

ПОВЕДІНКА ПОКАЗНИКІВ ЛЯПУНОВА ДЛЯ НЕСПІВМІРНИХ НАДСТРУКТУР, ПАРАМЕТРОМ ПОРЯДКУ В ЯКИХ ВИСТУПАЄ СПОНТАННА ДЕФОРМАЦІЯ

С. Свелеба, І. Катеринчук, І. Куньо, І. Карпа, Я. Шмигельський.

*Львівський національний університет імені Івана Франка,
вул. Ген. Тарнавського, 107, 79017 Львів, Україна
incomlviv@gmail.com*

Для сегнетоеластичних кристалів $[N(CH_3)_4]_2CuCl_4$, які володіють неспівмірною надструктурою були розраховані показники Ляпунова в широкому діапазоні параметрів, які визначають динаміку неспівмірної надструктури. Розрахунок показників Ляпунова був здійснений методом Адамса-Мултона в програмному середовищі Python з використанням бібліотеки JTCODE.

Встановлено, що для неспівмірної надструктури характерне позитивне значення одного показника Ляпунова, та від'ємне значення інших трьох показників. Оскільки третій показник набуває значення, яке значно перевищує суму всіх інших, то неспівмірна надструктура характеризується дивним атрктором з граничним циклом. Для неспівмірної надструктури яка описується двокомпонентним параметром порядку характерний спектр показників Ляпунова, який характеризується сталим додатнім значенням першого показника Ляпунова. Сильно вироджена аномальна поведінка третього і четвертого показників Ляпунова, засвідчують, що неспівмірній надструктурі притаманний як гіперхаос (що на думку авторів описує появу хаотичної фази), так і встановлення квазістабільного стану з появою довгоперіодичних співмірних фаз. Отримані Фур'є спектри неспівмірної надструктури засвідчують, що основний стан системи характеризується дивним атрктором з граничним циклом.

Ключові слова: неспівмірна надструктура, фазовий портрет, показники Ляпунова.

Неспівмірна надструктура може виступати модельним об'єктом при дослідженні різних типів хаосу, що виникають в динамічних системах, а також різних процесів самоорганізації даної надструктури. Найбільшими представниками, які володіють неспівмірними надструктурами є діелектричні кристали, зокрема кристали групи A_2BX_4 . Для даних об'єктів притаманні складні фазові перетворення. Зокрема виникнення неспівмірної фази, співмірних довгоперіодичних фаз та хаотичної фази. В першу чергу таке різноманіття зумовлене різними режимами неспівмірної надструктури: синусоїдальний, солітонний, стохастичний.

При фазовому переході вихідна-неспівмірна фаза (T_1), виникає неспівмірна надструктура, яка характеризується синусоїдальною модуляцією. Зі збільшенням анізотропної взаємодії, яка описується інваріантом Дзялошинського, проходить зміна режиму неспівмірної надструктури від синусоїдального до солітонного. Даному режиму модуляції притаманно поява ряду ефектів: ефект оптичної і термічної пам'яті, поява термічних циклів, глобального гістерезису, співмірних довгоперіодичних фаз, тощо.

Причиною їх виникнення є пінінг неспівмірної надструктури на не контрольованих дефектах та домішках.

Коли сила взаємодії між солітонами стає співмірною силі пінінгу неспівмірної надструктури на дефектах і домішках, спостерігається виникнення стохастичного режиму неспівмірної надструктури з появою хаотичної фази.

Виникаючий, при фазовому переході вихідна-неспівмірна фаза, параметр порядку є двокомпонентним і описує просторову модуляцію спонтанної поляризації, чи деформації.

В даній роботі розглянемо неспівмірну надструктуру яка характеризується просторовою модуляцією величини спонтанної деформації, та проведемо дослідження динаміки даної системи. Як відомо динаміку таких систем визначають параметри: T і K . Де параметр T визначає стійкість неспівмірної надструктури, а K характеризує анізотропну взаємодію, яка описується інваріантом Дзялошинського. Згідно праці [1] сегнетоеластичність неспівмірної модуляції визначається непарним значенням n , який характеризує симетрію потенціалу:

$$\Phi = \int \frac{r^2}{2u} \left(-R^2 + \frac{R^4}{2} + \frac{\omega r^{\frac{n}{2}-2}}{(2u)^{\frac{n}{2}-1}} R^n (1 + \cos n\varphi) - \frac{\sigma}{r^{\frac{1}{2}} \gamma^{\frac{1}{2}}} R^2 \varphi' + (R')^2 + R^2 (\varphi')^2 \right) d\xi + \quad (1)$$

$$\int \frac{r^2}{2u} \left\{ \frac{\beta r}{\gamma} \left[(R' - R\varphi')^2 + (2R'\varphi' + R\varphi'')^2 \right] \right\} d\xi - \frac{\alpha r}{4u} R^2$$

Варіація функціоналу вільної енергії (1) дає систему двох рівнянь для фазової та амплітудної функції:

$$R'' - R^3 + (1 - \varphi'^2 + T\varphi')R - R^{n-1}K(\cos n\varphi + 1) = 0, \quad (2)$$

$$\varphi'' + 2\frac{R'}{R}(\varphi' - \frac{T}{2}) + R^{n-2}K \sin n\varphi = 0, \quad (3)$$

де $T = \sigma/(\gamma r)^{\frac{1}{2}}$, $K = 2^{-\frac{n}{2}} r^{\frac{n}{2}-2} n\omega u^{1-\frac{n}{2}}$ — безрозмірні параметри.

Характеристичні показники Ляпунова дозволяють проводити якісний аналіз динамічних систем. Існує кілька практичних способів обчислення спектра показників Ляпунова. Основна ідея всіх алгоритмів полягає в слідкуванні за траєкторіями протягом невеликих проміжків часу і обчисленні швидкостей їх розбіжності, і наступному усередненні цих значень по всьому атрактору. Але більшість методів розрахунку характеристичних показників припускають існування аналітичного розв'язку системи, отримання якого важко або взагалі неможливо реалізувати. У роботі розглядається чисельний метод обчислення показників Ляпунова при різних значеннях конструктивних параметрів нелінійної динамічної системи звичайних диференціальних рівнянь другого порядку.

Характеристичні показники можуть бути використані для визначення стійкості квазіперіодичної і хаотичної поведінки так само, як і для визначення стійкості станів рівноваги у періодичних рішеннях.

У роботі в програмному середовищі Python, з використанням бібліотеки JiTCODE, була розроблена програма для розрахунку показників Ляпунова при $n = 3$ і $T = 1.0$. Код програми наведено на рис. 1. Згідно рис. 1 $T = p$, $K = q$, $r = n$. Таке перепозначення викликано особливістю використаної бібліотеки JiTCODE [2].

Для розрахунку системи диференціальних рівнянь згідно задачі Коші необхідно початкові умови. В даній роботі вони вибирались наступним чином: $R = 0.3$, $R' = 0$, $\varphi = 0$, $\varphi' = 0$. Величина амплітуди параметра порядку вибиралась рівною $R = 0.3$ виходячи із міркувань наведених в роботі [3]. Похибка отриманих значень величин показників Ляпунова становила $10 \div 1\%$.

```

from jitcode import jitcode_lyap, y, t
from scipy.stats import sem
import numpy as np
from sympy import sin, cos
import matplotlib.pyplot as plt
import array as arr
p=1.0
q=0.0
r=3
lyapy = arr.array('d',[ ])
for q in np.arange(0.001,1.35,0.003):
    f= [
        y(1),
        y(0)**3-(1+p*y(3)-y(3)**2)*y(0)+q*(y(0)**(r-1))*(1+cos(r*y(2))),
        y(3),
        -(y(1)/y(0))*(2*y(3)-p)-q*(y(0)**(r-2))*sin(r*y(2))
    ]
    n = len(f)
    initial_state = np.array([0.3,0.0,0.0,0.0])
    ODE = jitcode_lyap(f, n_lyap=n)
    ODE.set_integrator("BDF")
    ODE.set_initial_value(initial_state,0.0)
    times = range(10,1000,1)
    lyaps = []
    for time in times:
        lyaps.append(ODE.integrate(time)[0])
    # converting to NumPy array for easier handling
    lyaps = np.vstack(lyaps)
    for i in range(n):
        lyap = np.average(lyaps[5:,i])
        stderr = sem(lyaps[5:,i]) # Note that this only an estimate
        print(q, "%i. Lyapunov exponent: % .4f ± % .4f" % (i+1,lyap,stderr))
    lyapy=np.append(lyapy,[lyap]); q=np.append(q,[lyap])
lyapy=np.array(lyapy)
print(lyapy)
q = np.arange(0.001,1.3,0.003)
j=len(q)
lyapy.shape=j,4
print(q, lyapy[ :,0])
print(q, lyapy[ :,1])
print(q, lyapy[ :,2])
print(q, lyapy[ :,3])

```

Рис. 1. Код програми по розрахунку величини показників Ляпунова при зміні параметра анізотропної взаємодії $q = K$, при $p = T = 1.0$, $r = n = 3$.

Згідно рис. 2 перший коефіцієнт Ляпунова є додатній, другий - від'ємний із незначним значенням його величини. Третій і четвертий показник є від'ємним. Слід

зазначити, що вони проявляють виражену аномальну поведінку в околі при переході до хаосу. При $q < 1$ (за умови $T = 1.0$, тобто стійкості неспівмірної надструктури) дана система характеризується одним позитивним значенням показника Ляпунова і трьома від'ємними значеннями. Причому третій показник приймає від'ємне значення, яке по модулю значно перевищує інші показники. Отже, сума всіх показників Ляпунова є від'ємною, то система характеризується граничним циклом.

Розглянутий фазовий простір з розмірністю $n = 3$ при $q < 1.0$ характеризується дивним атрактором з одним позитивним показником Ляпунова (+, -, -, -). Отже неспівмірну фазу в синусоїдальному режимі можна розглядати як фазу, що характеризується дивним атрактором з граничним циклом. Відомо, що при появі гармонік неспівмірної надструктури та виникнення пінінгу неспівмірної надструктури на дефектах кристалічної структури спостерігається її перехід від синусоїдального до солітонного режиму. Солітонний режим неспівмірної надструктури характеризується появою довгоперіодичних співмірних фаз, та хаотичної фази при переході між двома співмірними довгоперіодичними фазами. Отже може мати місце ситуація, іменована гіперхаосом: (+, +, -, -), коли позитивних показників є два. На нашу думку така ситуація реалізується при $q > 1.5$ (рис. 2).

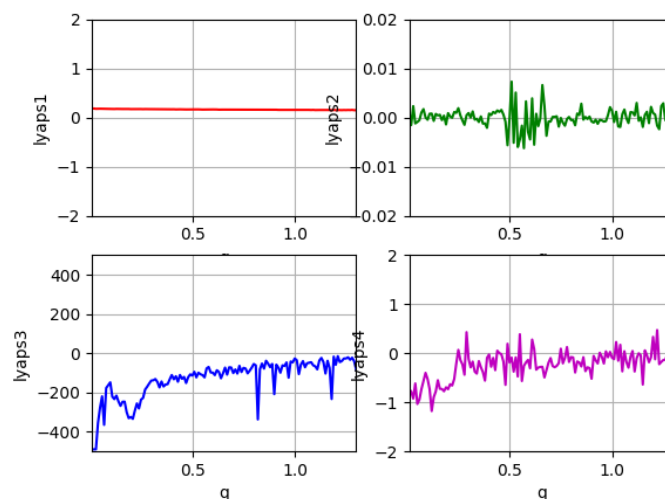


Рис. 2. Залежність показників Ляпунова ($lyaps[i]$) від величини анізотропної взаємодії $q = K$, що описується інваріантом Дзялошинського при умові $T = 1.0$; $n = 3$; $R = 0.3$, розраховані методом BDF

На рис. 2 наведено залежність величин показників Ляпунова від параметра K при сталому значенні параметра $T = 1$, який описує стійкість неспівмірної надструктури. Значення T вибиралось з міркування, яке наведено в роботі [3], а саме стійкістю неспівмірної надструктури. Більш повну картину поведінки показників Ляпунова дають об'ємні діаграми які відображають їх залежність від параметрів K і T . На рис. 3 наведено об'ємні діаграми поведінки показників Ляпунова, які засвідчують, що вже при малих значення K ($K > 0.5$) і T ($T > 0.5$) може спостерігатись перехід до гіперхаосу. Даний

режим гіперхаосу, згідно Рис. 2 і Рис. 3 може характеризуватись двома і більше позитивними значеннями показників Ляпунова.

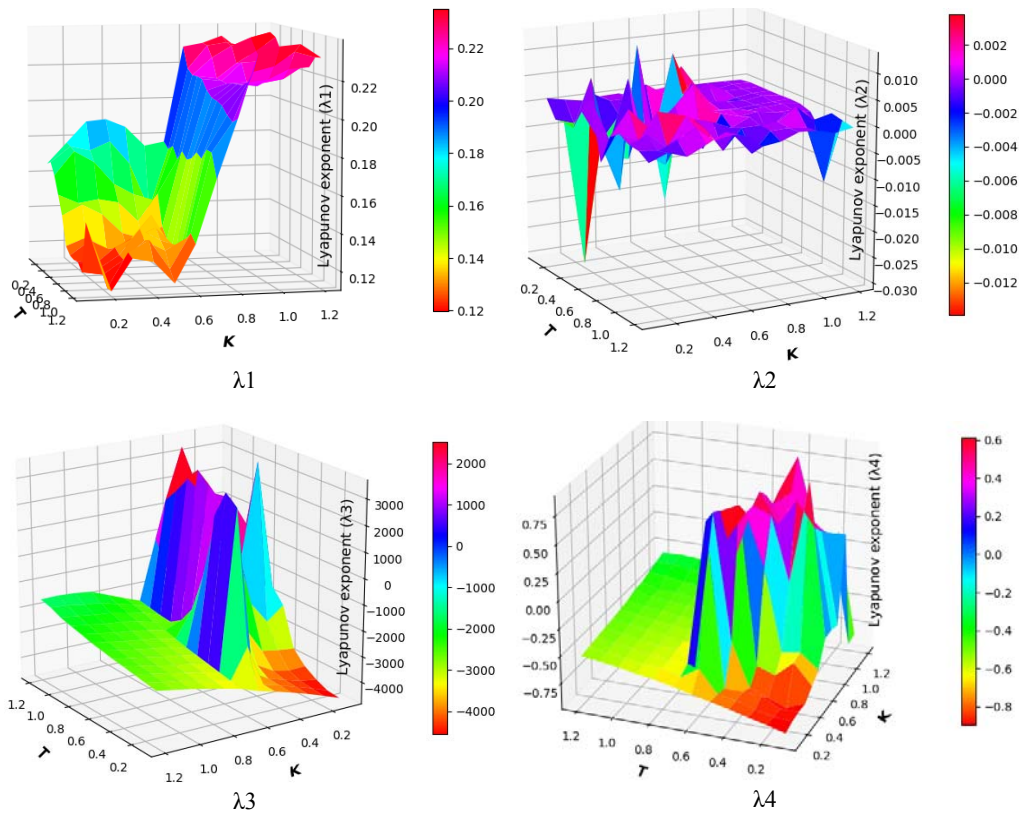


Рис.3. Залежність показників Ляпунова ($\lambda[i]$) від величини анізотропної взаємодії $q = K$, та параметра стійкості системи T , що описується інваріантом Дзялошинського при умові $n = 3$; $R = 0.3$, розраховані методом BDF

Для підтвердження такої динаміки неспівмірної надструктури були проведені дослідження Фур'є спектрів та фазових портретів даної системи. На рис. 4 наведено фазові портрети та Фур'є спектри при зміні параметра, що описує анізотропну взаємодію неспівмірної надструктури.

Фур'є спектр граничного циклу при $T = 1.0$ і $K = 0 \div 1.4$ є дискретним з чіткими піками при частотах, які відповідають основним гармонікам циклу. На відміну від граничного циклу, розподіл спектральної густини хаотичного атратора, який виникає при $T = 1.0$ і $K = 1.5$ (рис. 4) є неперервною, але в ньому збереглися всі піки, які умовно кажучи є "пам'яттю" про гармоніки зниклого граничного циклу. Вони чітко виділяються в неперервному Фур'є спектрі.

На рис. 4 наведено фазові портрети при сталих значеннях T ($T = 1.0$) і n ($n = 3$) при змінних K ($K = 0 \div 1.5$). За умови коли $K = 0$ атрaktor набуває вигляду типу шлейфу. Такий атрaktor характерний для неспівмірних надструктур які перебувають в

синусоїдальному режимі неспівмірної модуляції. Зі збільшення величини K ($K = 0 \div 0.2$) простежується збільшення кількості біфуркацій та перехід до атратора який характеризується каскадом біфуркацій подвоєння періодів циклу.

З допомогою математичної симуляції розглянемо вплив параметра анізотропної взаємодії K при якій система переходить в хаотичний стан. На рис. 4 наведено вигляд атратора при $K > 0.2$, та на межі переходу до хаотичного стану за умови: $n = 3$, $T = 1$, $K = 1.5$. При збільшенні параметра K ($0.2 < K < 1.5$) простежується зменшення кількості біфуркацій (рис. 4), та зменшення числа піків у Фур'є спектрі. При $K = 1.5$ атратор характеризується складною траєкторією спірального типу. За цих умов розподіл спектральної густини хаотичного атратора є неперервним (рис. 4).

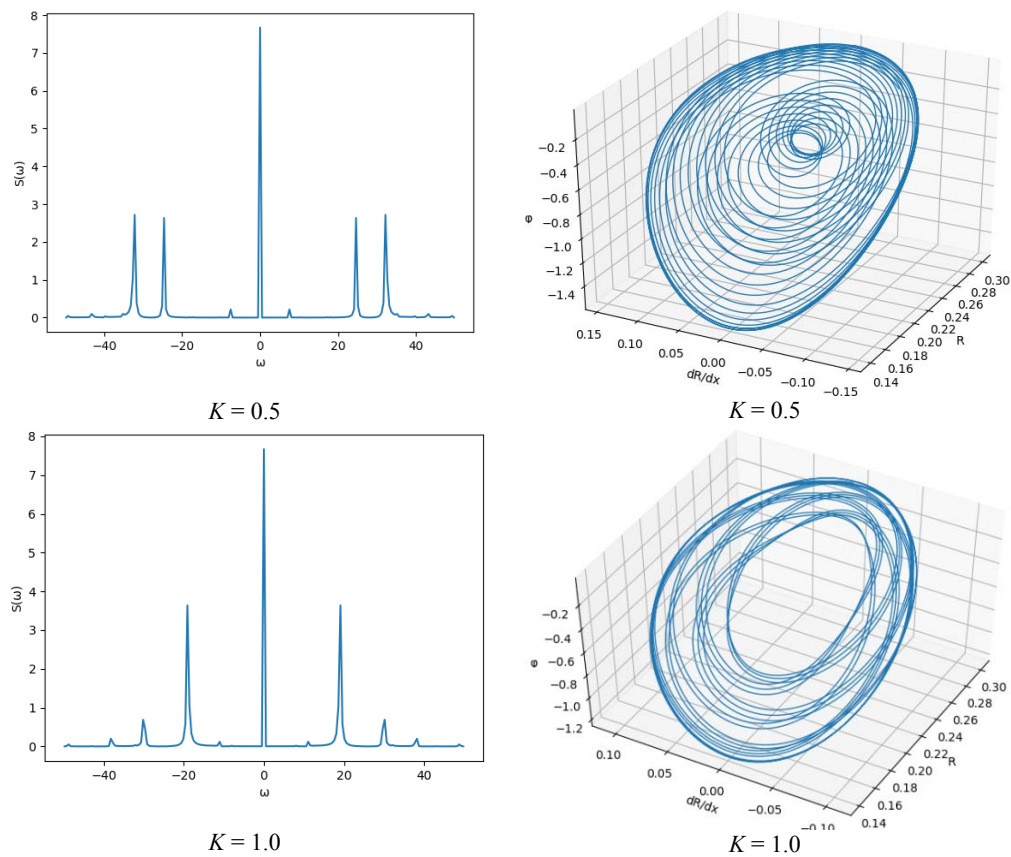


Рис. 4. Фазовий портрет системи в координатах R , dR/dx , $d\phi/dx$ та фурє спектрів за умови: $R_0 = 0,3$; $R' = 0$; $\phi_0 = 0$; $\phi' = 0$ $T = 1,0$, $n = 3$, при різних значеннях параметра K .

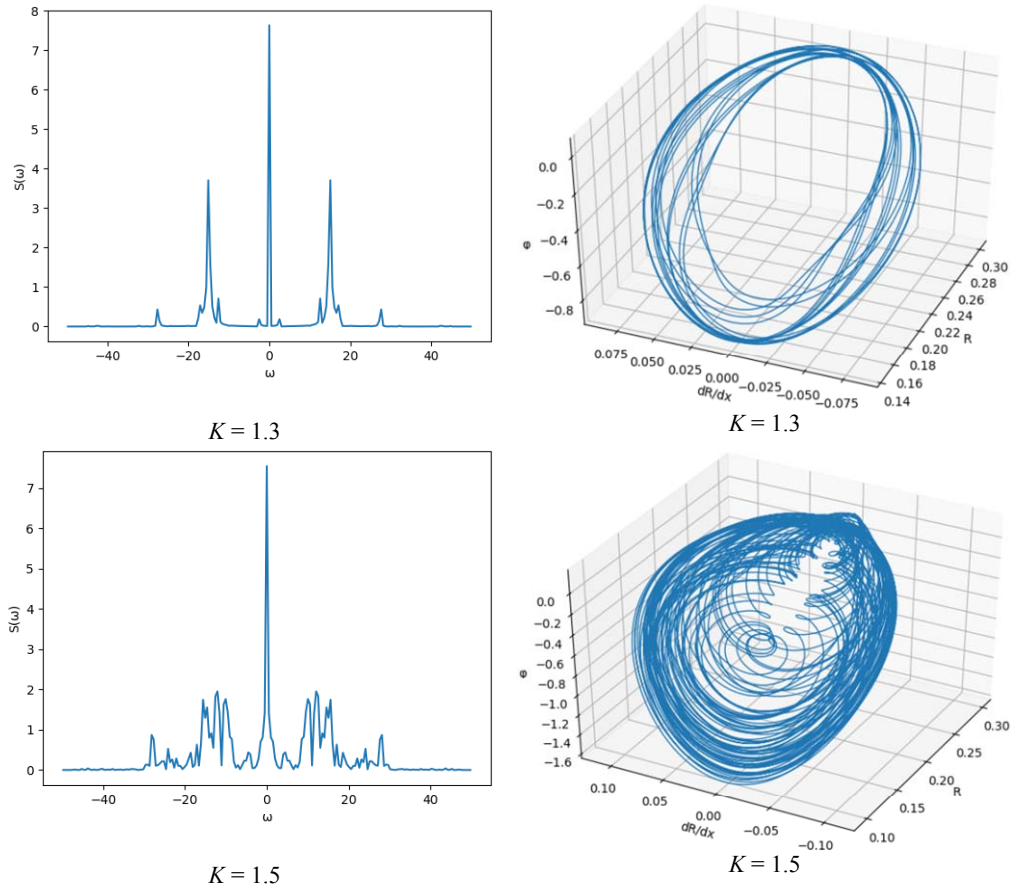


Рис. 4 (продовження). Фазовий портрет системи в координатах R , dR/dx , $d\phi/dx$ та фур'є спектрів за умови: $R_0 = 0,3$; $R' = 0$; $\phi_0 = 0$; $\phi' = 0$ $T = 1,0$, $n = 3$, при різних значеннях параметра K .

З метою підтвердження існування гіперхаосу при $K \geq 1,5$ були проведені дослідження фазочастотних характеристик просторових коливань амплітуди параметра порядку (рис. 5). Згідно рис. 5 фазова функція є періодичною, оскільки її автокореляція є теж періодичною. З збільшенням величини K ($0 < K < 1,3$) простежується поступове зникнення періодичної структури. За умови переходу до хаосу фазочастотна характеристика набуває хаотичного значення, а автокореляція набуває вигляду «білого шуму».

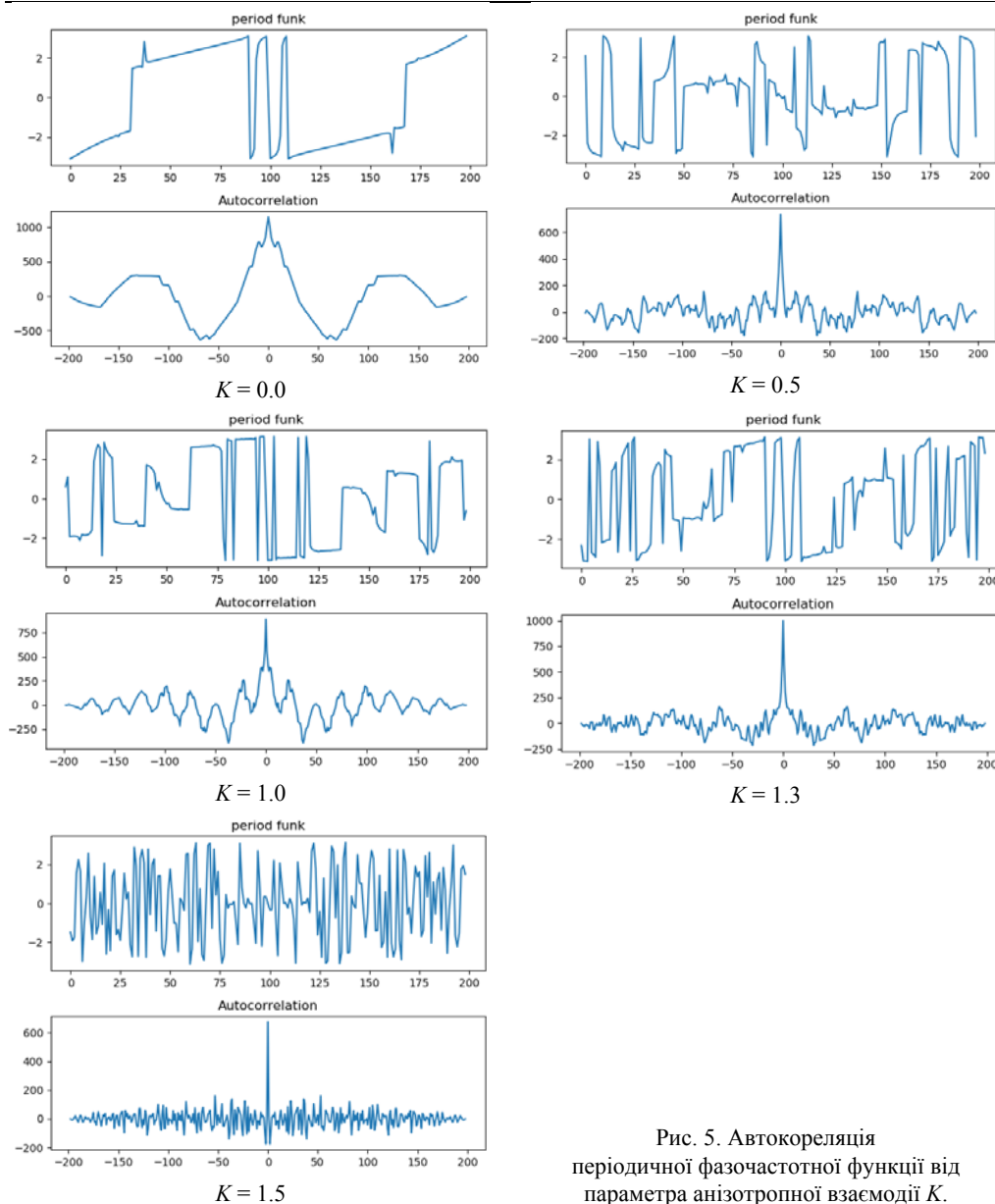


Рис. 5. Автокореляція періодичної фазочастотної функції від параметра анізотропної взаємодії K .

Отже виходячи із вище викладеного можна зробити наступні висновки. Вперше для сегнетоеластичного кристалу $[N(CH_3)_4]_2CuCl_4$ (з мультиплікацією комірки $n = 3$), який в температурному інтервалі $T_i = 297 K \div T_c = 291 K$ володіє неспівмірною надструктурою, яка описується системою диференціальних рівнянь (вирази 2 і 3), були розраховані показники Ляпунова в широкому діапазоні параметрів, які визначають динаміку даної надструктури.

Встановлено що для неспівмірної надструктури характерне позитивне значення одного показника Ляпунова, та від'ємні значення інших трьох показників. Другий показник Ляпунова набуває невеликих значення в околі нуля, і носить явно виражений аномальний характер при $K = 0.5 \div 0.7$ і $K > 1.0$. Третій і четвертий показник є від'ємні. Оскільки третій показник набуває значення, яке значно перевищує суму всіх інших, то сума всіх показників Ляпунова є негативною в діапазоні $K < 1.0$. Однак слід зазначити, що четвертий показник Ляпунова носить виражений аномальний характер і приймає скачкоподібну зміну величини від від'ємного до додатного значення, і навпаки.

Отже неспівмірна структура характеризується, як система що має граничний атрактор. Для неспівмірної надструктури, яка описується двокомпонентним параметром порядку притаманний спектр показників Ляпунова, який характеризується постійним додатним значенням першого показника Ляпунова. Сильно вироджена аномальна поведінка третього і четвертого показників Ляпунова, засвідчує, що неспівмірній надструктурі притаманний як гіперхаос (описує появу хаотичної фази), так і квазістабільний стан з появою довгоперіодичних співмірних фаз.

Отримані Фур'є спектри неспівмірної надструктури засвідчують, що основний стан системи характеризується граничним циклом.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. *Kuno I.M.* Inhomogeneous States of Thin-layer Crystals with Incommensurate Superstructure / I.M. Kuno, S.A. Sveleba, I.V. Karpa, I.M. Katerynchuk // J. Nano-Electron. Phys. - 2018. - Vol. 10, No 2 - P 02026(1)-02026(6).
2. *Gerrit Ansmann.* Efficiently and easily integrating differential equations with JiTCODE, JiTCDDE, and JiTCSDE. Mathematical Software. / A. Gerrit / Chaos. 2018. – 28. – 043116.
3. *Ктиторов С. А.* Неоднородные состояния в тонких пленках несобственного несоразмерного сегнетоэлектрика с инвариантом Лифшица / С. А. Ктиторов, О. С. Погорелова, Е. В. Чарная. // ФТТ. – 2009. – Т. 51. – № 8. – С. 1480–1482.

**THE BEHAVIOR OF THE LYAPUNOV'S EXPONENTS FOR THE
INCOMMENSURATE STRUCTURE WITH THE PARAMETER OF THE
SPONTANEOUS DEFORMATION AS THE ORDER PARAMETER**

S. Sveleba, I. Katerynychuk, I. Kunyo, I. Karpa, Ya. Shmygelsky

*Ivan Franko National University of Lviv,
107 Tarnavsky St., UA-79017 Lviv, Ukraine
incomlviv@gmail.com*

The Lyapunov's exponents in a wide range of parameters that determine the dynamics of an incommensurate superstructure for ferroelectric crystals $[\text{N}(\text{CH}_3)_4]_2\text{CuCl}_4$, which have an incommensurate superstructure were calculated. The calculation of the Lyapunov's exponents was performed by the Adams-Multon method in the Python software environment using the JITCODE library.

It is established that the positive value of one Lyapunov exponent, and the negative value of the other three exponents for incommensurate superstructure, is characterized. The incommensurate superstructure is characterized by a strange attractor with a boundary cycle, since the third indicator acquires a value that far exceeds the sum of all others. The Lyapunov's exponent spectrum, with a constant positive value of the first Lyapunov's exponent for an incommensurate superstructure described by a two-component order parameter, is characterized. The strongly degenerate abnormal behavior of Lyapunov's third and fourth exponents shows that the incommensurate superstructure is characterized by hyperchaos, which, according to the authors, describes the appearance of a chaotic phase, and the establishment of a quasi-stable state with the appearance of long-periodic proportional phases.

The ground state of the system is characterized by a boundary cycle, as evidenced by the Fourier spectra of an incommensurate superstructure. Fourier spectrum of the boundary cycle is discrete with distinct peaks at frequencies that correspond to the fundamental harmonics of the cycle. In contrast to the boundary cycle, the distribution of the spectral density of the chaotic attractor, which occurs at $T = 1.0$ and $K = 2.0$, is continuous, but it preserves all peaks, which, conventionally speaking, are a "memory" of the harmonics of the missing boundary cycle. They are clearly distinguished in a continuous Fourier spectrum. Chaotic attractor is characterized by anomalous spatial behavior of the amplitude and phase of the order parameter. The study of phase-frequency characteristics of spatial oscillations of the amplitude of the order parameter were carried out. Gradual disappearance of the periodic structure as the magnitude K ($0 < K < 1.3$) increases, the phase-frequency characteristic becomes chaotic in the condition of transition to chaos (at $K \geq 1.5$), and its autocorrelation is a kind of "white noise".

Keywords: incommensurate superstructure, phase portrait, Lyapunov's exponent.

*Стаття: надійшла до редакції 25.09.2019,
доопрацьована 30.09.2019,
прийнята до друку 01.10.2019*