УДК 517.9

Марія Пасєка,
студентка факультету математики, фізики
і комп'ютерних наук
Вінницького державного педагогічного університету
імені Михайла Коцюбинського

ІСНУВАННЯ ГЕТЕРОКЛІНІЧНИХ БІЖУЧИХ ХВИЛЬ В МОДЕЛІ ТИПУ ФРЕНКЕЛЯ–КОНТОРОВОЇ

Анотація. *У статті розглянуто модель динаміки дислокацій Френкеля-Конторової, в якій внутрішній потенціал складається з квадратичних ямок, з'єднаних невеликими дугами, які можуть бути спінодальними (увігнутими), як прийнято вважати у фізиці. Встановлено умови існування гетероклінічних біжучих хвиль в такій моделі. Для цього використано теорему Шаудера про фіксовану точку.*

Ключові слова: *модель Френкеля-Конторової, гетероклінічні біжучі хвилі, теорема Шаудера про фіксовану точку.*

Abstract. *In this article, the Frenkel–Kontorova model for dislocation dynamics is considered, where the on-site potential consists of quadratic wells joined by small arcs, which can be spinodal (concave) as commonly assumed in physics. Conditions for the existence of heteroclinic travelling waves in such model are established. The Schauder fixed-point theorem is used for this purpose.*

Key words: *Frenkel-Kontorova model, heteroclinic travelling waves, Schauder fixed-point theorem.*

У 1938 році Я. Френкель і Т. Конторова запропонували фундаментальну модель динаміки дислокацій [8]. Модель задається рівнянням руху Ньютона для ланцюга атомів,

$$mu_k'' = \beta(u_{k+1} - 2u_k + u_{k-1}) - 2\pi\frac{\tilde{\alpha}}{\gamma}g'\left(\frac{2\pi}{\gamma}u_k\right) \tag{1}$$

з деякими сталими $\tilde{\alpha}$, β, γ, що описують зміщення u_k k-го атома ($k \in \mathbb{Z}$) в одновимірному ланцюзі. Нелінійність є похідною внутрішнього потенціалу, що описує взаємодію з атомами над і під розглянутим ланцюгом атомів. Періодичність нелінійності, таким чином, відображає періодичну природу кристалічної ґратки. Ланцюг Френкеля–Конторової є фундаментальною моделлю динаміки дислокацій, що описує, як дефект (дислокація) рухається через кристалічну ґратку (див., наприклад, дослідження [3]). Найпростішим рухом, який може існувати, є рух біжучої хвилі $u_j(t) = u(j - ct)$ зі швидкістю хвилі c. Цей підхід перетворює рівність (1), після масштабування, в

$$c^2 u'' - \Delta_D u + g'(u) = 0 \tag{2}$$

на $\mathbb{R}$, де Δ_D — дискретний лапласіан,

$$\Delta_D u(x) \coloneqq u(x+1) - 2u(x) + u(x-1).$$

В оригінальній статті [8] внутрішній потенціал g є синусоїдальним. Дислокація відповідає гетероклінічній хвилі оскільки області поблизу $-\infty$ знаходяться в одній ямі внутрішнього потенціалу g, а області поблизу $+\infty$ знаходяться в іншій ямі, яку ми тут вважатимемо сусідньою; дивіться рис. 1, де показано графік наближеного розв'язку, де дислокація в координатах біжучої хвилі розміщена у початку координат; коливання в лівій півплощині відбуваються в одній ямі внутрішнього потенціалу, а розв'язки в додатній півплощині знаходяться в сусідній ямі. Таким чином, достатньо розглянути потенціали g лише з двома ямами, скажімо

$$g(u) = \frac{1}{2}\alpha u^2 - \alpha\psi(u), \tag{3}$$

що призводить до перетворення рівняння (2) до вигляду

$$c^2 u'' - \Delta_D u + \alpha u - \alpha\psi'(u) = 0 \tag{4}$$

Вивчення рівняння (4) має довгу історію в механіці. У роботі Франка і ван дер Мерве ([7]) аналізується континуальне наближення рівності (1) – рівняння синус-Ґордона. Це значно спрощує аналіз, але ще Шредінгер ([18]) вказав на різницю між межами диференціального рівняння в частинних похідних і основними рівняннями ґратки. Дійсно, аналіз рівності (1) виявився дуже складним. Наскільки відомо, усі наявні аналітичні результати, що охоплюють понад 50 років, ґрунтуються на припущенні, що внутрішній потенціал g є кусково-квадратичним; тоді сила g' у рівності (1) є кусково-лінійною і можна застосовувати методи Фур'є. Рекомендуємо переглянути роботи Аткінсона та Кабрери [2], Ермме [5] та об'ємну працю

Трускіновського зі співавторами, яка охоплює так званий ланцюг Фермі–Пасти–Улама–Цингу з кусково-квадратичною взаємодією ([17]) та модель Френкеля–Конторової ([14]). Крессе і Трускіновський вивчали випадок внутрішнього потенціалу з різними модулями (другими похідними в мінімумах) [15]. Згадаємо також важливі внески Слепіана, наприклад [1, 16]. Флітцаніс, Кроулі та Челлі [6] застосовували методи Фур'є до задачі, де потенціал складається з трьох парабол, середня з яких увігнута.

Розв'язок рівняння (4) існує при відповідному виборі параметрів, для нелінійностей, які є відповідними наближеними значеннями функції знаку, $\alpha\psi'(u) \approx \alpha\mathrm{sgn}(u)$. Зауважимо, що незбурений випадок $\alpha\psi'(u) \approx \alpha\mathrm{sgn}(u)$ відповідає кусково-квадратичній силі (3). Основне технічне обмеження полягає в тому, що допустиме збурення є малим у чітко визначеному значенні. Ця технічна вимога випливає з використання в доведенні підхід з фіксованою точкою.

Рівняння (4) поєднує в собі диференціальний оператор (другу похідну) з різницевим оператором (Δ_D). Див., наприклад, роботу [10], присвячену таким функціональним рівнянням. Тут розглядаються рівняння із випередженням, $u(x+1)$, та запізненням, $u(x-1)$. Теорія таких рівнянь все ще не дуже добре розроблена, хоча й є чудові результати використання різних методів, від варіаційних методів до аналізу центрального многовиду, наприклад, [4, 9, 12]. Немонотонність g', зрештою, є основною складністю цієї задачі.

Нещодавно Г. Шветлік та Й. Зіммер разом з М. Германом та К. Меттісом розробили інший підхід для такого збурення, показавши існування гетероклінічних хвиль для випадків, коли потенціал має малу спінодальну (увігнуту) область [11]. Розглянутий у цій роботі підхід є відносно гнучким і потенційно дозволяє аналізувати цілу низку проблем у рамках (принаймні) ланцюга Френкеля-Конторової.

Для неопуклих потенціалів взаємодії існує небагато точних результатів, зокрема для гетероклінічних розв'язків, які ми розглядатимемо. Дуже важливим результатом існування таких розв'язків є робота Йосса та Кіршґаснера [12], в якій розвинуто загальну теорію для малих розв'язків. Існування гетероклінічних біжучих хвиль для задачі Френкеля-Конторової (1) було відкрито в 1939 році.

Основним твердженням є теорема Шаудера про фіксовану точку. Розглянемо умови, в яких застосовується теорема Шаудера. Почнемо з розгляду лінійної частини (4). Лінійний оператор

$$u \to Lu = c^2 u'' - \Delta_D u + \alpha u \tag{5}$$

має у просторі Фур'є вигляд

$$-c^2\zeta^2 + 2(1-\cos\zeta) + \alpha = -c^2\zeta^2 + 4\sin^2(\zeta/2) + \alpha =: D(\zeta), \tag{6}$$

де $D -$ дисперсійна функція. Очевидно, що для швидкості $c = 1$ дисперсійне співвідношення D має рівно два ненульові корені $\pm k_0$, де

$$k_0 = \frac{\pi}{2} \tag{7}$$

якщо

$$\alpha = c^2\left(\frac{\pi}{2}\right)^2 - 2, \tag{8}$$

і, крім того, $D'(\zeta) = -2c^2\zeta + 2\sin\zeta$ зникає лише при $\zeta = 0$. Подамо у параметричній формі, де швидкість c є гранично дозвуковою; залишимо фіксованими k_0 згідно з (7) і α – згідно з (8). Тоді $c -$ єдиний змінний параметр у дисперсійному співвідношенні. Оскільки прагнемо знайти гетероклінічні розв'язки, зосередимося на дозвукових хвилях, тобто $c \leq 1$.

Завдяки неперервності дисперсійна функція матиме рівно два дійсних корені біля $\pm k_0$ для «майже звукових» дозвукових швидкостей c.

Основну теорему можна розглядати як результат збурення, що дозволяє отримати сім'ю гладких, парні потенціали $\psi_\varepsilon \in C^2(\mathbb{R})$ якої є «близькими» до окремого випадку $\psi'(u) = \operatorname{sgn}(u)$, розглянутого в [13]. Більш конкретно, в основній теоремі 2 припустимо, що $\psi_\varepsilon'(x) = \operatorname{sgn}(x)$ для $|x| \geq \varepsilon$ і $|\psi_\varepsilon''(x)| \leq 2\varepsilon^{-1}$ для $|x| < \varepsilon$.

Коротко окреслимо ситуацію для цього виродженого потенціалу. Для $|\lambda| < 1$ і $\theta \in [0, 2\pi)$ тривіальний розв'язок $1 + \lambda \sin(k_0 \cdot +\theta)$ є розв'язком рівняння (4) на $[1, \infty)$ і $-1 + \lambda \sin(k_0 \cdot -\theta)$ є розв'язком на $(-\infty, -1]$. Питання полягає в тому, чи можна об'єднати ці дві частини розв'язку, щоб отримати гетероклінічний розв'язок, що переходить з однієї ями внутрішнього потенціалу g в іншу.

Відповідь є ствердною для виродженого потенціалу, що розглядається в цій статті, як зазначено в [13] (згадується в теоремі 1 нижче). Цей розв'язок $u \in H^2_{loc}(\mathbb{R})$ непарний, $u(x) = -u(-x)$, і гетероклінічний оскільки

$$\lim_{x\to\pm\infty} [u(x) \mp 1 - \lambda \sin(k_0 x \pm \theta)] = 0$$

для деяких λ і θ, а також α, заданої в (8). Цей розв'язок добре апроксимується явною функцією

$$u_{pa}(x) \coloneqq \operatorname{sgn}(x)\left[A\left(1 - e^{-\beta|x|}\right) + B(1 - \cos(k_0 x))\right], \tag{9}$$

Графіки u_{pa} для двох різних наборів значень параметрів зображено на рис. 1.

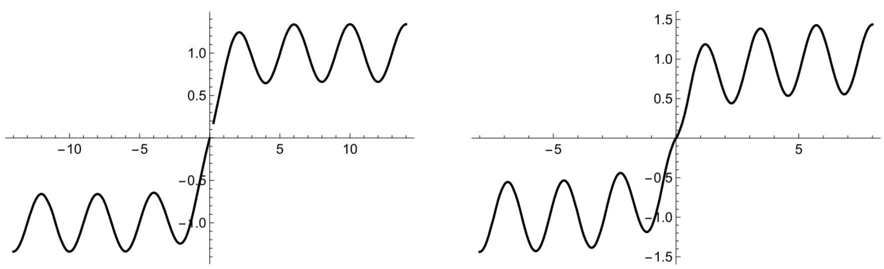

Рис. 1. Ліворуч: графік u_{pa} при $k_0 = \frac{\pi}{2}$ і $c^2 = 0{,}9$. Праворуч: аналогічний графік при $k_0 = \frac{7}{8}\pi$ і $c^2 = 0{,}8$.

де

$$A = \frac{c^2 k_0^2 - \alpha}{c^2(\beta^2 + k_0^2)} \text{ і } B = \frac{\alpha + \beta^2 c^2}{c^2(\beta^2 + k_0^2)} \tag{10}$$

і

$$\beta^2 = \frac{\alpha}{c^2} \cdot \frac{k_0 \sin(k_0)}{2 - 2\cos(k_0) - k_0 \sin(k_0)} = \frac{\alpha}{c^2} \cdot \frac{k_0}{2 - k_0}.$$

Міркування в [13] та цій статті використовують ідею, розроблену Шветліком та Зіммером для ланцюга Фермі–Пасти–Улама з неопуклим потенціалом взаємодії та без внутрішнього потенціалу [19]. Ця ідея полягає в тому, щоб представити розв'язок u як $u = u_p - r$ з явно заданим u_p. Тоді аналіз зводиться до детального дослідження перетворення Фур'є для r. Аналогічно розглянемо «профільну» функцію $u_p \in H_{loc}^2(\mathbb{R})$. Під профільною функцією мається на увазі, що функція $c^2 u_p'' - \Delta_D u_p + \alpha u_p - \alpha \mathrm{sgn}(u_p)$ задовольняє умови

$$(1 + x^2)\left(c^2 u_p'' - \Delta_D u_p + \alpha u_p - \alpha \mathrm{sgn}(u_p)\right) \in L^2(\mathbb{R}), \tag{11}$$

$$\int_{\mathbb{R}} \left[c^2 u_p'' - \Delta_D u_p + \alpha u_p - \alpha \mathrm{sgn}(u_p)\right] \sin(k_0 \cdot)\, dx = 0. \tag{12}$$

Необхідно, щоб функція u_p була непарною, $\mathrm{sgn}(u_p(x)) = \mathrm{sgn}(x)$ на $\mathbb{R}$, дорівнювала нулю при $x = 0$, задовольняла умови $u_p'(0) > 0$ і $\lim \inf_{|x| \to \infty} |u_p(x)| > 0$. Використаємо як функцію u_p розв'язок рівняння (4) за умови $\psi'(x) = \mathrm{sgn}(x)$, одержаний у роботі [13] і наведений нижче у теоремі 1 ([13]).

Теорема 1. *Нехай* $\psi'(x) = \mathrm{sgn}(x)$, *c таке, що* $c^2 \in [0.83, 1]$ *і* k_0 *задано з (7), а* α *– з (8). Тоді рівняння (4) має розв'язок* $u_p = u_{pa} - r$ *з* u_{pa}, *заданим з (9), причому*

$$\sqrt{\frac{\pi}{2}}|r(z)| \le \begin{cases} 0.257 \text{ для } c^2 \in [0.9, 1], \\ 0.339 \text{ для } c^2 \in [0.83, 0.9], \end{cases}$$

і

$$\sqrt{\frac{\pi}{2}}|r'(z)| \le \begin{cases} 0.43 \text{ для } c^2 \in [0.9, 1], \\ 0.34 \text{ для } c^2 \in [0.83, 0.9]. \end{cases}$$

Крім того, $r \in H^2_{odd}(\mathbb{R})$, $\operatorname{sgn}\big(u_p(x)\big) = \operatorname{sgn}(x)$ *на* $\mathbb{R}$, $u_p(0) = 0$, $u_p'(0) > 0$ *і* $\lim\ \inf_{|x|\to\infty}\big|u_p(x)\big| > 0$.

Зауважимо, що для менших швидкостей хвиль наведена вище теорема не виконується.

Потрібно знайти $r \in H^2_{odd,loc}(\mathbb{R})$ (тобто $r \in H^2_{loc}(\mathbb{R})$ і $r(-x) = -r(x)$) таке, щоб $u_p - r$ був розв'язком:

$$c^2\big(u_p - r\big)'' - \Delta_D\big(u_p - r\big) + \alpha\big(u_p - r\big) - \alpha\psi'\big(u_p - r\big) = 0,$$

а отже, для r

$$c^2 r'' - \Delta_D r + \alpha r = c^2 u_p'' - \Delta_D u_p + \alpha u_p - \alpha\psi'\big(u_p - r\big),$$

що є рівнянням вигляду

$$c^2 r'' - \Delta_D r + \alpha r = Q,$$

або $Lr = Q$ з нелінійним Q. Це не типова задача зі збуренням зважаючи на дві важливі взаємопов'язані умови. По-перше, розв'язок u, визначений теоремою 1, не є єдиним. А саме, $u_p(x_0 + \cdot) + \gamma_s \sin(k_0\,\cdot) + \gamma_c \cos(k_0\,\cdot)$ є ще одним розв'язком для всіх γ_s і γ_c, достатньо близьких до 0, і для всіх $x_0 \in \mathbb{R}$. По-друге, лінійний оператор L не є оберненим оскільки $\sin(k_0\,\cdot)$ і $\cos(k_0\,\cdot)$ належать його ядру. Хоча значення $\sin(k_0\,\cdot)$ і $\cos(k_0\,\cdot)$ не наближаються до 0, їх наявність ускладнює роботу зі значеннями r, що наближаються до 0; труднощі полягають у тому, що у скінченних областях в L^2, як і у випадку з фіксованими точковими аргументами, множник r може набувати вигляду функції ядра, обмеженої скінченною областю, що може давати наближений розв'язок на границі області, відмінний від шуканого розв'язку. Для спрощення в наступній теоремі вважатимемо, що ψ_ε – парне, щоб розглядати тільки непарні розв'язки і частково зменшити таким чином виродження задачі.

Зауважимо, що питання існування біжучих в більш загальних дискретних рівняннях типу Клейна-Ґордона вивчалося в статтях [20] і [21]. Крім того, умови існування біжучих хвиль в дискретних рівняннях типу синус-Ґордона на двовимірній ґратці встановлено в працях [22-25]. Для одержання основних результатів в них використовувався варіаційний підхід.

Наступна теорема встановлює умови існування дозвукових гетероклінічних біжучих хвиль ([26]).

Теорема 2. *Нехай для достатньо малого* $\varepsilon > 0$ *парна функція* $\psi = \psi_\varepsilon \in C^2(\mathbb{R})$ *така, що* $\psi_\varepsilon'(x) = sgn(x)$ *для* $|x| \geq \varepsilon$ *і* $|\psi_\varepsilon''(x)| \leq 2\varepsilon^{-1}$ *для* $|x| < \varepsilon$, *і* k_0 *задано в (7), а* α *– в (8). Тоді існує діапазон дозвукових швидкостей* c, *близьких до 1, таких, що для цих швидкостей існує гетероклінічний розв'язок рівняння (4).*

Зауважимо, що однією з умов, які накладаються на близькість c до 1, є $c^2 \in [0.83, 1]$, оскільки лише у цьому випадку можна використати результат теореми 1.

Таким чином, у статті наведено результати, які встановлюють умови існування гетероклінічних біжучих хвиль в моделі типу Френкеля-Конторової.

Література:

1. Slepyan L. I. Solutions for nonlinear lattices. *International Conference on Fracture, ICF11*, Italy, 2005.
2. Atkinson W., Cabrera N. Motion of a Frenkel–Kontorowa dislocation in a one-dimensional crystal. *Phys. Rev.* 1965. Vol. 138 (3A) (May). P. 763–766.
3. Braun O. M., Kivshar Yu. S. Nonlinear dynamics of the Frenkel–Kontorova model. *Phys. Rep.* 1998. Vol. 306, № 1-2. 108 p.
4. Calleja R., Sire Y. Travelling waves in discrete nonlinear systems with non-nearest neighbour interactions. *Nonlinearity*. 2009. Vol. 22, № 11. P. 2583–2605.
5. Earmme Y. Y., Weiner J. H. Dislocation dynamics in the modified Frenkel–Kontorova model. *J. Appl. Phys*. 1977. Vol. 48, № 8. P. 3317–3331.
6. Flytzanis N., Crowley S., Celli V. High velocity dislocation motion and interatomic force law. *J. Phys. Chem. Solids*. 1977. Vol. 38, № 5. P. 539–552.
7. Frank F.C., van der Merwe J. H. One-dimensional dislocations. IV. Dynamics. *Proc. R. Soc. Lond. Ser. A Math. Phys. Eng. Sci.* 1950. Vol. 201 (1065). P. 261–268.
8. Frenkel J., Kontorova T. On the theory of plastic deformation and twinning. *Acad. Sci. USSR J. Phys.* 1939. № 1. P. 137–149.
9. Friesecke G., Wattis J. A. D. Existence theorem for solitary waves on lattices. *Comm. Math. Phys*. 1994. Vol. 161, № 2. P. 391–418.
10. Hale J. Theory of Functional Differential Equations. Second edition. Applied Mathematical Sciences. New York, Heidelberg: Springer-Verlag, 1977. 366 p.

11. Herrmann M., Matthies K., Schwetlick H., Zimmer J. Subsonic phase transition waves in bistable lattice models with small spinodal region. *SIAM J. Math. Anal*. 2013. Vol. 45, № 5. P. 2625-2645.
12. Iooss G., Kirchgässner K. Travelling waves in a chain of coupled nonlinear oscillators. *Comm. Math. Phys*. 2000. Vol. 211, № 2. P. 439-464.
13. Kreiner C.-F., Zimmer J. Existence of subsonic heteroclinic waves for the Frenkel–Kontorova model with piecewise quadratic on-site potential. *Nonlinearity.* 2011. Vol. 24, № 4. P. 1137-1163.
14. Kresse O., Truskinovsky L. Mobility of lattice defects: discrete and continuum approaches. *J. Mech. Phys. Solids*. 2003. Vol. 51, № 7. P. 1305-1332.
15. Kresse O., Truskinovsky L. Lattice friction for crystalline defects: from dislocations to cracks. *J. Mech. Phys. Solids*. 2004. Vol. 52, № 11. P. 2521-2543.
16. Slepyan L., Cherkaev A., Cherkaev E. Transition waves in bistable structures. II. Analytical solution: wave speed and energy dissipation. *J. Mech. Phys. Solids*. 2005. Vol. 53, № 2. P. 407-436.
17. Truskinovsky L., Vainchtein A. Kinetics of martensitic phase transitions: lattice model. *SIAM J. Appl. Math*. 2005. Vol. 66, № 2. P. 533-553.
18. Schrödinger E. Zur Dynamik elastisch gekoppelter Punktsysteme. *Ann. Phys*. 1914. Vol. 44. P. 916-934.
19. Schwetlick H., Zimmer J. Existence of dynamic phase transitions in a one-dimensional lattice model with piecewise quadratic interaction potential. *SIAM J. Math. Anal.* 2009. Vol. 41, № 3. P. 1231-1271.
20. Бак С.М., Ковтонюк Г.М. Існування надзвукових періодичних біжучих хвиль в дискретних рівняннях типу Клейна-Гордона з нелокальною взаємодією. *Математика, інформатика, фізика: наука та освіта*. 2024. Т.1, № 1. С. 1-12.
21. Bak S., Kovtoniuk H. Existence of subsonic periodic traveling waves in discrete Klein-Gordon type equations with nonlocal interaction. Mathematics, Informatics, Physics: Science and Education. 2024. Vol. 1, № 2. P. 99-110.
22. Bak S. M. Existence of heteroclinic traveling waves in a system of oscillators on a two-dimensional lattice. *Journal of Mathematical Sciences*. 2016. Vol. 217, № 2 (August). P. 187-197.
23. Bak S. The existence of heteroclinic traveling waves in the discrete sine-Gordon equation with nonlinear interaction on a 2D-lattice. *Journal of mathematical physics, analysis, geometry*. 2018. Vol. 14, № 1. P. 16-26.
24. Bak S. M. Homoclinic traveling waves in discrete sine–Gordon equation with nonlinear interaction on 2D lattice. Matematychni Studii. 2019. Vol. 52, № 2. P. 176-184.
25. Бак С.М. Періодичні біжучі хвилі в дискретному рівнянні sin-Гордона на двовимірній ґратці. *Математичне та комп'ютерне моделювання. Серія: Фізико-математичні науки*: зб. наук. праць. Кам'янець-Подільський: Кам'янець-Подільський національний університет імені Івана Огієнка, 2013. Вип. 9. С. 5-10.
26. Buffoni B., Schwetlick H., Zimmer J. Travelling waves for a Frenkel–Kontorova chain. *J. Differ. Equations*. 2017. Vol. 263. P. 2317–2342.

Науковий керівник: докт. фіз.-мат. наук, професор Бак Сергій Миколайович.