Изв. вузов «ПНД», т. 19, № 1, 2011 УДК 530.182, 534.1, 534.015

q-БРИЗЕРЫ: ОТ ПАРАДОКСА ФЕРМИ–ПАСТЫ–УЛАМА ДО АНОМАЛЬНОЙ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ*

М.В. Иванченко

В статье дается обзор актуальных проблем нелинейной физики, в которых теория q-бризеров – точных периодических решений, экспоненциально локализованных в модовом пространстве – находит применение.

Ключевые слова: Нелинейные моды, локализация энергии, q-бризеры.

Введение

В 1955 году Э. Ферми, Дж. Паста, и С. Улам выдвинули гипотезу о нелинейном механизме термализации в твердых телах и попытались смоделировать этот процесс в численном эксперименте с нелинейными колебательными цепочками [1]. Результат оказался парадоксальным: энергия оставалась локализованной в начальной и нескольких соседних низкочастотных модах. Более того, на больших временах интегрирования наблюдалось практически полное возвращение энергии в начальную моду. Это открытие дало новый импульс исследованиям фундаментальной проблемы термализации и эргодичности нелинейных систем [4–6], в частности, развитию теорий детерминированного хаоса [2] и солитонов в интергируемых системах [3], порогов слабого и сильного хаоса [2, 7–11].

В статье дается обзор последних результатов теории q-бризеров, точных периодических решений нелинейной системы Ферми–Пасты–Улама (ФПУ), которые позволяют качественно и полуколичественно объяснить парадокс ФПУ [12]. q-Бризеры являются продолжением линейных мод в нелинейный режим, экспоненциально локализованы в q-пространстве нормальных мод и сохраняют устойчивость при достаточно малой нелинейности. Начальные условия в эксперименте Ферми, Пасты и Улама 55-летней давности находились вблизи этих решений, и траектории оставались в окрестности q-бризеров. Порог устойчивости q-бризеров совпадает с порогом слабого хаоса (хаотизации колебаний, остающихся локализованными в модовом

*Статья написана по материалам конференции «Хаотические автоколебания и образование структур», Саратов, 4–9 октября, 2010.

пространстве), а порог их делокализации – с порогом сильного хаоса (быстрой делокализации энергии и термализации системы).

В разделе 1 перечислены основные закономерности процессов термализации в цепочечных и решеточных системах. В разделе 2 приводятся базовые результаты теории q-бризеров. В разделе 3 рассматриваются свойства q-бризеров в системах с одновременным присутствием нелинейности и беспорядка, и обсуждается задача аномальной теплопроводности.

1. Проблема Ферми–Пасты–Улама

Энрико Ферми сохранял интерес к проблеме равнораспределения энергии по степеням свободы на протяжении многих лет. Так, в своей работе 1923 года [13] он предпринял попытку усилить теорему Пуанкаре, гласящую, что гамильтониан нелинейной системы в общем случае не имеет других интегралов движения, кроме энергии. Предположение Ферми заключалось в том, что нелинейность обусловливает отсутствие инвариантных многообразий в фазовом пространстве, которые могли бы изолировать некоторые области последнего. Любопытно, что Колмогоров сформулировал свою знаменитую теорему о структурной устойчивости торов в конечномерных системах (известную теперь как КАМ-теорема) в 1954-м, в том же году, когда Ферми, Паста и Улам предприняли попытку численно показать обратное: неизбежность перехода нелинейной системы в состояние с равнораспределенной энергией из состояния мономодового возбуждения. Моделировавшаяся ими система – цепочка N частиц одинаковой массы, связанных пружинами, с линейными и нелинейными членами в силе взаимодействия: квадратичными (так называемая модель α-ФПУ)

$$\ddot{x}_n = (x_{n+1} - 2x_n + x_{n-1}) + \alpha[(x_{n+1} - x_n)^2 - (x_n - x_{n-1})^2] \tag{1}$$

или кубическими (β-ФПУ)

$$\ddot{x}_n = (x_{n+1} - 2x_n + x_{n-1}) + \beta[(x_{n+1} - x_n)^3 - (x_n - x_{n-1})^3] \ , \tag{2}$$

где x_n – отклонение n-й частицы от состояния равновесия, а граничные условия – $x_0 = x_{N+1} = 0$.

Замена переменных $x_n(t) = \sqrt{2/(N+1)} \sum_{q=1}^{N} Q_q(t) \sin(\pi q n/(N+1))$ задает переход в пространство N нормальных мод с амплитудами $Q_q(t)$ и частотами $\omega_q = 2\sin(\pi q/(2(N+1)))$. Уравнения движения в этом случае имеют вид

$$\ddot{Q}_q + \omega_q^2 Q_q = -\frac{\alpha}{\sqrt{2(N+1)}} \sum_{l,m=1}^{N} \omega_q \omega_l \omega_m B_{q,l,m} Q_l Q_m \tag{3}$$

для модели α-ФПУ (1) и

$$\ddot{Q}_q + \omega_q^2 Q_q = -\frac{\beta}{2(N+1)} \sum_{l,m,n=1}^{N} \omega_q \omega_l \omega_m \omega_n C_{q,l,m,n} Q_l Q_m Q_n \tag{4}$$

для β-ФПУ модели (2). Коэффициенты взаимодействия

$$B_{q,l,m} = \sum_{\pm} (\delta_{q\pm l\pm m,0} - \delta_{q\pm l\pm m,2(N+1)}) \ , \tag{5}$$

$$C_{q,l,m,n} = \sum_{\pm} (\delta_{q\pm l\pm m\pm n,0} - \delta_{q\pm l\pm m\pm n,2(N+1)} - \delta_{q\pm l\pm m\pm n,-2(N+1)}) \tag{6}$$

задают селективную нелинейную нелокальную связь между модами. В линейном случае в отсутствие этого взаимодействия существует N интегралов движения, которые отвечают энергиям линейных нормальных мод $E_q = 1/2\left(\dot{Q}_q^2 + \omega_q^2 Q_q^2\right)$.

Исходя из теоретических соображений [13], Ферми, Паста и Улам ожидали, что энергия, изначально сконцентрированная в низкочастотной моде q_0, в результате нелинейного взаимодействия будет перераспределяться между остальными модами, воспроизводя при этом переход к равновесному состоянию. Результаты, к их удивлению, были противоположными. Энергия не только не перераспределялась сколько-нибудь равномерно, но и возвращалась в исходную моду (до 98%) через большие промежутки времени (рис. 1). Еще более впечатляющим казалось то, что время возвращения даже уменьшалось при увеличении энергии/коэффициента нелинейности. Объяснение ошибкой численного счета было опровергнуто более поздними численными экспериментами: улучшенная точность и большие времена интегрирования позволили пронаблюдать возвращение до 99% от начальной энергии [14].

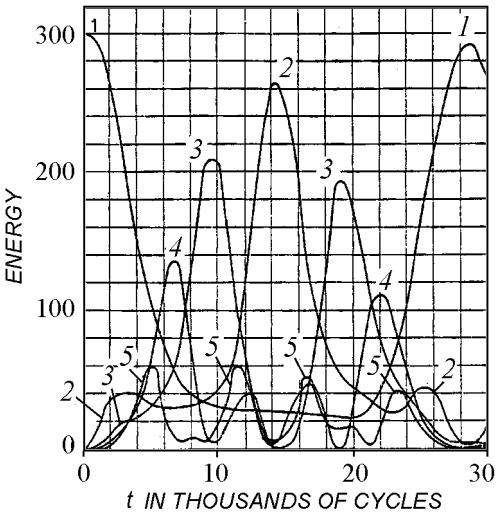

Рис. 1. Эволюция энергий нескольких начальных мод в численном эксперименте Ферми–Пасты–Улама с $q_0 = 1$, $\alpha = 0.25$, $N = 32$ [1]

Большой шаг в понимании явления ФПУ сделан в [2], где был предложен критерий возникновения нелинейных резонансов, приводящих к динамическому хаосу. Было указано, что в отсутствие сильных резонансов динамика нелинейной системы может оставаться регулярной или квазирегулярной, а термализация, как следствие, будет отсутствовать, что и могло привести к результатам, полученным Ферми, Пастой, Уламом. При превышении некоторого порога по энергии $E > E^{\mathrm{c}}$ резонансы, вызванные нелинейным сдвигом частот, приводят к развитию хаотической динамики, быстрому перераспределению энергии между модами и, в итоге, к термализации. Эти предсказания нашли подтверждение в численных экспериментах [15].

Дальнейшее исследование проблемы ФПУ развивалось в двух направлениях. Аналитические оценки [7, 8] и численные эксперименты [9–11] показали, что порог термализации (сильного хаоса) сохраняется и в термодинамическом пределе, отвечая конечной плотности энергии: $\lim\limits_{N\to\infty} E/N = \varepsilon_{\mathrm{c}} > 0$. Попутно было обнаружено существование так называемого режима слабого хаоса, в котором динамика становилась хаотической, но энергия оставалась сосредоточенной в нескольких соседних модах. Хотя аргументы общего характера говорят в пользу конечной термализации и в режиме слабого хаоса (вследствие диффузии Арнольда), уверенно этот процесс до сих пор не наблюдался в численных экспериментах, в силу крайне больших характерных временных масштабов. В отличие от порога сильного хаоса, порог слабого хаоса стремится к нулю в термодинамическом пределе.

Второе направление работ связано с исследованием характерных времен перехода к термализованному состоянию и сохраняет актуальность до настоящего времени. Можно считать установленным, что зависимость от энергии системы является степенной для сравнительно высоких значений энергии и экспоненциальной для низких [7, 16, 17]. Скейлинг также сильно зависит от типа начальных условий (так, например, при коррелированности начальных фаз осцилляторов степенная зависимость от плотности энергии сменяется на аналогичную зависимость от полной энергии) [18].

Самым интригующим, пожалуй, стало открытие так называемых «естественных пакетов» [7, 19]. Оказалось, что между порогами слабого и сильного хаоса происходит сравнительно быстрое перераспределение части энергии из исходной или нескольких исходных мод вверх по спектру. В формирующемся квазистационарном распределении плотность энергии падает экспоненциально с ростом номера моды. Такие пакеты, экспоненциально локализованные в модовом пространстве, характеризуются очень большим временем жизни, и часто о них говорят как о метастабильных структурах. Их разрушение происходит через перекачку энергии в некоторые избранные моды из высокочастотной части спектра, после возбуждения которых энергия распределяется уже по всему спектру. Каков механизм образования таких пакетов, чем определяется степень их экспоненциальной локализации, в чем причина их устойчивости, за счет чего в конечном итоге происходит их разрушение – оставалось не ясным до последнего времени.

Следует также отметить результаты по исследованию задачи ФПУ в двумерных системах. Существенная вычислительная сложность долгое время препятствовала проведению численных экспериментов, однако недавно они все-таки были выполнены. Выяснилось, что, хотя некоторое ускорение процессов термализации по сравнению с одномерными системами и наблюдается, быстрое распределение энергии по спектру отсутствует при достаточно малых энергиях [20].

2. q-Бризеры

В основу гипотезы о существовании q-бризеров – точных периодических решений систем (1), (2), локализованных в модовом пространстве – легла аналогия с дискретными бризерами – нелинейными периодическими траекториями, экспоненциально локализованными в прямом пространстве [21]. Наличие и устойчивость таких траекторий могло бы объяснить (а) отсутствие термализации на временах, доступных в численном эксперименте, если начальные условия выбраны в окрестности одной из траекторий, и (б) природу естественных пакетов, как отражающих структуру фазового пространства вблизи q-бризеров. И действительно, устойчивые периодические траектории, экспоненциально локализованные в модовом пространстве, были найдены – как непрерывное продолжение линейных нормальных мод в нелинейную область [12].

Рассмотрим сначала вопрос о принципиальной возможности продолжения линейных мод в нелинейный режим. Для этого положим $\alpha = \beta = 0$, зададим энергию $E_{q_0} = E$ в нормальной моде $q = q_0$, в то время как остальные q-осцилляторы непо-

движны. Такие начальные условия отвечают периодической траектории в фазовом пространстве нашей линейной модели. Теорема Ляпунова гарантирует возможность продолжения при отсутствии резонансов $n\omega_{q_0} \neq \omega_{q\neq q_0}$, что, в общем случае, справедливо для конечного числа осцилляторов N [22]. Можно ожидать, что периодическая траектория останется локализованной в q-пространстве по крайней мере до некоторого критического ненулевого значения α, β.

На возможности продолжения линейных мод основан численный алгоритм отыскания q-бризеров [12]. В качестве нулевого приближения выберем q_0-ю линейную моду. Зададим следующие начальные условия: $Q_{q\neq q_0}(0) = 0$, $\dot{Q}_q(0) = 0$, и $Q_{q_0}(0) = \sqrt{2E}/\omega_{q_0}$. Сконструируем отображение $\vec{y} \equiv \{x_q\}$ на себя путем интегрирования уравнений динамики до момента, когда $\dot{x}_s(t) = 0$, $x_s(t) > 0$, $s = [(N+1)/(2q_0)]$: $\vec{y}^{n+1} = \vec{\mathcal{F}}(\vec{y}^n)$. Периодические траектории систем (1), (2) являются неподвижными точками этого отображения. Векторная функция $\vec{\mathcal{G}} = \vec{\mathcal{F}}(\vec{y}) - \vec{y}$ используется для вычисления матрицы монодромии $\mathcal{N} = \partial\mathcal{G}(\vec{y})_i/\partial y_j$. Итерации $\vec{y}\,' = \vec{y} - \mathcal{N}^{-1}\vec{\mathcal{G}}(\vec{y})$ продолжаются до достижения требуемой точности ε: $||\vec{\mathcal{F}}(\vec{y}) - \vec{y}||/||\vec{y}|| < \varepsilon$, где $||\vec{y}|| = \max[|y_i|]$. Из системы уравнений $\vec{\mathcal{G}}(\vec{r}) = \mathcal{N}(\vec{r} - \vec{r}\,')$ находится новая стартовая точка $\vec{r}\,'$ и дополнительно корректируется отклонение энергии системы от заданного полного значения E.

На рис. 2 представлена эволюция энергии в низкочастотных модах при начальных условиях численного эксперимента Ферми, Пасты, Улама [1] и показаны значения энергий, отвечающих точному q-бризерному решению с центром в низшей моде, при совпадающей энергии и остальных параметрах. На рис. 3 приведены графики распределения энергий q-бризеров в модовом пространстве; в обоих случаях результаты численного счета показывали линейную устойчивость траектории.

Применение метода теории возмущения Линдштедта–Пуанкаре для низкочастотных мод модели α-ФПУ приводит к оценке распределения энергий нормальных мод в q-бризере [12]:

$$E_{nq_0} = \gamma^{2n-2} n^2 E_{q_0}\ ,$$
$$\gamma = \frac{\alpha\sqrt{E_{q_0}}(N+1)^{3/2}}{\pi^2 q_0^2}. \qquad (7)$$

Необходимое условие для локализации q-бризера в рамках этой оценки – $\gamma < 1$. Следовательно, уравнения (7) позволяют получить оценки для порога локализации и для соотношений подобия между параметрами q-бризера, оставляющими γ неизменным. Отметим, что вопрос динамической устойчивости q-бризеров, по всей видимости, не имеет прямого отношения к термализации как таковой. Действительно, если

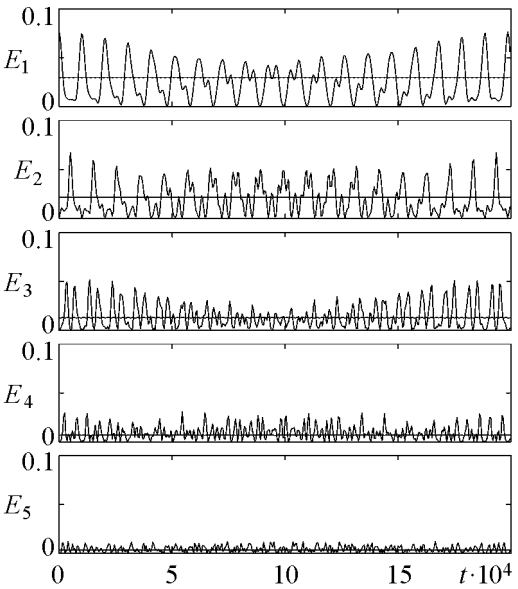

Рис. 2. Динамика энергий мод с номерами $q = 1, ...5$ для начальных условий системы ФПУ [1] (осциллирующие траектории) и точного q-бризерного решения (горизонтальные линии). Здесь $\alpha = 0.25, E = 0.077, N = 32$ [12]

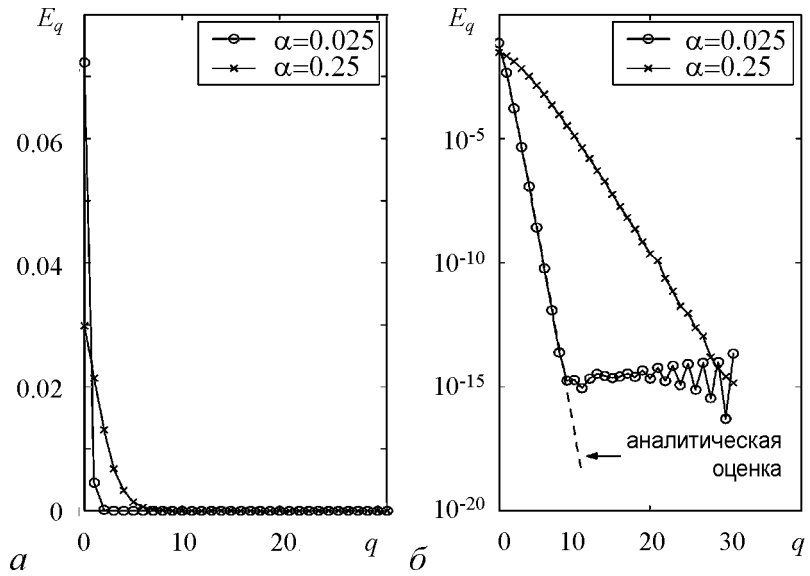

Рис. 3. Распределение модовых энергий устойчивых q-бризеров при $E = 0.077$, $N = 32$ в зависимости от величины нелинейности α: *а* – линейная шкала; *б* – логарифмическая. Пунктиром показана аналитическая оценка (7) [12]

q-бризер локализован, то ощутимая неустойчивость на краях распределения энергии исключена – в противном случае соответствующие резонансы привели бы к делокализации самого q-бризера. Неустойчивость в центре распределения приведет к хаотизации динамики в центре, но в силу отсутствия резонансов на краях не приведет к делокализации.

Аналогичным образом можно получить следующую оценку распределения энергий нормальных мод q-бризера для модели β-ФПУ:

$$E_{(2n+1)q_0} = \lambda^{2n} E_{q_0}, \quad \lambda = \frac{3\beta E_{q_0}(N+1)}{8\pi^2 q_0^2}. \tag{8}$$

Необходимое условие для локализации q-бризера – $\lambda < 1$. При условии $\lambda = 1$ q-бризер делокализуется, энергия быстро перераспределяется по спектру, система термализуется.

Анализируя линейную устойчивость q-бризеров, можно показать, что они становятся неустойчивыми при условии $6\beta E(N+1)/\pi^2 > 1$ [12]. Поскольку сами решения при этом сохраняют локализацию, то траектории не приводят к термализованному состоянию, в согласии с вышесказанным.

Обсудим обобщение теории q-бризеров на случай двумерных и трехмерных решеток. Основное условие для продолжения q-бризеров заключалось в отсутствии резонансов $n\omega_{q_0} \neq \omega_{q \neq q_0}$. Конечная система в прямом пространстве имеет дискретный спектр, и теорема Ляпунова остается в силе. Модовые числа в таком случае становятся векторами с d компонентами. В работе [23] были получены q-бризерные решения для $d = 2, 3$. Основные свойства решений цепочки сохраняются и в мно-

гомерном случае. На рис. 4 показан пример q-бризерного решения для двумерной решетки.

Для модели β-ФПУ получено следующее обобщенное выражение для распределения энергий мод:

$$E_{(2n+1)\mathbf{q}_0} = \lambda_d^{2n} E_{\mathbf{q}_0},$$
$$\lambda_d = \frac{3\beta E_{\mathbf{q}_0} N^{2-d}}{2^{2+d}\pi^2|\mathbf{q}_0|^2} \quad . \tag{9}$$

Численный анализ показывает количественное согласие с этими оценками [23].

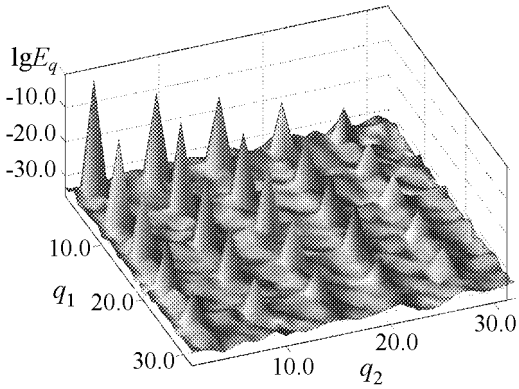

Рис. 4. Распределение энергии в q-бризере в двумерной ФПУ-решетке при $N = 32 \times 32$, $E = 1.5$, $\mathbf{q}_0 = (3, 3)$, $\beta = 0.5$ [23]

Перечислим дальнейшие обобщения теории q-бризеров. Было показано, что q-бризеры существут в полуклассических и квантовых колебательных цепочках (модели нелинейного уравнения Шредингера и Бозе–Хаббарда) [24]. Были исследованы свойства локализации q-бризеров в модовом пространстве обобщенной модели ФПУ с нелинейностью произвольного порядка [25]. Установлено, что, помимо увеличения полной энергии системы/коэффициента нелинейности, к делокализации может привести и увеличение длины системы, если порядок нелинейности в гамильтониане меньше порогового $\chi^* = 6$. Для более высоких порядков нелинейности длина локализации в модовом пространстве уменьшается с N; для любых наперед заданных величин коэффициента и порядка нелинейности можно указать такое N, выше которого q-бризер с центром в моде q_0 будет локализован. Обобщение аналитической схемы Линдштедта–Пуанкаре на случай многомодового линейного решения позволило построить квазипериодические решения, экспоненциально локализованные в модовом пространстве, получившие название q-торов [26].

Легко убедиться, что теория q-бризеров исчерпывающе объясняет все особенности термализации в модельных колебательных системах. Существование локализованных в модовом пространства периодических решений отражает локальную структуру фазового пространства. Если начальные условия находятся вблизи q-бризера, траектория будет оставаться в некоторой его окрестности достаточно длительное время и будет характеризоваться локализацией в модовом пространстве. Если q-бризер устойчив, то в некоторой его окрестности присутствуют торы с низкой эффективной размерностью; будет наблюдаться практически полное возвращение энергии в начальную моду. Если решение неустойчиво, но сохраняет локализацию – тип поведения траекторий в его окрестности отвечает слабому хаосу. Происходит быстрая эволюция распределения энергии из начальной моды к экспоненциально локализованному естественному пакету, метастабильность которого определяется локальной структурой фазового пространства (рис. 5, *а*). Результаты по проблеме ФПУ в двумерных системах объясняются в рамках этого же подхода.

Наконец, механизм разрушения естественных пакетов и термализации на очень больших временах также может быть понят с помощью анализа q-бризеров [27]. Обратим внимание на резонансные пики на краях распределений на рис. 5 как для траектории ФПУ, так и для q-бризеров. В работе получено количественное объяснение

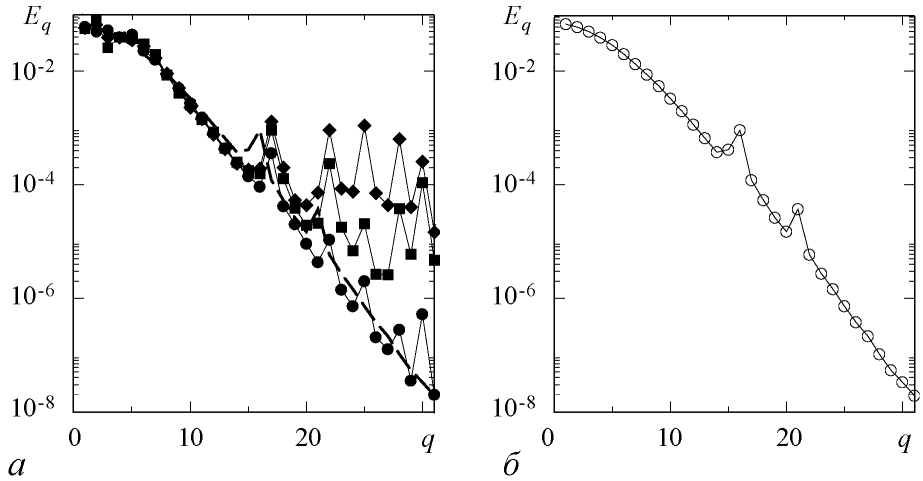

Рис. 5. *а* – распределения энергии в модовом пространстве для траектории ФПУ при $q_0 = 1$, $N = 31$, $\alpha = 0.33$, $E = 0.32$ в разные моменты времени t: 10^4 (окружности), 10^5 (квадраты), 10^6 (ромбы); *б* – распределения энергии в q-бризере для тех же параметров (изображено на рис. *а* штриховой линией) [27]

возникновения и расположения этих пиков. Они вызваны тем, что для соответствующих модовых чисел условие резонанса приближенно выполняется: $n\omega_{q_0} \approx \omega_{q\neq q_0}$. Легко убедиться в том, что пики возникают в верхней половине частотного спектра, а также только в случае низкочастотной затравочной моды. Именно это резонансное взаимодействие мод приводит к термализации.

3. q-Бризеры в системах с беспорядком

Беспорядок – неотъемлемое свойство реальных кристаллических решеток, в которых неизбежны дефекты. Естественна поэтому постановка вопроса о колебательных свойствах систем, где беспорядок и нелинейность присутствуют одновременно. Рассмотрим модель β-ФПУ со случайной пространственной неоднородностью в коэффициентах линейной связи, гамильтониан которого имеет вид:

$$H = \frac{1}{2}\sum_{n=1}^{N} p_n^2 + \sum_{n=1}^{N+1}\left[\frac{1}{2}(1+D\kappa_n)(x_n - x_{n-1})^2 + \frac{\beta}{4}(x_n - x_{n-1})^4\right], \qquad (10)$$

где $\kappa_n \in [-1/2, 1/2]$ – случайные равномерно распределенные некоррелированные величины $\langle \kappa_n \kappa_m \rangle = \sigma_\kappa^2 \delta_{n,m}$, D – параметр беспорядка.

Как и прежде, найдем уравнения движения в пространстве нормальных мод линейной системы без беспорядка

$$\ddot{Q}_q + \omega_q^2 Q_q = -\nu \sum_{p,r,s=1}^{N} C_{q,p,r,s}\omega_q\omega_p\omega_r\omega_s Q_p Q_r Q_s - d\sum_{p=1}^{N}\omega_q\omega_p K_{q,p} Q_p\,. \qquad (11)$$

Здесь коэффициенты $K_{q,p} = \dfrac{2}{N+1}\sum_{n=1}^{N}\kappa_n \cos\dfrac{\pi q(n-1)/2}{N+1}\cos\dfrac{\pi p(n-1)/2}{N+1}$ [28] задают глобальное взаимодействие мод вследствие беспорядка. Заметим, что параметры нелинейности и беспорядка $\nu = \beta/(N+1)$, $d = D/\sqrt{N+1}$ являются

малыми; $\nu, d \ll 1$ даже при не малых $\beta = D = 1$ в системах достаточно большого размера $N \gg 1$.

Рассмотрим сначала линейную систему с беспорядком: $d \neq 0$ и $\nu = 0$. Наша цель состоит в нахождении новых собственных векторов $\hat{z}_{qn}$ линейной задачи, задающих преобразование $x_n(t) = \sum_{q=1}^{N} Q_q(t)\hat{z}_{qn}$. Будем строить теорию возмущений для гармонической моды q_0 по малому параметру d: $Q_q(t) = Q_q^{(0)}(t) + dQ_q^{(1)}(t) + \ldots$, где $Q_q^{(0)}(t) = 0$ для $q \neq q_0$. В первом приближении уравнение (11) дает уравнения осцилляторов $q \neq q_0$ под действием внешней силы: $\ddot{Q}_q^{(1)} + \omega_q^2 Q_q^{(1)} = -\omega_q\omega_{q_0}K_{q,q_0}Q_{q_0}^{(0)}$. Отсюда получаем амплитуду колебаний A каждой моды

$$A_{q,q_0}^{(1)} = -\frac{\omega_q\omega_{q_0}}{\omega_q^2 - \omega_{q_0}^2}K_{q,q_0}A_{q_0}, \quad q \neq q_0. \tag{12}$$

Усредненная по времени энергия q-й моды имеет вид

$$\langle E_q \rangle = \frac{d^2 E_{q_0}\omega_q^4}{2(\omega_q^2 - \omega_{q_0}^2)^2}\left\langle K_{q,q_0}^2 \right\rangle = \frac{d^2 E_{q_0}\sigma_\kappa^2\omega_q^4}{2(\omega_q^2 - \omega_{q_0}^2)^2}. \tag{13}$$

В качестве критерия применимости выражения (12) будем использовать $\langle E_{q_0+1} \rangle \ll E_{q_0}$, получая, таким образом, условие на порядковые номера мод:

$$q_0 \ll q_c = 2\sqrt{2}(N+1)^{1/2}/D\sigma_\kappa. \tag{14}$$

Отсюда вытекает, что нормальные моды с $q_0 \ll q_c$ с хорошей точностью сохраняют форму плоских волн

$$\hat{z}_{q_0 n} = \sqrt{\frac{2}{N+1}}(\sin\frac{\pi q_0 n}{N+1} - d\sum_{p\neq q_0}\frac{\omega_{q_0}\omega_p}{\omega_{q_0}^2 - \omega_p^2}K_{q_0,p}\sin\frac{\pi p n}{N+1})$$

даже в присутствии беспорядка. Таким образом, можно говорить о модах, *делокализованных* в прямом пространстве. С другой стороны, беспорядок вызывает андерсоновскую локализацию мод. Следовательно, q_c отвечает границе между делокализованными и локализованными модами: $q_0 \ll q_c$ и $q_0 > q_c$, соответственно. Заметим, что в коротких цепочках и/или при слабом беспорядке может выполняется условие $q_c \geq N$ и *все* моды будут делокализованы. Согласно (14), для этого требуется $N \leq 8/(D^2\sigma_\kappa^2)$. Примечательно, что метод передаточных матриц дает нижнюю границу q_c для локализованных собственных состояний (метод позволяет оценить длину локализации) с аналогичной зависимостью от длины системы $q_c \propto N^{1/2}$ [29]. В совокупности эти результаты свидетельствуют о наличии зоны делокализованных мод шириной $\sqrt{N}$ с частотами в интервале $0 \leq \omega \leq \omega_c \sim N^{-1/2}$ в линейных цепочках ФПУ с беспорядком. Плоские волны являются хорошим приближением этих состояний.

Учтем теперь влияние нелинейности и будем строить продолжение делокализованных мод системы с беспорядком в нелинейный режим – q-бризеры. Перейдем к новым переменным $\{\hat{Q}_q\}$, где $x_n(t) = \sum\limits_{q=1}^{N}\hat{Q}_q(t)\hat{z}_{qn}$. Получим:

$$\ddot{\hat{Q}}_q + \omega_q^2\hat{Q}_q \approx -\frac{\nu}{2}\sum_{p,r,s=1}^{q_s} C_{q,p,r,s}\omega_q\omega_p\omega_r\omega_s\hat{Q}_p\hat{Q}_r\hat{Q}_s\ . \tag{15}$$

Будем строить теорию возмущений по степеням малого параметра ν, используя $\hat{z}_{q_0 n}$ в качестве нулевого приближения. Пренебрегая членами с порядком малости $\mathcal{O}(\nu d)$ и выше, получаем q-бризер с экспоненциально локализованным распределением энергии в модовом пространстве, совпадающим с (8). Вблизи границы зон делокализованных и локализованных мод энергии становятся пренебрежимо малы $E_{q_c} \sim \lambda^{q_c/q_0} E_{q_0}$ пока $\lambda < 1$ (то есть пока q-бризер локализован), и локализованные моды возбуждаются слабо: $\langle E_q \rangle \approx d^2 E_{q_0} \sigma_\kappa^2/2$. Результаты численных экспериментов хорошо согласуются с теоретическими оценками (рис. 6).

Анализ линейной устойчивости q-бризеров в системах с беспорядком дает следующее выражение для границы потери устойчивости [28]:

$$\beta^* = \beta_0^* \left(1 - \frac{2d(N+1)^2}{\pi^2} \Delta K\right), \quad \langle \beta^* \rangle = \beta_0^*, \ \sigma_{\beta^*} = 2\sigma_\kappa D \sqrt{N+1}/E_{q_0}, \tag{16}$$

где $\beta_0^* = \pi^2/(6E_{q_0}(N+1))$ – порог в отсутствие беспорядка, а $\Delta K = K_{\tilde{q},\tilde{q}} - 2K_{q_0,q_0} + K_{\tilde{p},\tilde{p}}$.

Помимо задачи о структуре акустического спектра нелинейных колебательных решеток с беспорядком, эти результаты имеют прямое отношение еще к одной фундаментальной физической проблеме – аномальной теплопроводности низкоразмерных систем. Как уже давно предсказано в численных экспериментах с использованием простейших модельных цепочек [30], и совсем недавно показано в физических экспериментах с нанотрубками [31], классический закон теплопроводности Фурье (поток тепла пропорционален градиенту температуры) может нарушаться. Коэффициент теплопроводности может зависеть от размеров системы, как правило, степенным образом: $\kappa \propto N^\mu$. В таких случаях говорят об аномальной теплопроводности. Одним из основных камней преткновения в аналитических теориях аномальной теплопроводности является проблема корректного описания нелинейного взаимодействия мод из средней и высокочастотной частей спектра. По-видимому, с этим связаны различия в численных значениях показателя μ, предсказываемых различными теориями. В недавней работе [32] мы предложили перейти от традиционно рассматриваемых нелинейных систем без беспорядка к более физически реалистичным системам с одновременным присутствием нелинейности и беспорядка. Было указано, что в таких системах возможно более строгое рассмотрение вклада низкочастотных и высокочастотных мод в перенос тепла и эффектов их взаимодействия. В самом деле, теория q-бризеров дает информацию о структуре спектра и мод в нели-

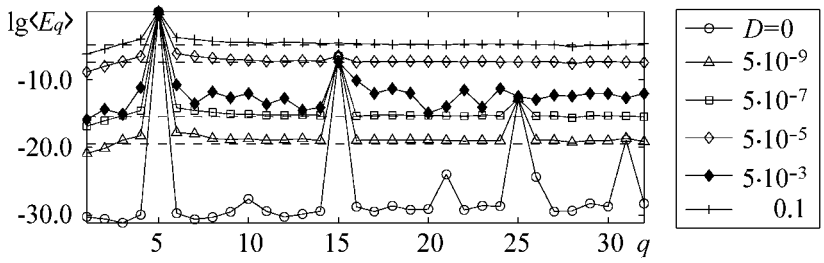

Рис. 6. Распределения энергий q-бризеров в модовом пространстве при $q_0 = 5$, $\beta = 0.01$, $N = 32$ и увеличивающейся силе беспорядка. Штриховые линии – теоретическая оценка (13). Закрашенные ромбы: распределение энергии в модовом пространстве системы с беспорядком для конкретной реализации последнего, моды пронумерованы в порядке увеличения их частоты

нейных системах с беспорядком, ширине зон делокализованных и локализованных мод. В результате удалось предсказать и теоретически объяснить различные типы теплопроводности системы, наблюдаемые при изменении температуры: от нормальной проводимости до аномальной.

Заключение

В настоящее время теория q-бризеров широко применяется в исследованиях нелинейной локализации колебаний. Актуальность определяется прикладными проблемами локализации и транспорта энергии в кристаллических решетках, упорядоченных структурах микро- и наноразмерных электромеханических осцилляторов, распространения света в решетках волноводов, динамики Бозе–Эйнштейна конденсатов в оптических решетках. Теория q-бризеров – точных периодических траекторий, экспоненциально локализованных в модовом пространстве – представляется очень мощным аппаратом для анализа нелинейной динамики таких систем в целом. Она дает исчерпывающее описание механизма термализации в твердых телах за счет нелинейности (известного как парадокс Ферми–Пасты–Улама), позволяет определять границы области линейчатого спектра в двух и трехмерных нелинейных акустических решетках, проанализировать влияние беспорядка (дефектов кристаллической решетки) на колебательный спектр системы, получить зависимость ширины зоны квазигармонических мод от размера системы. Как стало ясно совсем недавно, анализ сложной колебательной динамики распределенных систем с помощью q-бризеров может быть использован и в задаче об аномальной теплопроводности. И если для случая одномерных систем некоторый прогресс уже намечается, проблемы двумерной и трехмерной теплопроводности только ожидают систематических исследований. С точки зрения автора, самые физически интересные результаты еще предстоит получить.

Автор благодарит С. Флаха, О. Канакова, К. Мишагина, В.Д. Шалфеева, и S. Lepri за плодотворные дискуссии.

Работа поддержана фондом «Династия», Федеральной целевой программой «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009–2013 годы (госконтракты 14.740.11.0075, П2308, 02.740.11.0839) и РФФИ (10-02-00865).

Библиографический список

1. *Fermi E., Pasta J., and Ulam S.* // Los Alamos Report, LA–1940, 1955; also in: Collected Papers of Enrico Fermi / ed. E. Segre, Vol. II (University of Chicago Press, 1965) p. 978; Many-Body Problems / ed. D. C. Mattis (World Scientific, Singapore, 1993).
2. *Izrailev F.M. and Chirikov B.V.* Statistical properties of a non-linear string // Dokl. Akad. Nauk SSSR. 1966. Vol. 166. 57 [Soviet. Phys. Dokl. 1966. Vol. 11. P. 30].
3. *Zabusky N.J. and Kruskal M.D.* Interaction of «Solitons» in a collisionless plasma and the recurrence of initial states // Phys. Rev. Lett. 1965. Vol. 15. P. 240.
4. *Ford J.* The Fermi–Pasta–Ulam problem: Paradox turns discovery // Phys. Rep. 1992. Vol. 213. P. 271.

5. The Fermi–Pasta–Ulam problem – The first fifty years / Eds D.K. Campbell, P. Rosenau and G.M. Zaslavsky // CHAOS. 2005. Vol. 15, № 1.
6. *Berman G.P. and Izrailev F.M.* The Fermi–Pasta–Ulam problem: Fifty years of progress // Chaos. 2005. Vol. 15. 015104.
7. *De Luca J., Lichtenberg A.J., and Lieberman M.A.* Time scale to ergodicity in the Fermi–Pasta–Ulam system // Chaos. 1995. Vol. 5. P. 283.
8. *Shepelyansky D.L.* Low-energy chaos in the Fermi–Pasta–Ulam problem // Nonlinearity. 1997. Vol. 10. 1331.
9. *Bocchierri P., Scotti A., Bearzi B., and Loigner A.* Anharmonic chain with Lennard–Jones interaction // Phys. Rev. A. 1970. Vol. 2. 2013; *Galgani L. and Scotti A.* Planck-like distributions in classical nonlinear mechanics // Phys. Rev. Lett. 1972. Vol. 28. 1173; *Patrascioiu A.* Blackbody radiation law: Quantum or classical explanation? // Phys. Rev. Lett. 1983. Vol. 50. 1879.
10. *Kantz H.* Vanishing stability thresholds in the thermodynamic limit of nonintegrable conservative systems // Physica D. 1989. Vol. 39. P. 322; *Kantz H., Livi R. and Ruffo S.* Equipartition thresholds in chains of anharmonic oscillators // J. Stat. Phys. 1994. Vol. 76. P. 627.
11. *Casetti L., Cerruti-Sola M., Pettini M. and Cohen E.G.D.* The Fermi–Pasta–Ulam problem revisited: Stochasticity thresholds in nonlinear Hamiltonian systems // Phys. Rev. E. 1997. Vol. 55. 6566.
12. *Flach S., Ivanchenko M.V. and Kanakov O.I.* q-Breathers and the Fermi–Pasta–Ulam problem // Phys. Rev. Lett. 2005. Vol. 95. 064102; *Flach S., Ivanchenko M.V. and Kanakov O.I.* q-Breathers in Fermi–Pasta–Ulam chains: Existence, localization, and stability // Phys. Rev. E. 2006. Vol. 73. 036618.
13. *Fermi E.* Evidence that a mechanic normal system is generally quasi-ergodic // Phys. Z. 1923. Vol. 24. P. 261.
14. *Tuck J.L.* // in Los Alamos Report LA-3990, 1968.
15. *Izrailev F.M., Khasamutdinov A.I., and Chirikov B.V.* Numerical experiments on the statistical behaviour of dynamical systems with a few degrees of freedom // Comput. Phys. Commun. 1973. Vol. 5. P. 11.
16. *Ullmann K., Lichtenberg A.J., and Corso G.* Energy equipartition starting from high-frequency modes in the Fermi–Pasta–Ulam beta oscillator chain // Phys. Rev. E. 2000. Vol. 61. 2471; *De Luca J., Lichtenberg A.* Transitions and time scales to equipartition in oscillator chains: Low-frequency initial conditions // Phys. Rev. E. 2002. Vol. 66. 026206.
17. *Berchialla L., Giorgilli A. and Paleari S.* Exponentially long times to equipartition in the thermodynamic limit // Physics Letters A. 2004. Vol. 321. P. 147.
18. *Benettin G., Livi R., Ponno A.* The Fermi–Pasta–Ulam problem: Scaling laws vs. initial conditions // J. Stat. Phys. 2009. Vol. 135. P. 873.
19. *Giorgilli A., Paleari S., Penati T.* Local chaotic behaviour in the Fermi–Pasta–Ulam system // Discr. Cont. Dyn. Sys. B. 2005. Vol. 5. P. 991.
20. *Benettin G.* Time scale for energy equipartition in a two-dimensional FPU model//

Chaos. 2005. Vol. 15. 015108; *Benettin G. and Gradenigo G.* A study of the Fermi–Pasta–Ulam problem in dimension two // Chaos. 2008. Vol. 18. 013112.

21. *Flach S. and Willis C.R.* Discrete breathers// Phys. Rep. 1998. Vol. 295. P. 181.
22. *Lyapunov M.A.* The general problem of stability of motion. London: Taylor & Francis, 1992.
23. *Ivanchenko M.V. et al.* q-Breathers in finite two- and three-dimensional nonlinear acoustic lattices // Phys. Rev. Lett. 2006. Vol. 97. 025505.
24. *Mishagin K.G. et al.* q-Breathers is discrete nonlinear Schroedinger lattices // New J. Phys. 2008. Vol. 10. 073034; *Nguenang J.P., Pinto R.A., Flach S.* Quantum q-breathers in a finite Bose–Hubbard chain: The case of two interacting bosons // Phys. Rev. B. 2007. Vol. 75. 214303.
25. *Ivanchenko M.V.* q-Breathers and thermalization in acoustic chains with arbitrary nonlinearity index // Письма в ЖЭТФ. 2010. Vol. 92. P. 405.
26. *Christodoulidi H., Efthymiopoulos C., and Bountis T.* Energy localization on q-tori, long-term stability, and the interpretation of Fermi–Pasta–Ulam recurrences // Phys. Rev. E. 2010. 81. 016210.
27. *Penati T., Flach S.* Tail resonances of Fermi–Pasta–Ulam q-breathers and their impact on the pathway to equipartition // Chaos. 2007. Vol. 17. 023102.
28. *Ivanchenko M.V.* q-Breathers in finite lattices: nonlinearity and weak disorder // Phys. Rev. Lett. 2009. Vol. 102. 175507; *Ivanchenko M.V.* q-Breathers in discrete nonlinear schroedinger arrays with weak disorder // Письма в ЖЭТФ. 2009. Vol. 89, № 3. С. 170.
29. *Matsuda H., Ishii K.* Localization of normal modes and energy transport in disordered harmonic chain // Suppl. Prog. Theor. Phys. 1970. Vol. 45. P. 56.
30. *Lepri S., Livi R., and Politi A.* Thermal conduction in classical low-dimensional lattices // Phys. Rep. 2003. Vol. 377. P. 1; *Dhar A.* Heat transport in low-dimensional systems // Adv. Phys. 2008. Vol. 57. P. 457.
31. *Chang C.W. et al.* Breakdown of Fourier's law in nanotube thermal conductors // Phys. Rev. Lett. 2008. Vol. 101. 075903.
32. *Ivanchenko M.V. and Flach S.* Anomalous conductivity: impact of nonlinearity and disorder. 2010. arXiv:1009.3447v1

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского

Поступила в редакцию 29.10.2010

q-BREATHERS: FROM THE FERMI–PASTA–ULAM PARADOX TO ANOMALOUS CONDUCTIVITY

M.V. Ivanchenko

The paper reviews the modern problems of nonlinear physics, where q-breathers theory finds its applications.

Keywords: Nonlinear modes, energy localization, q-breathers.