effectue la première résonance avec Q' . (c) (e) montrent la continuation lisse par rapport à la fréquence depuis la limite linéaire et à $C_K = 1.4$ (donc entre la première et la deuxième résonance) à travers la deuxième résonance. En (f) agrandissement des bifurcations en (e). (d) montre la continuation intentionnellement imprécise qui saute la résonance en (c) et (f). Si une continuation attentive est effectuée vers grandes ω_b elle s’arrête à $\omega_b \approx 1.18235$ (courbe de la deuxième résonance en Fig. 7.22, de façon similaire comme dans Fig. 6.10 (d)).

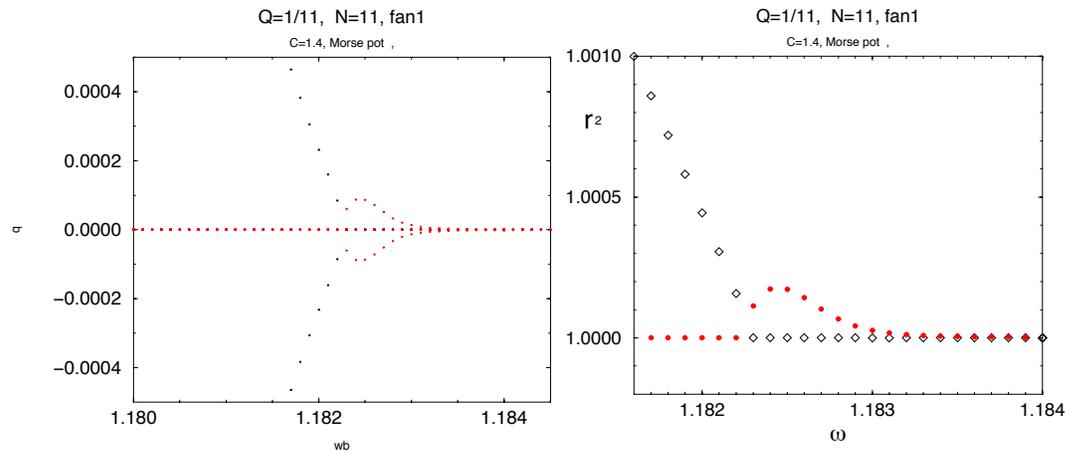


FIG. 7.24 – Angles (a) et module carré (b) des multiplicateurs de Floquet pour l’onde de vecteur $Q = 2/11\pi$ de type H (courbes rouges) et E (courbes noires) à $C_K \approx 1.4$. On observe l’inversion de stabilité à $C_K \approx 1.18225$.

7.0.5.5 Bifurcation de double période

Nous avons vu que pour l’onde de vecteur $Q = 2/11\pi$, soit l’onde de type H soit celle de type E font résonance avec la même onde de type E de vecteur $Q' = 10/11\pi$ à $2\omega_b$, (à $C_K \approx 0.9226$ si on considère la continuation pour $\omega_b = 0.99$) en passant chacune par une différente solution intermédiaire. Après la résonance les deux ondes, type E et type H qui étaient distinctes depuis $C_K = 0$, deviennent donc la même onde stationnaire qui est l’onde résonante Q' (Fig. 7.25 (a) et (b)). Cela est compréhensible pour le fait que, puisque le vecteur d’onde Q est petit ($Q = 2/11\pi \approx 0.18\pi$), l’onde est presque analytique et dans le régime analytique il n’existe plus différence entre onde stationnaire type H et E .

Considérons maintenant l’onde $Q' = 10/11\pi$ de type E et effectuons sa continuation à fréquence $\omega_b = 1.98$ (Fig. 7.25). En diminuant le couplage nous observons deux collisions à -1 d’un couple de valeurs propres, comme montré en Fig. 7.25 (c)-(g). Avec la première collision, à $C_K \approx 0.9225$, le couple sort sur l’axe réel et la solution acquise une instabilité réelle. Avec la deuxième, à $C_K \approx 0.9145$, elle rentre sur le cercle. La première collision à -1 correspond au même valeur de couplage au quel il y a la bifurcation à $+1$ pour l’onde Q' dans la continuation à $\omega_b = 0.99$ et qui signale le passage entre la solution intermédiaire de fréquence ω_b et donc période T_b , et l’onde stationnaire avec Q' de fréquence $2\omega_b$ et donc période $T_b/2$. Cette collision, qui est à $+1$ ou à -1 selon l’onde considérée, est donc une bifurcation de double période.

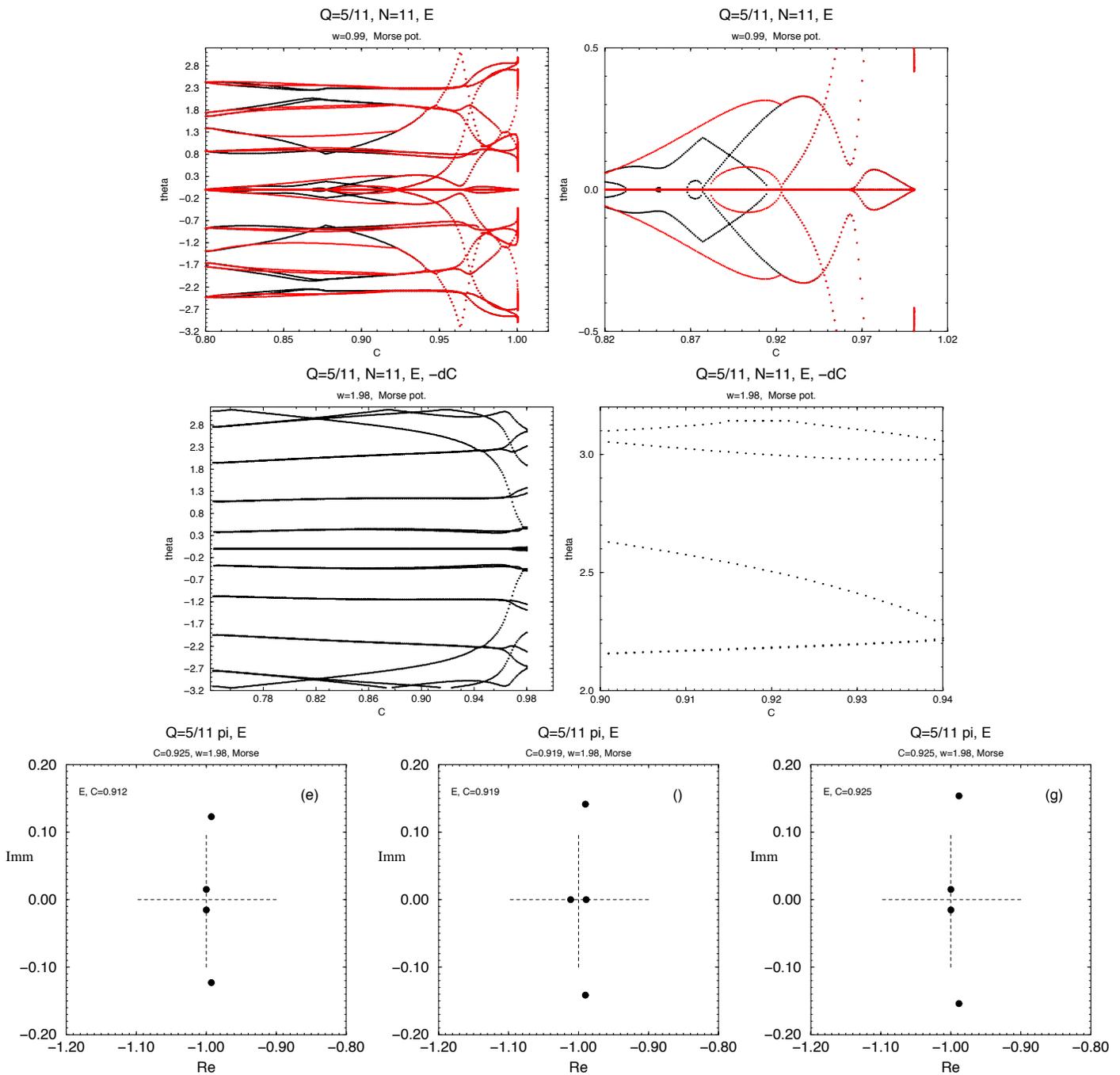


FIG. 7.25 – Angles des multiplicateurs de Floquet pour (a) l'onde de vecteur $Q = 2/11\pi$ de type H (courbe noir) et de type E (courbe rouge) à $\omega_b = 0.99$ à travers la première résonance du deuxième ordre. Avec la collision à $+1$ à $\omega_b = 0.9225$ les deux ondes deviennent la même onde de vecteur $Q' = 10/11\pi$ et type E . En (b) agrandissement de la bifurcation en (a). En (c) continuation en diminuant C_K à $\omega_b = 1.98$ de l'onde Q' de type E . Deux collisions à -1 sont présentes à $C_K \approx 0.9225$ et $C_K \approx 0.9145$. Entre elles la solution devienne instable pour une instabilité réelle (e) (f) (g).

Conclusion

Annexe A

Techniques numériques

Pour être sûr de effectuer une correcte continuation de la solution, est souvent nécessaire, spécialement dans les cas où il y a beaucoup des bifurcations possibles, de imposer la symétrie à la solution pendant sa construction numérique. A tal fin il est nécessaire de considerer les proprietes de symetrie de la sequence codant de l'onde qui on veut construire, et celle du potentiel exterieur auquel tous les oscillateur sont soumis. Nous presenterons dans cette appendice les principes des techniques numeriques pour imposer la symetrie (ou l'antisymetrie) dans le cas de potentiel dur quartic et du potentiel mou de Morse

A.1 Ondes dans un potentiel quartic

Le potentiel quartic (Eq. ??, Fig. 1.2.b)), est symetrique en espace par rapport a l'origine ($V(u) = V(-u)$). Les solutions qui sont périodiques en temps avec période $T_b = 2\pi\omega_b$, et elle sont symetrique en temps par rapport au demi-période $T_b/2$, et anti-symetriques par rapport au $t = T_b/4$ $u_n(t + T_b/2) = -u_n(t)$. Dans le programme de calcul numérique de breathers on utilise cette propriété et on restrie l'algorithme de Newton de façon de chercher des solutions qui ont cette propriété.

Si on considere, dans ce potentiel, des ondes $u_n(t)$ avec code symetrique, elles doivent conserver la symetrie pendant une continuation à couplages non nuls.

Il faut distinguer le cas de symetrie (ou anti-symetrie) par rapport à un site ou intersite.

Si la solution a code symetrique par rapport à un site, qui on pose comme site centrale N_0 , comme pour l'onde avec vecteur $1/112\pi$, 110-1-1-1-1011, on integre les équations de mouvement seulement pour le moitié système de taille N_0 , et après construire l'entière système de N oscillateurs par symetrie. Evidemment il est nécessaire de differentier le cas de numero pair ($N_0 = N/2 + 1$) et impair ($N_0 = (N + 1)/2$) d'oscillateur dans la chaine. Dans le premier cas on integrera sur exactement sur un systeme de demi taille, dans le deuxieme sur

un système de taille moitié plus 1. Les conditions au bord, comme aussi la condition pour dupliquer par symétrie le système seront différents dans les 2 cas.

car les équations de Hill sont périodiques de demi-période $T_b/2$, on les intègre sur une moitié de période. On évite d'avoir des collisions à 1 qui en réalité ne donnent pas des bifurcations, et on les ramène à des collisions à -1. De la même façon tous les multiplicateurs de Floquet τ_ν sont déplacés à $\tau_\nu/2$. Avec cet artifice seulement les collisions donnant une bifurcation sont à 1.

Bibliographie

- [1] T. Cretegny, S. Aubry, Phys. Rev.B, 55, (1997) R11929-R11932
- [2] J.L. Marin, S. Aubry, Nonlinearity 9, (1996) 1501-1528
- [3] G. Kopidakis, S. Aubry, *Intraband discrete breathers in disordered nonlinear systems. I. Delocalisation* Physica D, (1999) 155-186
- [4] W.H. Press, B.P. Flannery, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling, Numerical Recipes, the Art of Scientific Computing, Cambridge University Press, Cambridge, UK, 1986.
- [5] M. Peyrard, A.R. Bishop, *Statistical mechanics of a nonlinear model for DNA denaturation*, Physical Review Letters **62**, 23, (1989), 2755-2758
- [6] Yu.S. Kivshar, M. Peyrard, *Modulational instabilities in discrete lattices*, Physical Review A **46**, 6, (1992), 3198-3205
- [7] I. Daumont, T. Dauxois, M. Peyrard, , Nonlinearity 10, (1997), 617-630
- [8] Yu.S. Kivshar, M. Haelterman, A.P. Sheppard, *Standing localised modes in nonlinear lattices*, Physical Review E **50**, 4, (1994), 3161-3170
- [9] J.L. Marin, S. Aubry, *Finite size effects on instabilities of discrete breathers*, Physica D, **119** (1998) 163-174
- [10] T. Dauxois, M. Peyrard et A.R. Bishop, *Dynamics and thermodynamics of a nonlinear model for DNA denaturation*, Physical Review E, **47**, 1, (1993), 684-695
- [11] D. Bambusi, *Exponential stability of breathers in Hamiltonian network of weakly coupled oscillators*, Nonlinearity 9, (1996), 433-457
- [12] S. Aubry, *Breathers in non-linear lattices : existence, linear stability and quantization*, Physica D, **103** (1997), 201-250
- [13] R.S. Mackay et S. Aubry, *Proof of existence of breathers for time reversible or hamiltonian networks of weakly coupled oscillators*, Nonlinearity, 7 (1994), 1623-1643
- [14] M.J. Ablowitz, D.J. Kaup, A.C. Newell et H. Segur, Stud. Appl. Math., 53 (1974), 249

- [15] H. Segur et M.D. Kruskal, *Nonexistence of small amplitude breather solutions in ϕ^4 theory*, Phys.Rev.Let. (1997), **58**, 747-750
- [16] J. Denzler *Nonpersistence of breather families for the perturbed sine Gordon equation*, Commun.Math.Phys. (1993) **158**, 397-430
- [17] I. Sigal *Nonlinear wave and Schrodinger equation*, Comm.Math.Phys, (1993) 153 297-320
- [18] S. Takeno, K. Kiso, A. Sievers, *Intrinsic localized vibrational modes in anharmonic crystals*, Prog. Theor. Phys. Suppl. (1998) **94** 242-269
- [19] D.K. Campbell et M. Peyrard, *Chaos and order in nonintegrable model field theories*, Chaos ed. (American Institute of Physics) (1990) 305-334
- [20] V.I. Arnold et A. Avez, *Ergodics problems of classical mechanics App.*, Vol. 29, (Benjamin, New York, 1968)
- [21] A.M. Morgante, M. Johansson, G. Kopidakis, S. Aubry, *Standing wave instabilities in a chain of nonlinear coupled oscillators*, soumis à Physica D
- [22] J.L. Marín, S. Aubry, L.M. Floría, Physica D 113 (1998) 283-292.
- [23] Ding Chen, S. Aubry, G.P. Tsironis, Phys. Rev. Lett. 77 (1996) 4776-4779.
- [24] T. Cretegny, Ph.D. thesis, *Dynamique collective et localisation de l'énergie dans les réseaux non-linéaires*, École normale supérieure de Lyon, France, 1998.
- [25] Ding Chen, S. Aubry, G.P. Tsironis, , Physical Review Letters 77 (1996) 4776-4779.
- [26] S. Aubry, T. Cretegny, *Mobility and reactivity of discrete breathers*, Physica D **119** (1998) 34-46.
- [27] M. Johansson, Yu.S. Kivshar, *Discreteness-induced oscillatory instabilities of dark solitons*, Phys. Rev. Lett. **82** (1999) 85-88.
- [28] Yu.S. Kivshar, W. Królikowski, O.A. Chubykalo, *Dark solitons in discrete lattices*, Phys. Rev. E **50**, n.6 (1994) 5020-5032.
- [29] H. Feddersen, in : M. Remoissenet, M. Peyrard (Eds.), *Nonlinear Coherent Structures in Physics and Biology*, Springer, Berlin, 1991, pp. 159-167.
- [30] K.Ø. Rasmussen, T. Cretegny, P.G. Kevrekidis, N. Grønbech-Jensen, *Statistical mechanism of a discrete nonlinear system*, Physical Review Letters **84**, (2000) 3740-3743.
- [31] K. Hori, S. Takeno *Low-frequency ad high-frequency moving anharmonic localized modes in a one-dimensional model with quartic anharmonicity*, Journal of the Physical Society of Japan, 61 (1992) 4263

- [32] K. Hori, S. Takeno *Moving self-localized modes for the displacement field in a one-dimensional system with quartic anharmonicity*, Journal of the Physical Society of Japan, 61 (1992) 2186 CONTROLLA
- [33] W. Press, B. Flannery, S. Teutolsky, W. Vetterling *Numerical Recipes, the art of scientific computing*, (1996) Cambridge University Press.
- [34] O. Bang, M. Peyrard *Higher order breather solutions to a discret nonlinear Klein-Gordon model*, Physica D, **9**, (1995) 81 controlla
- [35] M. Johansson, pas publié.
- [36] G. Kopidakis, S. Aubry, *Intraband discrete breathers in disordered nonlinear systems*, Physica D **130** (1999) 155–186.
- [37] S. Aubry, J.-P. Gosso, Physica D **47** (1991) 461-497