Chapitre A

Breathers, Localisation et Equipartition de l'Energie

Nous avons étudié l'évolution vers l'équipartition de l'énergie dans le modèle de Fermi-Pasta-Ulam (FPU) en étudiant le mode de plus grande fréquence. Au dessus d'un seuil énergétique que nous avons calculé analytiquement, ce mode est instable par instabilité modulationnelle et donne naissance à un étonnant phénomène de localisation de l'énergie. Les excitations créées ainsi, de manière totalement spontanée, ressemblent beaucoup aux breathers mobiles exacts. Elles ont cependant une durée de vie finie et une dynamique chaotique. Ces breathers chaotiques sont également capables de rassembler l'énergie de manière très efficace et peuvent donc transporter de grandes quantités d'énergie.

Nous expliquons ces propriétés en analysant la dynamique des breathers exacts perturbés ; nous avons ainsi mis en évidence des relations fortes entre le spectre de Lyapunov des breathers chaotiques et le spectre de Floquet des breathers exacts. Nous avons aussi obtenu une expression analytique de l'exposant de Lyapunov maximal de ce système ; la méthode repose essentiellement sur le calcul des taux de croissance de l'instabilité modulationnelle. Enfin, nous montrons que le seuil de forte stochasticité est relié de manière très étroite à une transition dans l'espace tangent au niveau de la localisation des vecteurs propres de Lyapunov.

De nombreuses études théoriques et numériques ont été consacrées à la caractérisation du chaos dans les systèmes à très grand nombre de degrés de liberté. Il reste cependant de nombreuses inconnues comme, par exemple, la relation entre l'analyse des instabilités de Lyapunov et les propriétés de l'espace des phases telles que la diffusion, la relaxation vers les états d'équilibres, le développement spatial des instabilités,... Toutes ces questions sont encore vraiment ouvertes [1]. Le modèle de FPU [2] a joué, en théorie des systèmes dynamiques, un rôle similaire à celui joué par le modèle d'Ising en mécanique statistique : c'est l'équation modèle par excellence. Rappelons à ce titre quatre découvertes fondamentales faites à partir d'expériences numériques sur le modèle FPU : l'introduction du concept de soliton [3], la prédiction de la transition vers le chaos à grande échelle par un critère de recouvrement de résonances [4], l'utilisation de la théorie des perturbations de KAM et des estimations de stabilité à la Nekhoroshev [5] et, enfin, la mise en évidence numérique du seuil de forte stochasticité [6].

Dans le travail que nous présentons ici, nous étudions à nouveau l'équation de FPU ; elle est donc restée célèbre, principalement à cause de la découverte inattendue de *l'absence* de thermalisation dans un système non linéaire où toute l'énergie initiale est introduite dans un seul mode de Fourier, en l'occurrence celui de plus basse fréquence. Ici, nous nous intéressons au cas, négligé pour des raisons purement historiques, où l'énergie est mise dans le mode de plus grande fréquence (mode π). Nous verrons que cette nouvelle condition initiale conduit à une dynamique totalement différente.

Si l'on note $u_n(t)$ la position du $n^{\text{ième}}$ atome ($n \in \{1, \ldots, N\}$), les équations du mouvement de la chaîne de FPU généralisé sont

$$\ddot{u}_n = u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n + \beta \left[(u_{n+1} - u_n)^{2p+1} - (u_n - u_{n-1})^{2p+1} \right] , \tag{A.1}$$

où p est un entier supérieur à un et β une constante. Pour simplifier nous présenterons d'abord le cas $p = 1$ (i.e. le modèle FPU habituel), puis nous généraliserons pour n'importe quelle valeur de p.

A.1 Instabilité modulationnelle

La figure A.1 montre l'évolution typique d'un mode π perturbé de manière infinitésimale. Après un temps très court, une légère modulation apparaît dans le système (cf. Fig. A.1(b)) et le mode π est déstabilisé. Ensuite, la figure A.1(a) met en évidence qu'il ne subsiste que quelques paquets d'énergie, très localisés : ce sont des breathers puisqu'ils sont localisés spatialement et que leur amplitude est périodique en temps. A ce stade, comme les collisions inélastiques de ceux-ci ont tendance à favoriser de manière systématique les plus grands breathers aux dépens des plus petits [7], le nombre de ces objets localisés diminue et finalement une unique excitation localisée survit (cf. A.1(c)) : c'est cette excitation que nous avons appelée *breather chaotique*. Elle bouge le long du réseau avec un mouvement balistique perturbé ; elle est parfois ou réfléchie. Pendant ce mouvement, cette excitation collecte de l'énergie et son amplitude augmente. Il est important de noter que, non seulement le breather n'est jamais au repos, mais qu'en outre il se déplace avec presque toujours la même vitesse en valeur absolue. Enfin, après un temps très long et par un mécanisme complexe, le breather chaotique disparaît et le système atteint l'état d'équipartition illustré par la figure A.1(d). Le résultat le plus important que l'on découvre est donc que la dynamique du modèle semble favoriser l'apparition d'états localisés pendant l'état transitoire qui précède l'équipartition.

Les modes normaux linéaires de l'équation de FPU sont des ondes planes. On étudie de manière théorique l'instabilité modulationnelle d'une telle onde plane en introduisant des perturbations infinitésimales dans l'amplitude et dans la phase. En étudiant les équations linéarisées associées à l'enveloppe de l'onde porteuse, on obtient une unique équation du $4^{\text{ième}}$ ordre qui admet quatre solutions différentes lorsque l'on a fixé le nombre d'onde q de la porteuse, et le nombre d'onde Q de la perturbation. Si l'une des solutions est complexe, il y a donc instabilité de l'un des modes $(q \pm Q)$ avec un taux de croissance égal à la partie imaginaire de la solution. On peut donc obtenir le seuil d'instabilité de n'importe quelle onde plane.

On vérifie ainsi aisément que le mode zéro (i.e. $q = 0$) est toujours stable : il correspond à l'invariance par translation et est donc totalement découplé des autres. Pour le mode $q = \pi$, on s'aperçoit qu'il y a deux solutions réelles et deux imaginaires et l'on peut obtenir l'énergie critique E_c au dessus de laquelle ce mode devient instable. Un développement limité permet alors de retrouver le résultat obtenu dans la limite des grandes valeurs de N [8, 9, 10]. Au dessus de ce seuil, le mode π est donc instable et donne naissance à un breather chaotique dont la durée de vie est finie, et qui disparaît finalement pour conduire à l'équipartition d'énergie [11].

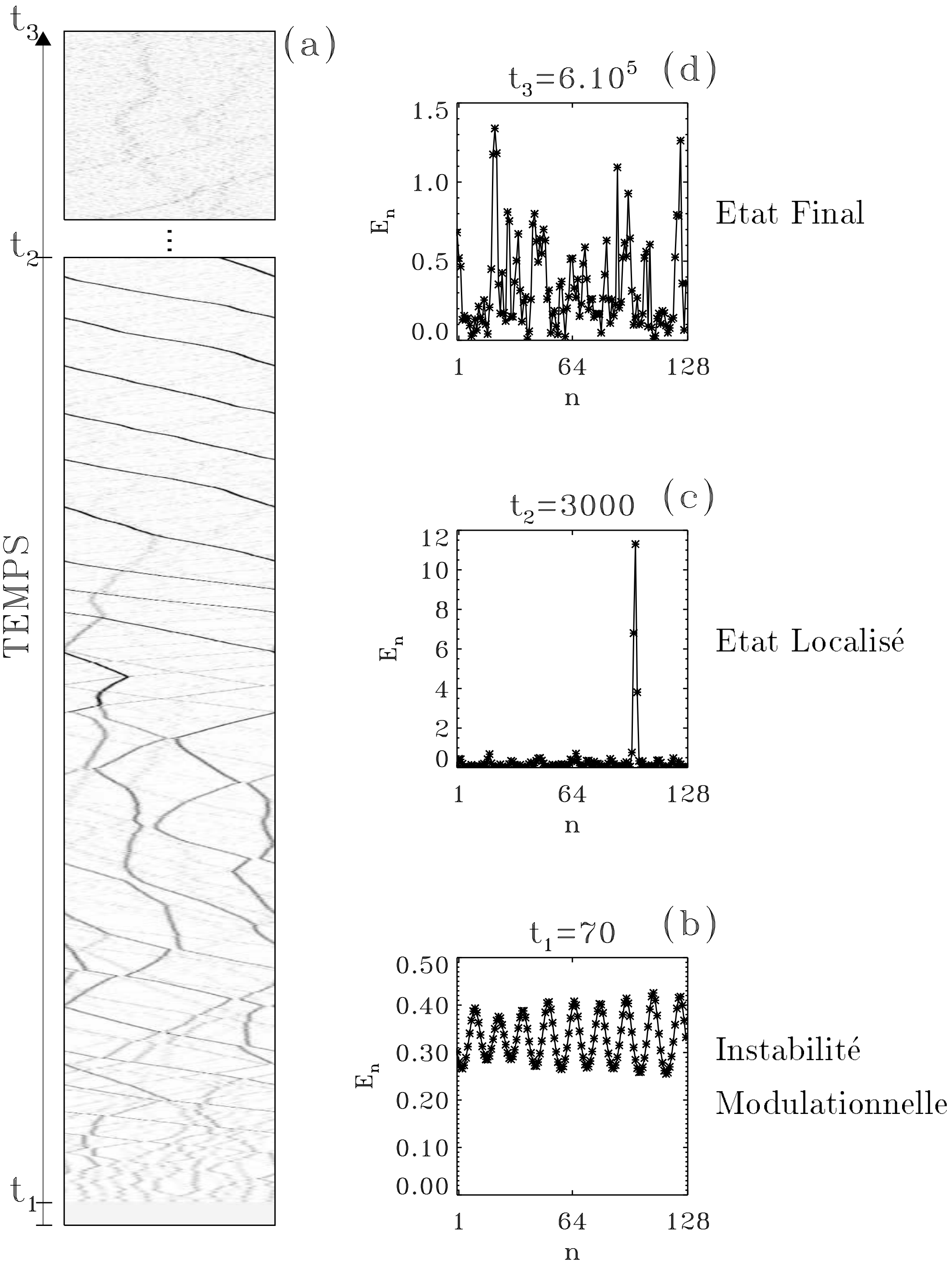

FIG. A.1 - *Evolution de l'énergie par site le long de la chaîne. Dans la figure (a), l'axe horizontal indique la position le long d'une chaîne de* $N = 128$ *particules alors que l'axe vertical indique le temps. L'échelle de gris va d'une énergie nulle (blanc) à la valeur maximale de l'énergie (noir). Le rectangle du bas correspond à l'évolution pour* $0 < t < 3000$ *alors que celui du haut correspond à* $5.994\ 10^5 < t < 6.10^5$. *Les figures (b), (c) et (d) montrent la répartition instantanée de l'énergie le long de la chaîne à trois instants différents.*

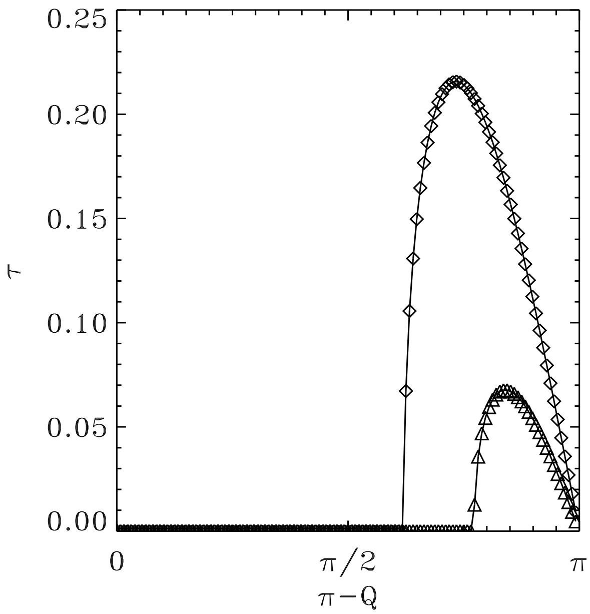

FIG. A.2 - *Allure du taux de croissance $\sigma(\pi, Q)$. Les losanges correspondent à une amplitude $a = 1$ alors que les triangles correspondent à $a = 0.5$.*

A.2 Taux de croissance et exposants de Lyapunov

Les taux de croissance pour le mode-π sont tracés pour deux amplitudes différentes dans la Fig. A.2. Lorsque l'amplitude (ou l'énergie) augmente, la région d'instabilité s'étend sur une gamme de nombre d'onde plus grande ; le mode le plus instable tend vers une valeur asymptotique qui ne dépend pas de la densité d'énergie, ce qui suggère que dans le régime des grandes énergies il n'existe plus qu'une échelle de temps ; nous discuterons ce point plus en détails par la suite.

Ces résultats peuvent être généralisés à n'importe quelle valeur de p. On montre ainsi que l'amplitude critique est proportionnelle à $N^{-1/p}$ dans le régime des longues chaînes. Ainsi, à N fixé, l'amplitude critique est une fonction croissante de la puissance p du potentiel avec pour valeur asymptotique 1/2. Dans la limite du potentiel dur ($p = \infty$), la densité d'énergie critique pour le mode-π est par conséquent finie. Ce n'est pas en contradiction avec le caractère intégrable d'un système unidimensionnel de sphères dures puisqu'ici, il existe aussi la contribution harmonique. Enfin, pour des valeurs de l'énergie suffisamment importantes, le taux de croissance se comporte comme $\varepsilon^{\frac{1}{2}-\frac{1}{2(p+1)}}$.

Présentons ici les idées de notre estimation analytique de l'exposant de Lyapunov le plus grand. Le système étant Hamiltonien, l'entropie de Kolmogorov-Sinai S_{KS} est égal à la somme de tous les exposants de Lyapunov positifs. Comme le spectre de Lyapunov est approximativement linéaire à haute énergie [12], on a $S_{KS} \simeq \lambda_1 \frac{N}{2}$. En faisant l'hypothèse cruciale que l'on peut identifier l'instabilité de Kolmogorov-Sinai avec la somme de tous les taux de croissance positifs, on obtient l'expression pour le Lyapunov maximal. La figure A.3 montre que cette expression est vérifiée de manière spectaculaire. Nous avons tracé dans la même figure

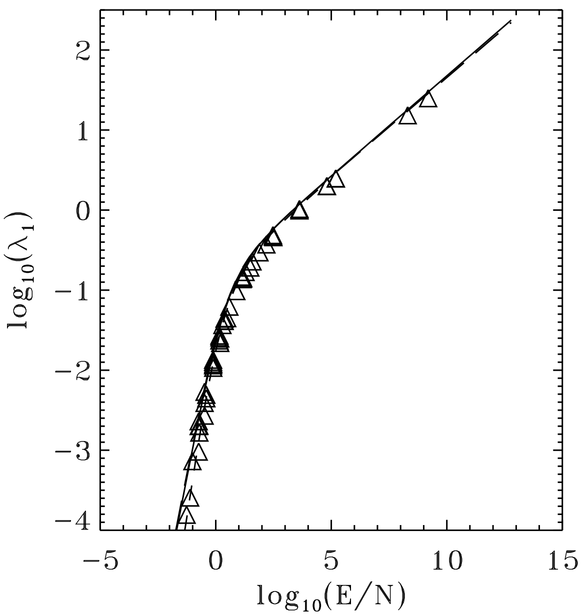

FIG. A.3 - *Comparaison entre l'estimation analytique et les résultat numériques de l'exposant de Lyapunov maximal. La ligne continue correspond à notre estimation, celle en pointillés à l'estimation de CLP et les triangles aux résultats numériques.*

les données obtenues par une méthode totalement différente par Casetti, Livi and Pettini (CLP) [13]. Les deux méthodes donnent des résultats quasiment identiques, si ce n'est dans le régime des très basses énergies. Les deux comportements asymptotiques linéaires sont séparés par une inflexion pour des valeurs intermédiaires de la densité d'énergie. Elle correspond à ce que l'on appelle le seuil de forte stochasticité [6] qui définit le passage du chaos faible au chaos fort (de telles transitions ont été récemment mises en évidence dans d'autres modèles [14]). Nous avons également montré que ce seuil correspond à un passage d'un état étendu à un état localisé dans l'espace tangent [15].

A.3 Limite des hautes énergies

Revenons sur le fait qu'à haute énergie, l'évolution temporelle du système est régulée essentiellement par une seule échelle de temps que l'on peut obtenir facilement par des arguments dimensionnels. Dans le régime des hautes énergies, l'énergie potentielle par particule varie comme u^{2p+2} , où u est la valeur typique de u_n, et de manière identique l'énergie cinétique par particule est de l'ordre de $\dot{u}^2$. En faisant une hypothèse de type viriel pour les énergies cinétique K et potentielle V (c'est correct pour le modèle de FPU d'après [16]), on a $V \sim K \sim \frac{N\varepsilon}{2}$ et on peut donc introduire l'échelle de temps caractéristique $\tau \sim \frac{u}{\dot{u}} \sim \varepsilon^{-\frac{1}{2}+\frac{1}{2(p+1)}}$. On retrouve donc assez facilement la loi d'échelle des taux de croissance et il est aussi tout à fait naturel de penser que cette loi d'échelle sera valable pour l'exposant de Lyapunov le plus grand. Effectivement, pour $p = 1$, λ_1 varie donc comme $\varepsilon^{1/4}$; ce raisonnement est également très bien vérifié [17] pour les valeurs supérieures de p. Une loi d'échelle différente avait été trouvée [18] à l'aide de l'approximation des matrices aléatoires [19], mais une hypothèse forte de décorrélation était violée. Toujours dans le cadre du modèle de FPU, nous avons trouvé une loi d'échelle identique pour l'inverse du temps d'équipartition [11] et Lepri a montré le même comportement du taux de décroissance des fonctions d'autocorrélation des modes de Fourier [20].

Il est aussi important de mettre en évidence que, dans la limite des potentiels de sphères dures ($p \to \infty$), on trouve λ_1 de l'ordre de $\varepsilon^{1/2}$. Dans le cas des potentiels répulsifs (i.e. qui divergent comme $(x-c)^{-q}$ lorsque $x \to c$ pour $q \geq 1$), nous proposons aussi que l'exposant de Lyapunov varie comme $\varepsilon^{1/2}$ dans le régime de grande densité d'énergie. C'est confirmé par les résultats numériques [14] présentés à propos de trois potentiels différents possédant une partie répulsive à courte distance.

Enfin, pour un gaz de sphères dures dans une boite tridimensionnelle, l'analogue de la densité d'énergie est la température T. Il est bien connu que, pour ce modèle, le temps caractéristique est le temps de collision d'Enskog τ_E qui, à densité constante, est proportionnel à $T^{-1/2}$.Ce résultat suggère que la loi d'échelle $\tau \sim \varepsilon^{-1/2}$ devrait être aussi vérifiée par un gaz de sphères dures à trois dimensions, comme le montrent certains résultats numériques récents [21].

A.4 Conclusions

Nous avons donc étudié non seulement les états transitoires près du seuil d'instabilité,pour lesquels nous avons mis en évidence le rôle joué par les breathers discrets, mais aussi les états asymptotiques où l'énergie est partagée de manière équitable entre les sites. Ces travaux sont présentés dans l'article (Cretegny, Dauxois, Ruffo & Torcini, *Physica D* **121**, 109 (1998)). Nous avons montré que le mécanisme de l'instabilité modulationnelle pour une onde plane est relié à l'instabilité de Lyapunov et que cette étude permet d'obtenir une formule quantitative pour l'exposant de Lyapunov le plus grand. Ces résultats sont présentés pour l'essentiel dans l'article (Dauxois, Ruffo & Torcini, *Physical Review E* **56**, R6229 (1997)). C'est un résultat encore quelque peu mystérieux, puisque ce mécanisme intervient pour des temps très courts alors que l'instabilité de Lyapunov est définie pour une moyenne sur des temps infinis. Une explication possible de ce mystère serait que les orbites périodiques instables que nous considérons donnent un bon échantillonnage de l'espace des phases.

Références

[1] A. J. Lichtenberg & M. A. Lieberman, *Regular and chaotic dynamics*, Springer, Berlin, Chapitre 6.5 (1992).

[2] J. Ford, The Fermi-Pasta-Ulam problem -Paradox turns discovery, *Physics Reports* **213**, 271-310 (1992).

[3] N. J. Zabusky & M. D. Kruskal, Interaction of solitons in a collisionless plasma and the recurrence of initial states, *Physical Review Letters* **15**, 240-243 (1965).

[4] F. M. Izrailev & B. V. Chirikov, Statistical properties of a nonlinear string, *Soviet Physics Doklady* **11**, 30-32 (1966).

[5] L. Galgani, A. Giorgilli, A. Martinoli & S. Vanzini, On the problem of energy equipartition for large systems of the Fermi-Pasta-Ulam type- analytical and numerical estimate, *Physica D* **59**, 334-348 (1992).

[6] R. Livi, M. Pettini, S. Ruffo, N. Sparpaglione & A. Vulpiani, Equipartition threshold in nonlinear large Hamiltonian systems : the Fermi-Pasta-Ulam model, *Physical Review A* **31**, 1039-1045 (1985).

[7] T. Dauxois & M. Peyrard, Energy localization in a nonlinear lattices, *Physical Review Letters* **70**, 3935-3939 (1993).

[8] P. Poggi & S. Ruffo, Exact solutions in the FPU oscillator chain, *Physica D* **103**, 251-272 (1997).

[9] G. P. Berman & A. R. Kolovskii, The limit of stochasticity for a one-dimensional chain of interacting oscillators, *Zhurnal Eksperimental' noi i Teoreticheskoi Fiziki* **87**, 1938-1947 (1984) [*Journal of Experimental and Theoretical Physics* **60**, 1116-1121 (1984)].

[10] S. Flach, Tangent bifurcation band edge plane waves, dynamical symmetry breaking and vibrational localization, *Physica D* **91**, 223-243 (1996).

[11] T. Cretegny, T. Dauxois, S. Ruffo & A. Torcini, Localization and equipartition of energy in the β-FPU chain : chaotic breathers, *Physica D* **121**, 109-126 (1998).

[12] R. Livi, A. Politi & S. Ruffo, Distribution of characteristic exponents in the thermodynamic limit, *Journal of Physics A* **19**, 2033-2040 (1986).

[13] L. Casetti, R. Livi & M. Pettini, Gaussian model for chaotic instability of Hamiltonian flows, *Physical Review Letters* **74**, 375-378 (1995).

[14] K. Yoshimura, Strong stochasticity threshold in some anharmonic lattices, *Physica D* **104**, 148-162 (1997).

[15] T. Dauxois, S. Ruffo & A. Torcini, Modulational estimate for the maximal Lyapunov exponent in Fermi-Pasta-Ulam chain, *Physical Review E* **56**, R6229-R6232 (1997).

[16] C. Alabiso, M. Casartelli & P. Marenzoni, Nearly separable behavior of FPU chains trough the stochasticity threshold, *Journal of Statistical Physics* **79**, 451-471 (1995).

[17] T. Dauxois, S. Ruffo & A. Torcini, *Analytical estimation of the maximal Lyapunov exponent in oscillator chains.* Journal de Physique IV **8**, Pr 6, 147-156 (1998).

[18] M. Pettini & M. Landolfi, Relaxation properties and ergodicity breaking in nonlinear Hamiltonian dynamics, *Physical Review A* **41**, 768-783 (1990).

[19] A. Crisanti, G. Paladin & A. Vulpiani, *Products of random matrices in statistical physics*, Springer, Berlin, 1993.

[20] S. Lepri, Relaxation of classical many-body Hamiltonians in one dimension, *Physical Review E* 58, 7165-7171 (1998).

[21] Ch. Dellago & H.A. Posch, Kolmogorov-Sinai entropy and Lyapunov spectra of a hard-sphere gas, *Physica A* **240**, 68-83 (1997).