

专题: 热传导及其相关交叉领域研究

一维长程相互作用 Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou 晶格体系热运输的研究进展*

熊大兴^{1)†} 李念北^{2)‡} 陈杰^{3)††}

1) (闽江大学物理与电子信息工程学院, 闽江理论物理协作中心, 福州 350108)

2) (华侨大学信息科学与工程学院物理系, 系统科学研究所, 厦门 361021)

3) (同济大学物理科学与工程学院, 声子学与热能科学中心, 中欧纳米声子学联合实验室,

先进微结构材料教育部重点实验室, 上海 200092)

(2025 年 12 月 31 日收到; 2026 年 1 月 31 日收到修改稿)

一维动量守恒非线性晶格体系的热运输通常呈现反常热传导, 即热导率随系统尺寸幂律发散, 傅里叶定律在严格一维极限下失效, 这些认识基本是在最近邻相互作用的晶格体系中获得的. 近年来, 一维长程相互作用晶格体系为低维系统运输提供了新的研究方向, 该体系在保持哈密顿动力学与动量守恒的情况下, 呈现出一系列“超出传统最近邻模型经验”的新奇现象, 如更强的反常导热 (发散指数可显著增大)、强长程区能流自关联的负关联、弱长程区出现接近扩散的准正常热传导窗口以及在特定交错长程耦合非可积模型中出现弹道热运输等. 本文基于近年来发表的代表性文献, 系统梳理一维长程相互作用 Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou (FPUT) 类晶格与相关长程模型在模型构造、主要数值发现与物理机制解释方面的研究进展.

关键词: 反常热传导, 离散呼吸子, 弹道运输, 长程相互作用**DOI:** 10.7498/aps.75.20251803**CSTR:** 32037.14.aps.75.20251803

1 引言

一维系统热运输是从微观哈密顿动力学理解宏观不可逆规律的经典例子. 对于最近邻非线性晶格体系, 理论与数值已表明: 若体系动量守恒, 则热导率 κ 通常随系统尺寸呈幂律 $\kappa \sim N^\alpha$ ($0 < \alpha < 1$) 发散, 呈现反常热传导; 而若动量不守恒 (如带外场或含格点势), 则回到满足傅里叶定律的正常热传导, 即 κ 在热力学极限下与系统尺寸无关. 这一图像在相关的综述文献中都有系统总结^[1-7], 已成为低维系统热运输的基本认识.

对这一统计物理基础问题的研究经历了很长的历程. 早在 1967 年 Rieder 等^[8] 就研究了两端加热源的一维可积简谐振子晶格的热运输问题, 并解析分析出体系的热流总为常数. 结合傅里叶定律, 这意味着热传导系数 κ 随系统尺寸 N 呈 $\kappa \sim N$ 增加. 这对应运输理论中的弹道运输, 表现为无相互作用声子弹道运输的物理 (另一个典型可积系统是 Toda 晶格^[9], 表现为不改变能量和动量的孤子动力学). 随后 1984 年, 经典和量子混沌的主要先驱学者 Casati 等^[10] 设计研究了一种具有混沌特征的一维晶格链模型, 发现了一维情形下的正常热运输, 因而指出体系具有不可积的混沌运动特征是导

* 国家自然科学基金 (批准号: 12275116, 12175074, 12475037) 和上海市科学技术委员会基金 (批准号: 24520711200) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: xmuxdx@163.com

‡ 通信作者. E-mail: nbli@hqu.edu.cn

†† 通信作者. E-mail: jie@tongji.edu.cn

致傅里叶定律成立的充分必要条件. 然而 13 年后的 1997 年, Lepri 等^[11] 却推翻了这一观点. 他们在考虑同样具有典型混沌特征的一维非线性 Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou- β (FPUT- β) 模型时发现了 $\kappa \sim N^\alpha$ 的超扩散输运. 这对应着声子在系统引入非线性后发生声子-声子相互作用, 而由于长波声子的异常缓慢衰减导致系统产生介于正常和弹道之间的超扩散输运. 1998 年, 胡斑比等^[12] 进一步设计研究了一类具有位势的 Frenkel-Kontorova 模型和 ϕ^4 模型, 明确动量守恒与否是低维体系遵从正常运输的一个关键因素.

实际上, 输运与系统守恒量的关系类似于 20 世纪 60—70 年代 Ernst 等^[13] 发展的经典涨落流体力学的预测. 研究者们注意到了这一联系, 于 2002 年基于流体力学重整化群方法从流体力学角度解释了 $\kappa \sim N^\alpha$ 的反常输运规律^[14]. 然而, 直到 2012 年和 2014 年, van Beijeren^[15] 和 Spohn^[16] 才分别建立了相应的非线性涨落流体力学应用于预测一维晶格体系热输运规律. 主要思想是关注满足超扩散输运系统一般具有的动量、粒子密度 (伸长量)、能量三个守恒量; 由这些守恒量的时空关联函数正则变换出流体力学模的关联矩阵; 这些关联矩阵给出具体细致的输运信息. 破坏动量 (伸长量) 守恒则使能量为唯一的守恒量而导致系统呈现正常输运 (转子模型^[17,18] 是这方面的例子). 新近几年, Doyon 等^[19] 正进一步发展被称为广义流体力学理论, 试图理解拥有无穷多个守恒量的可积系统的弹道输运.

流体力学理论的巨大成功使研究者们常常忽略了输运理论中的动理学效应 (参考 Bogoliubov 1946 年提出的三段论^[6]). 近期, 受到输运理论中经典热化问题^[20-24] 研究的一些新进展启发, 赵鸿教授研究组^[5,25] 和意大利 Lepri 和 Livi 研究组^[26] 相继提出完整的一维晶格能量输运图像需同时考虑动理学和流体力学过程. 结合近期在一维自旋链热输运方面的进展^[27-29], 这些结果进一步加深了人们对一维晶格能量输运理论的认识.

另一方面, 长程相互作用体系一直以来都是统计物理与非平衡动力学的研究热点, 其对象横跨从引力主导的天体系统到纳米尺度材料与介观结构等多种尺度. 物理学家研究的长程体系的一般特征是相互作用势随粒子间距 r 按幂律衰减:

$$V(r) \propto 1/r^\sigma, \quad (1)$$

其中 σ 是长程衰减指数. 由此带来与最近邻和短程体系显著不同的热力学与动力学性质, 如非遍历性、弱混沌、系综不等价、长寿命非高斯态、一维相变、非凹熵乃至负比热等现象^[30-35], 这些都对经典玻尔兹曼-吉布斯统计框架提出了挑战, 并促使人们发展更一般的长程非平衡统计理论.

然而, 尽管人们直觉上期待相互作用范围会显著影响热输运, 过去相当长时间内人们对热输运的主流理论认识仍主要建立在最近邻短程耦合的晶格模型上. 直到近些年, 长程相互作用晶格体系的热输运才开始被系统研究. 长程相互作用晶格体系的热输运的研究难点在于: 当相互作用不再局限最近邻和短程, 而扩展为随距离幂律衰减的非局域耦合时, 从动力学层面来讲, 这种非局域耦合会改变系统的声子色散, 从而呈现非线性散射通道与长时记忆结构, 使传统基于局域守恒量 (律) 发展起来的最近邻短程体系热输运的认识可能需要修正; 从方法层面来讲, 在非平衡稳态模拟中, 长程耦合会引入边界条件与热流定义的困难, 从而影响对体系内禀输运规律的判断. 针对后者, 有研究者提出周期性边界条件+反扰动非平衡分子动力学方法以克服这一困难, 并据此揭示了一维长程相互作用 FPUT 晶格的较于传统固定边界条件下研究的更接近实际的热输运特性^[36].

实际上, 在这一新的研究热点上, 已有类似于短程体系的多种一维长程相互作用晶格模型被研究, 包括长程转子链、长程 FPUT 链、长程 ϕ^4 链以及长程简谐链等^[36-50]. 需要强调的是, 这些模型中相当一部分仍保持动量守恒, 因此它们对“动量守恒必然导致反常热传导”的传统认识提供了更一般的检验平台.

以长程转子链为例, 已有工作指出其随长程衰减指数 σ 的改变, 系统可出现由绝热相到导热相的转变^[37]. 更有趣的是, 在强长程情形 ($0 < \sigma < 1$), 系统可呈现近乎平坦的温度分布, 表观上类似于可积系统的行为, 但后续分析表明这更可能来自一种并联式能量传输机制而非真正的可积性^[40].

更为引人注目的是长程 FPUT 体系, 该方向一个被反复讨论的关键点发生在 $\sigma = 2$. 2017 年, Bagchi^[38] 研究表明, 此处热导率随尺寸呈近线性增长、温度分布近乎平坦, 显示出类弹道输运的特

征,甚至引出“是否存在隐藏可积极限”的猜想.但随后更细致的边界/热浴分析给出了不同的结论:该系统是一个显然的非可积体系,所呈现的仍然是超扩散热输运^[36].后者的结论被更多的证据所支持,如更慢的能流关联衰减、较弱的非可积性表征以及在 $\sigma = 2$ 时特定的载流子——“移动呼吸子”的涌现对热输运的增强作用.围绕长程 FPUT 体系在 $\sigma = 2$ 时的争议恰恰说明,长程相互作用的晶格体系的热输运可能与传统最近邻晶格体系有很大的不同.

在这一背景下,本文围绕一维长程相互作用 FPUT 晶格体系,系统梳理如下若干比较有特色的新发现:

- 1) 在特定长程衰减指数 ($\sigma = 2$) 下所呈现的弱非可积性以及反常热传导显著增强,该现象与系统的移动呼吸子动力学相关;
- 2) 在哈密顿平均场体系中观察到的能量亚扩散和能流自关联函数的负关联;
- 3) 在强长程区 ($0 < \sigma \leq 1$), 能流自关联呈现复杂负关联结构,且随 σ 非单调变化,并在 $\sigma_c = 0.5$ 处发生显著转变;
- 4) 在弱长程区 ($1 < \sigma \leq 3$) 出现“接近正常扩散”的正常热输运窗口 (在 $\sigma_c = 1.25$ 附近);
- 5) 在一种交错长程反比耦合的非可积经典长程 FPUT 系统中可观察到弹道热输运的所有特征,表明对于长程晶格体系,非可积系统仍然能够呈现在短程最近邻体系中只有在可积系统中呈现的弹道热输运.

2 模型和数值研究方法

本文主要关注一维长程相互作用的 FPUT 晶格体系,其哈密顿量表示为

$$H = \sum_{i=1}^N \left[\frac{p_i^2}{2} + \frac{1}{2}(x_{i+1} - x_i)^2 + \frac{1}{4} \sum_{r=1}^{N/2-1} \frac{(x_{i+r} - x_i)^4}{r^\sigma} \right]. \quad (2)$$

这里运用了固体物理中的 Born-von Karman 周期性边界条件.哈密顿量里的 x_i 和 p_i 分别为体系标号为 i 的粒子离开平衡位置的位移和动量; N 为粒子数,原子质量和晶格常数按照惯例无量纲化设置为1,这样 N 也代表系统的尺寸.这样的体系有三个特征:1) 无外场和外势,这样系统的总动

量守恒,按照传统短程最近邻体系的认识通常预期出现反常热传导;2) 系统的简谐项仍是最近邻,这表明线性谱仍短程,低频声学模结构不被直接长程化;3) 长程相互作用体现在四次非简谐项,能有效改变散射核和能量散射通道.

需要强调的是,四次非谐项在正则模(声子)表象中对应四波相互作用,在晶体声子玻尔兹曼输运方程语境下即对应四声子散射所依赖的四阶力常数;因此,本文讨论的“长程四次非谐耦合改变散射通道”,在机制层面可与近年第一性原理研究中“四声子散射主导/与应变调控相关的散射机制转变”形成自然对照^[51,52].在这一理论框架下,文献^[53]证明,在该哈密顿的 $\sigma = 2$ 体系,四次非谐项在傅里叶空间表象下,由于四声子的散射过程,存在着某种势函数的对称性,这一对称性导致 $\sigma = 2$ 体系可以激发出没有尾巴的移动呼吸子,从而导致 $\sigma = 2$ 体系的特殊性,这一特性或许会对体系的输运行为产生重要影响.

另外,在现有的工作中, FPUT 体系的长程性主要通过两类方式施加:在哈密顿中仅四次非谐项为长程,以及二次与四次项均为长程.同时,许多工作还会引入 Kac 缩放因子^[33]以保证系统哈密顿量的广延性.本文主要关注仅四次非谐项为长程和不加 Kac 缩放因子的体系,原因是我们希望系统的低频声学模结构不被长程化.同时, Kac 因子会让声子群速度与非线性强度依赖于系统尺寸,这对热输运中研究热导率与尺寸的依赖关系这一问题并不理想;并且加入 Kac 因子还会使得系统达到平衡的时间尺度被显著拉长.

对于长程相互作用体系的热输运研究,目前还没有有效的理论分析手段,因此数值计算在这里扮演着重要的角色.可喜的是,大部分传统的用于数值研究短程最近邻体系的方法依然适用.在这里我们将详细阐述这些方法对于研究长程相互作用体系的优缺点.

1) 非平衡分子动力学方法 (NEMD)^[1,2].该方法通过两端接触不同温度的热浴,经过较长时间,形成稳态热流 J ,进而通过傅里叶定律 $\kappa(N) = J/\nabla T$ (∇T 为温度梯度考察 $\kappa \sim N^\alpha$)来得到发散指数 α .利用该方法的难点在于其一般需要采用固定边界条件.然而,引入固定边界条件可能会对长程体系的热输运行为产生不可忽略的影响,从而无法得到系统内禀的热输运行为.

2) Green-Kubo 公式法^[1,2]. 该方法通过在平衡态计算能流的自关联函数:

$$C_{JJ}(t) = \langle J_{\text{tot}}(t)J_{\text{tot}}(0) \rangle, \quad (3)$$

这一关联函数的长时尾现象与系统输运行为密切相关. 然而, 在长程体系中, 热流的表达式往往包含显式的长程贡献, 这给计算上造成较大的困难, 使得研究的长程体系的系统尺寸本身无法如短程最近邻体系中那么大. 具体来说, 在长程相互作用晶格中, 热流(能流)的显式表达式不仅包含跨越远距离的成对传输项, 还涉及势能在格点间的划分方式, 因此在不同边界条件的数值实现上, 不同文献可能采用不同热流表达式, 这些表达式在形式上是等价或近似等价的. 在有限系统与有限时间窗下, 这种差异可能会改变 $C_{JJ}(t)$ 的长时行为、甚至导致由 $\kappa \sim N^\alpha$ 外推得到的 α 的定量解读出现偏差. 为降低此类偏差, 可以将 Green-Kubo 的 $C_{JJ}(t)$ 长时行为和非平衡 $\kappa(N)$ 的发散行为以及下面方法 3) 中的热能密度涨落的时空关联函数标度方法的标度特性进行同时对照检验, 这也是一种较好地探究体系输运性质的一致性检验.

3) 热能密度涨落的时空关联函数标度方法^[54]. 该方法通过计算热(或能量)密度涨落的时空关联函数:

$$\rho_Q(m, t) = \frac{\langle \Delta Q_{l+m}(t) \Delta Q_l(0) \rangle}{\langle \Delta Q_l(0) \Delta Q_l(0) \rangle}, \quad (4)$$

式中, $\langle \cdot \rangle$ 代表系综平均; $Q_l(t) = E_l(t) - [(\langle E \rangle + \langle F \rangle)g_l(t)]/\langle g \rangle$ 代表系统在某个粗粒化空间 l 格子里的热能密度, 取值和体系在同一个格子里同一个时间 t 下的能量 $E_l(t)$ 、粒子数 $g_l(t)$ 和受力 $F_l(t)$ 相关. 通过数值计算得到 $\rho_Q(m, t)$ 后, 分析其标度行

为(如 Lévy 型或非高斯长尾等), 就可以区分不同的热扩散行为并识别相应的普适类. 这种方法被认为是分析热输运行为较为精细的时空标度分析.

此外, 在数值模拟长程体系时, 最大的难点还是在数值积分中长程力的计算复杂度. 所幸的是, 现今已发展出一维长程相互作用晶格体系的快速傅里叶变换, 可以有效地加速积分中算力的进程. 部分研究为规避传统非平衡分子动力学方法在长程体系中采用两端加热浴时, 存在的产生边界条件和热流定义难题, 提出了“反扰动非平衡分子动力学方法(RNEMD)”^[36]. 该方法的核心思想是: 与直接诱导温度梯度的传统方法不同, 该方法通过频繁交换粒子的动能(或动量)来施加热流. 当达到非平衡稳态时, 温度梯度就会建立. 这种“反转”使得这一方法成为研究长程相互作用系统热输运的理想选择. 我们还注意到, 这种方法的 VASP 和 LAMMPS 代码已被广泛使用. 这一方法的优越性在于: 它是天然的在周期性边界条件下发展出来的进行热传导研究的分子动力学方法, 能够有效避开固定边界条件下的有限尺寸效应; 同时在此研究方法中, 热流的定义和获得是自然产生的, 因此也很适合用来研究长程相互作用系统热输运问题.

最后, 本文将研究长程 FPUT 体系热输运的常用数值方法, 不同方法间的对比简要总结于表 1 中. 另外需要说明的是, 本文所综述的多数数值结果是在固定平均温度(大部分取 $T = 0.5$)与给定非线性强度参数下获得的. 鉴于在短程 FPUT 链中输运指数 α 可能随温度(能量密度)变化, 长程 FPUT 体系中温度 T 与非线性强度对体系输运现象的影响是进一步的研究方向, 并没有在本综述中提及.

表 1 研究长程 FPUT 体系热输运的常用数值方法对比(精度、效率与系统尺寸限制)

Table 1. Comparison of commonly used numerical methods for investigating thermal transport in long-range FPUT systems (accuracy, efficiency, and system-size limitations).

方法	关键输出	优点(长程体系)	主要风险/偏差来源	计算代价与尺寸限制
两端热浴 NEMD (固定边界)	$J, \nabla T, \kappa(N)$	直观; 直接得 $\kappa(N)$ 标度	边界层厚; 热浴/热流定义敏感; 小 N 易“类弹道”	$O(N^2)$; FFT 可到 $O(N \log N)$; 达稳态慢
RNEMD/反扰动(周期边界)	施加热流(交换动能)得 $\nabla T, \kappa(N)$	体区更干净; 减弱端点伪像; 较稳健	交换参数引入交叉; 统计噪声需长平均	同受长程力限制; 常需长时间平均与较大 N
Green-Kubo (平衡态)	$C_{JJ}(t), \kappa \propto \int C_{JJ}$	无热浴边界; 可判长时尾/变号/反持续	热流表达式复杂且有实现差异; 长时尾截断敏感	需长轨迹与多样本; 慢尾时收敛代价高
时空关联 (ρ_Q, MSD)	形态(高斯/重尾)、MSD 指数 β	直观识别扩散形式; 对热流形式较不敏感	需避免回卷/触边; 指数拟合有交叉漂移	代价同受长程力限制; 形态较易稳, 精确指数需大 N

3 代表性结果梳理

3.1 $\sigma = 2$ 的热输运疑团: 弹道 vs. 反常

在研究一维长程 FPUT 体系热输运时, 最初特别令人感兴趣的点是 $\sigma = 2$ 的情形. 利用非平衡分子动力学方法, Bagchi^[38] 最早于 2017 年发现在 $\sigma = 2$ 时, 长程 FPUT 体系会呈现接近于传统只有在可积系统中才会发生的弹道热输运行为. 支持这一发现最直观的证据是在该参数下, 体系的 κ 随系统的尺寸呈线性增长, 同时温度分布呈现除了热源两端外变为平坦. 随后, Iubini 等^[40] 考虑到长程体系的特殊性, 同样利用非平衡分子动力学方法, 但施加热浴的方法与 Bagchi 略有不同, 同时还细致区分了系统内禀的能量和由热源驱动的能量, 基本证实了 Bagchi 观察到的类弹道热输运行为. 这些观测引发了人们对 $\sigma = 2$ 的长程 FPUT 体系是否存在“隐藏可积极限”的猜想.

基于非可积系统不可能出现弹道运输的先验认识, Wang 等^[36] 在研究长程 FPUT 链时指出, 在利用传统的非平衡分子动力学方法时, 长程体系的非平衡稳态驱动受到两大因素强烈影响: 1) 边界条件与热浴耦合方式; 2) 热流定义. 为尽可能提取体系的“更接近实际的运输”, Wang 等采用了反扰动型热浴 (即 RNEMD) 来构造稳态驱动, 从而避免常规热浴方案在长程耦合下可能产生的强边界伪像. 在该设置下, 他们在 $\sigma = 2$ 时给出了热导率对尺寸的幂律发散 $\kappa \sim N^\alpha$, 并得到显著偏大的发散指数 $\alpha \approx 0.71$ (见图 1), 表明体系处于一种强超扩散的运输状态, 明显强于短程最近邻链中常见的反常程度, 但仍未达到严格弹道 ($\alpha = 1$) 的极限. 图 2 中呈现的明显的非平坦温度梯度分布也支持这一发现.

这一结果的重要性在于: 它表明长程相互作用并非只是把短程反常导热的指数做微调, 而是可能把体系推入一个新的标度区间, 从而在同样具有动量守恒特征的哈密顿动力学下可以获得更强的热传导发散指数.

在背后的微观机制方面, 反常热传导一般意味着微观热的载流子遵循反常能量/热的扩散, 这体现在热能密度涨落的时空关联函数 $\rho_Q(m, t)$ 符合反常运输的时空标度特性, 即

$$t^{1/\gamma} \rho(m, t) \approx \rho(t^{-1/\gamma} m, t). \quad (5)$$

文献^[36] 进一步研究了 $\rho_Q(m, t)$ 及其标度特性 (见图 3), 发现了一种中间存在持续平台的新的分布函数, 并给出了时空标度特性指数 $\gamma \approx 1.29$ ($1/\gamma = 0.78$). 有趣的是, 根据 Lévy 行走理论^[55] 中联系 α 和 γ 的公式 $\alpha = 2 - \gamma$, 恰好可以得到 $\alpha = 0.71$, 这符合反常热传导, 意味着反常扩散的基本认识.

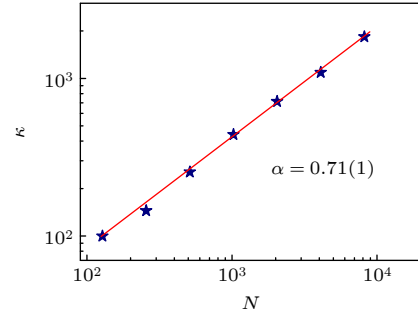


图 1 $\sigma = 2$ 体系的热导率 κ 随尺寸 N 的变化 (系统的平均温度为 $T = 0.5$, 下同)

Fig. 1. The dependence of heat conductivity κ on system size N in the case of $\sigma = 2$ (the average temperature here is $T = 0.5$, the same below).

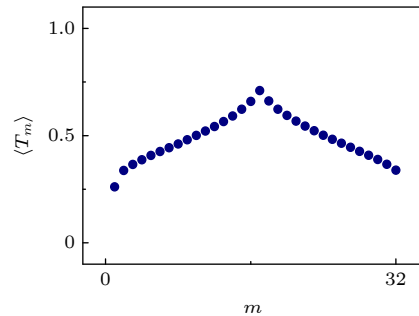


图 2 $\sigma = 2$ 体系的温度分布

Fig. 2. The temperature profile of the $\sigma = 2$ system.

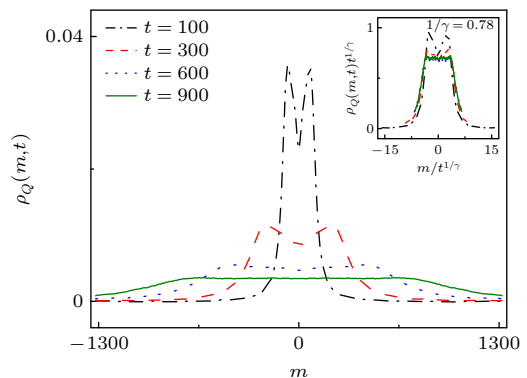


图 3 $\sigma = 2$ 体系在不同时间下的 $\rho_Q(m, t)$, 插图给出其标度行为

Fig. 3. The $\rho_Q(m, t)$ of the $\sigma = 2$ system at different times, the inset shows its scaling behavior.

文献 [36] 中把这一新颖的反常热输运行为归结于系统弱的非可积性和微观上独特的移动呼吸子动力学. 在弱的非可积性方面, 是基于 $\sigma = 2$ 的发散指数 $\alpha \approx 0.7$ 介于传统短程最近邻体系的 $\alpha = 0.3-0.5$ 与弹道热输运 $\alpha = 1$ 之间. 从非线性动力学角度, 非可积性一般由体系的最大李雅普诺夫指数 λ_{\max} 来确定. 图 4 的最大李雅普诺夫指数分析的验证了 $\sigma = 2$ 体系的非可积性介乎一个可积 Toda 系统 ($\lambda_{\max} = 0$) 和一个完全不可积的近短程体系 ($\sigma = 8$) 之间.

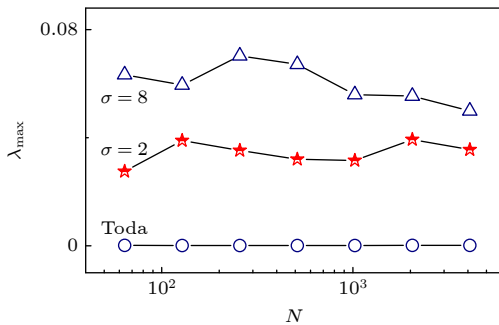


图 4 在不同系统尺寸 N 下 Toda, $\sigma = 2, 8$ 系统的 λ_{\max}
 Fig. 4. λ_{\max} versus system size N for Toda chain, $\sigma = 2, 8$ systems.

Wang 等 [36] 认为这种弱的非可积性与体系中独特的移动呼吸子微观动力学紧密相关. 事实上, 2016 年 Doi 和 Yoshimura [53] 的工作表明, $\sigma = 2$ 的长程 FPUT 体系会在零温下激发出没有尾巴的移动呼吸子, 这是传统短程体系中没有看到的新现象. 为了观测这种移动呼吸子在有限温度下是否依然存在, 他们通过展示体系在有限温度的平衡稳态下的能量时空图的方法 [56], 发现这种在零温下被理论证明的移动呼吸子, 在有限温度下虽遭受系统热涨落的扰动, 但还能长时间保持一定的鲁棒性, 也进一步证实了 $\sigma = 2$ 的特殊性.

综上, 围绕长程 FPUT 体系的 $\sigma = 2$ 情形, 当前学界逐渐形成的主要共识是: $\sigma = 2$ 确实为一个显著的增强输运特征点, 其热传导强度明显高于短程最近邻链的常见反常程度, 但是否达到严格弹道极限需要谨慎界定. 同时, 长程耦合下非平衡稳态对边界条件/热浴耦合方式与热流定义具有更强的敏感性, 因此“温度分布近乎平坦”和“ κ 随 N 近线性增长”等现象并不足以作为弹道输运的充分证据. 在机制层面, 已有工作 [36] 倾向于将 $\sigma = 2$ 的特殊性归因于体系的弱非可积性, 以及与之相伴的移动呼吸子等特殊载流结构对能量传输的增强作用,

而非真正的隐藏可积性. 另一方面, 仍存在的分歧集中在 $\sigma = 2$ 的渐近热输运究竟更接近弹道 ($\alpha = 1$) 还是强超扩散 ($\alpha \approx 0.7$), 以及不同数值方案给出差异的来源. 因此, 可能要用跨方法一致性判据来界定体系更接近实际的渐近输运行为: 若 $\kappa(N)$ 的发散行为、 $\rho_Q(m, t)$ 的标度指数以及 $C_{JJ}(t)$ 的长时间衰减在同一周期边界条件等参数下相互吻合, 并且对驱动/边界实现不敏感, 则可将其视为体性质的渐近标度; 反之, 若仅依赖温度剖面平坦或 $\kappa(N)$ 表观线性增长 (如文献 [38] 的结果), 而缺乏其他一致性证据, 则需谨慎对待并将其归因于强边界敏感性.

3.2 $\sigma = 0$ 的亚扩散热输运

亚扩散运动与正常扩散不同, 它的平均平方位移 (MSD) 在时间上并不呈线性增长, 而是按照 t^β 的规律标度, 其中 $\beta < 1$. 这种显著缓慢的扩散运动存在于许多复杂系统中, 然而大部分都只关注于粒子的运动、能量输运类型中的亚扩散及其对应的基本物理机制, 但从更加物理的层面, 是什么导致了能量亚扩散现象, 以及多体哈密顿系统中能量亚扩散特征是如何产生的仍然是一个挑战性的课题.

由于庞加莱回归时间的有限性 [57], 一般认为在无序的情况下, 常规哈密顿系统无法实现亚扩散运动, 因此关于哈密顿系统中亚扩散能量输运的例子比较罕见. 第一个令人信服的例子是在一个非常特殊配置的球台通道模型中展示出 β 值为 0.86 的热输运 [58,59], 然而这与由声子 (即集体激发模式或准粒子) 为主要角色的多体晶格哈密顿系统还有很大的不同. 在短程最近邻晶格体系中, 2025 年才新发现强非线性下破坏动量守恒的 ϕ^4 系统可以展现能量的亚扩散输运 [60]. 可喜的是, 2017 年 Bagchi [39] 在一维哈密顿平均场的长程转子模型中给出了亚扩散输运的迹象. 然而同样在 2017 年 Bagchi 的另外一篇文献中 [38], 在长程的 FPUT 模型的哈密顿平均场情形 ($\sigma = 0$) 下却给出了依旧超扩散输运的数值结果. 这一争议使得 Xiong 和 Wang 两位研究者 [44] 仔细检验了长程 FPUT 体系在 $\sigma = 0$ 的热输运. 他们发现, 有别于 Bagchi 用非平衡分子动力学方法研究的工作 [38], $\sigma = 0$ 的长程 FPUT 体系和哈密顿平均场的长程转子模型类似, 也呈现能量的亚扩散. 这体现在能量密度涨落时空关联函数呈现局域分布函数, 且它的均方位移随

时间的变化表现出明显的 $\beta < 1$ 的特征 (见图 5).

更有趣的是关于能流自关联函数随时间的变化规律 (见图 6). Xiong 和 Wang^[44] 首次观察到了一般的在粒子亚扩散中看到的类似的能流自关联函数负关联效应 (在粒子亚扩散中, 对应于粒子速度的自关联函数的负关联性). 在学界, 这种负关联效应也叫反持续 (antipersistent) 关联. 事实上, 亚扩散能量输运意味着 κ 在热力学极限下应该趋近于零, 表明系统是一个导热绝缘体. 为了支持这一点, 在数学上, $C_{JJ}(t)$ 必须至少改变一次符号以使 Green-Kubo 积分消失. 从物理角度来看, 在粒子亚扩散模型框架下, 这一现象意味着反持续特性, 即正向热流能量传递周期通常紧随负向电流能量传递周期之后. 因此, 这种反持续关联在能量亚输运的新发现说明, 引入长程相互作用后, 多体非线性哈密顿体系可以展现出如单粒子扩散同样丰富的物理图像.

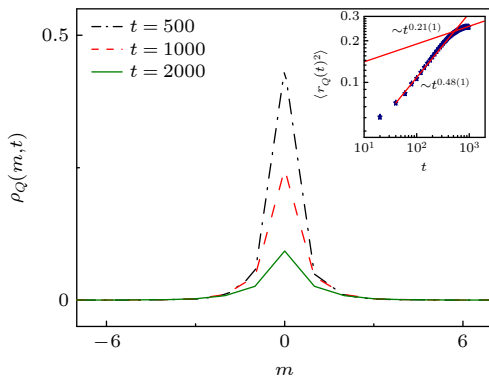


图 5 $\sigma = 0$ 体系在不同时间下的 $\rho_Q(m, t)$, 插图给出其均方位移随时间的变化

Fig. 5. The $\rho_Q(m, t)$ of the $\sigma = 0$ system at different times, the inset shows the relationship between the mean square displacement and time.

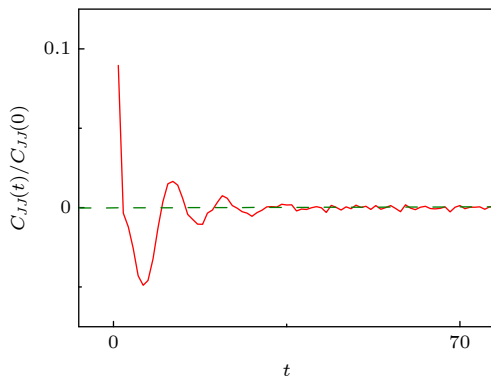


图 6 $\sigma = 0$ 体系的能流自关联函数

Fig. 6. The energy flux auto-correlation function of the $\sigma = 0$ system.

然而, 需要强调的是, 这里讨论的反持续负关联首先是一个数值上可观测的相关结构. 在许多亚扩散 (或有效热导随尺度趋于饱和/衰减) 的情形下, 若以标准 Green-Kubo 形式理解其热力学极限, $C_{JJ}(t)$ 往往需要出现一定的符号结构 (例如由正相关转为负相关) 以导致积分的有效抵消或收敛; 但在有限系统、有限时间截断, 以及不同热流定义/边界条件下, 该关系并不宜被表述为严格的充分或必要条件. 因此, 本文将负关联视为亚扩散输运的重要伴随特征之一, 并强调仍需结合 $\rho_Q(m, t)$ 的局域化形态及其 MSD 指数 $\beta < 1$ 等指标作交叉判定.

为了证实这种能流负关联的亚扩散能量输运特性的确跟系统的长程性相关, 该文献 [44] 还进一步研究了长程相互作用范围被截断的模型的 $C_{JJ}(t)$ 变化规律, 发现当系统的长程特性不足以支持能量亚扩散输运时, 负关联会消失, 而退化为原来在超扩散输运中看到的长时尾现象 (见图 7).

3.3 强长程区域 ($0 < \sigma < 1$) 的非单调热输运

2017 年, Bagchi^[38] 较细致地数值研究了长程 FPUT 体系发散指数 α 随 σ 的变化. 除了发现 $\sigma = 2$ 的特殊性外, 研究还表明对于所有其他的 σ , 都会呈现出最近邻耦合情形下的超扩散热输运. 特别地, 如 3.2 节所述, 他在 $\sigma = 0$ 时也观察到超扩散输运, 而 Xiong 和 Wang 的工作 [44] 却表明 $\sigma = 0$ 其实对应的是亚扩散能量输运. 这种不一致性使得很有必要细致研究热输运随 σ 的变化规律. 为此, Xiong 和 Wang^[44] 利用平衡态计算能流的自关联函数方法详细给出了在强长程区域 ($0 < \sigma < 1$) 的 $C_{JJ}(t)$, 结果发现, 随着 σ 的增加, $C_{JJ}(t)$ 发生了一个非单调变化, 即对于 $0 \leq \sigma \leq 0.8$, 在 $C_{JJ}(t)$ 始终存在反持续负关联的情况下, $C_{JJ}(t)$ 负的最小值首先变得更小, 并且在 $\sigma_c = 0.5$ 时达到最小值, 然后开始增加; 大约在 $\sigma = 0.8$ 时, $C_{JJ}(t)$ 呈现出最终类似指数衰减形式, 表明不存在反持续负关联 (见图 8).

值得评论的是, 这种 $C_{JJ}(t)$ 非单调变化所揭示的从存在到不存在反持续负关联是一个新颖而有趣的现象, 与通过截断体系长程相互作用的方式所揭示的反持续负关联有很大不同. 在粒子亚扩散模型中从未探索过速度的反持续负关联如此变化, 因此它可能为进一步研究粒子亚扩散提供新思路.

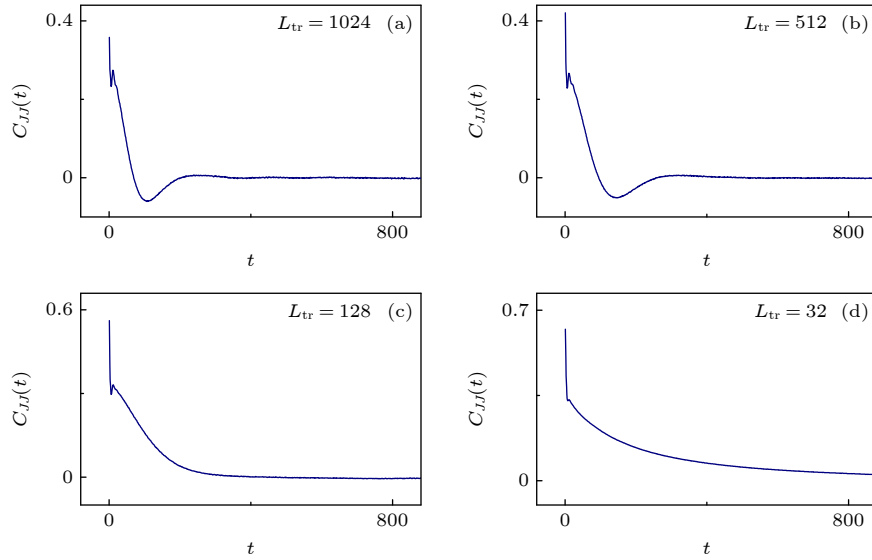


图 7 长程相互作用范围被截断的 $\sigma = 0$ 体系的能流自关联函数, L_{tr} 代表实际的长程作用长度

Fig. 7. The energy flux auto-correlation function of the $\sigma = 0$ system with the long-range interaction range truncated, where L_{tr} represents the actual long-range interaction length.

最后需要强调的是, 这些反持续能流关联结构是强长程区域一个非常醒目的数值特征. 在许多已知的亚扩散动力学框架中, 负关联往往与慢运输/回流效应相伴出现, 因此它可以被视为指示亚扩散倾向的重要伴随现象之一. 但更稳妥的做法是避免将其视为严格的充分或必要条件. 基于此, 该区间对“亚扩散”的判断还需基于 $\rho_Q(m, t)$ 的局域化形态及其 MSD 指数等直接运输指标.

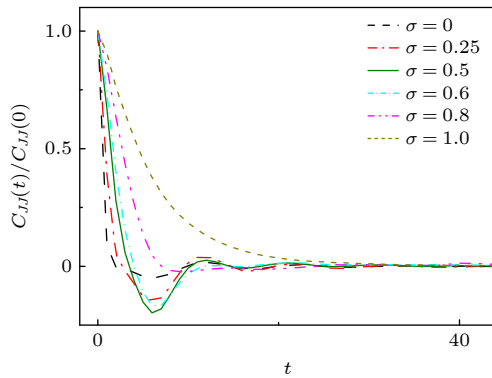


图 8 $0 < \sigma < 1$ 的各类体系的能流自关联函数

Fig. 8. The energy flux autocorrelation functions of various systems with $0 < \sigma < 1$.

即便如此, 这些反持久能流关联性质显然是亚扩散能量输运行为的明显迹象, 并强烈暗示了在强长程相互作用下, 和平均场模型类似, 体系都应该遵循亚扩散能量输运.

还值得一提的是, 在长程体系的强长程区域存在一个特殊点 $\sigma_c = 0.5$, 该点有点出乎意料, 因为

之前学界的认识是只有 $\sigma = 1$ (强和弱长程区域之间的分界线) 和 $\sigma = 2$ (弱非可积动力学) 这两个特殊点. 这一发现可能与体系存在混沌抑制和相关长程相互作用系统中的普遍动力学阈值密切相关, 也为未来长程相互作用晶格体系的研究提供了一个新的研究点.

更需要说明的是, 图 8 的结果表明, 新发现的 $\sigma_c = 0.5$ 看起来像是一个动力学相变的临界点, 然而目前关于热传导研究的文献中尚缺乏对这一分界点的系统有限尺寸标度与临界行为的研究. 因此, 尚不能确认这些分界点是否属于严格意义上的动力学相变, 因此本文暂将其视为可能存在的动力学跨越 (crossover) 行为或动力学阈值现象.

3.4 弱长程区域 ($1 \leq \sigma \leq 3$) 的正常热输运窗口

学界一般认为, 弱长程区域指的是 $1 \leq \sigma \leq 3$. 基于以上认识, 仔细研究弱长程区域可进一步观察体系的输运规律是如何从能量的亚扩散逐步转变为超扩散. 由于能量亚扩散和超扩散之间横跨着正常扩散, 研究者们便自然期待看看能不能看到正常热输运. 另外, 对于弱长程区域, 虽然具体的热传导发散指数并未统一 (除有限尺寸与统计窗口差异外, 长程体系中热流定义的选取及边界/热浴实现方式也可能导致对 α 的定量刻画出现偏差), 现有的数值结果^[38,40] 都一致定性给出超扩散输运的

结论. 具体来说, 对于 $1 \leq \sigma \leq 2$, Bagchi 的工作^[38] 给出发散指数为 $\alpha = 0.3$, 而 Iubini 等^[40] 的工作却给出 $\alpha = 0.6$; 对于 $2 \leq \sigma \leq 3$, Bagchi^[38] 和 Iubini 等^[40] 给出定量一致的结果, 即逐步从 $\alpha \approx 1$ 过渡到 $\alpha \approx 0.4-0.5$. 综合来看, 似乎满足傅里叶定律的正常热传导并未被观测到.

然而, 2024 年 Xiong 和 Wang^[45] 细致研究了热流自关联函数 $C_{JJ}(t)$ 和热能密度涨落时空关联函数的标度律, 并给出了超乎意料的结果. 短时间的 $C_{JJ}(t)$ 结果如图 9 所示, 在 $0.8 \leq \sigma \leq 3$, 有比 $C_{JJ}(t) \sim t^{-1}$ 更快的衰减发生, 这是正常热运输发生的可能迹象之一. 更精确地仔细检验每个 σ 下的 $\rho_Q(m, t)$ 显示, 在 $\sigma = 1.25$ 附近, 正常热运输极其有可能发生. 此时, $\rho_Q(m, t)$ 非常趋近于高斯分布的形状, 相应的标度分析显示 $1/\gamma = 0.53$ (见图 10), 考虑到数值误差, 这一数值已非常接近 Lévy 行走关于正常热运输的理论值 $1/\gamma = 1/2$. 此外, 根据 Lévy 行走理论^[55], 精确的标度指数可以用 $\rho_Q(m, t)$ 中间峰 $\rho_Q(0, t)$ 的时间衰减标度来给出, 相应的更细致的逐个 σ 的检验结果, 如图 11 所示, 也验证了这一点.

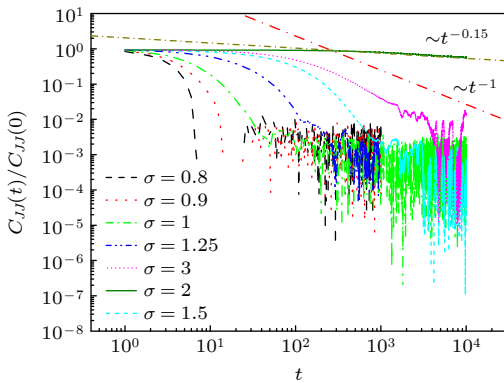


图 9 弱长程区域各类体系的能流自关联函数
Fig. 9. The energy flow autocorrelation functions of various systems in the weak long-range region.

针对弱长程区域 ($1 \leq \sigma \leq 3$) 所发现的正常热运输窗口, 值得一提的是, 研究热运输最早的理论意图就是探究满足傅里叶传导定律的正常热运输的微观因素和起源. 之前几十年的工作都集中在短程最近邻的晶格体系中, 在那个框架下, 研究者们从来没有在动量守恒的晶格中发现过正常的热传导行为. 基于此, 在 $\sigma = 1.25$ 为中心点附近所发现的正常运输, 或许意味着以往在短程最近邻的晶格体系中获得的认识需要全面更新. 从这个意义上也

说明长程相互作用体系热运输的物理更丰富.

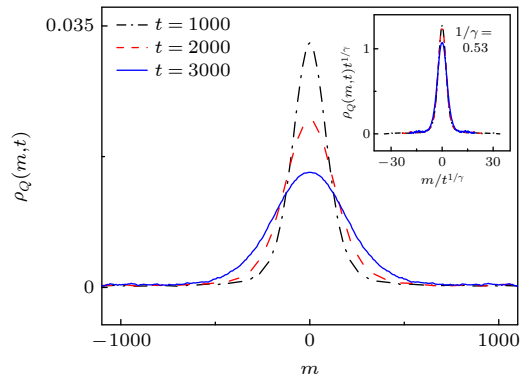


图 10 $\sigma = 1.25$ 体系在不同时间下的 $\rho_Q(m, t)$, 插图给出其标度行为
Fig. 10. The $\rho_Q(m, t)$ of the $\sigma = 1.25$ system at different times, the inset shows its scaling behavior.

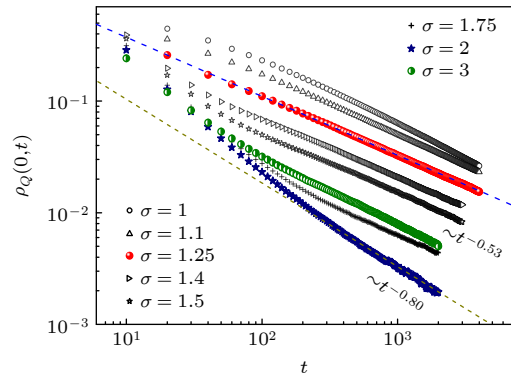


图 11 弱长程区域各类体系的 $\rho_Q(m, t)$ 中间峰的高度的时间衰减规律
Fig. 11. The time decay of the height of the central peak of $\rho_Q(m, t)$ of various systems in the weak long-range region.

在传统最近邻 (短程) 一维动量守恒非线性晶格中, 已有理论与数值工作形成了相当稳固的“经验图像”: 热导率随系统尺寸幂律发散, 傅里叶定律在严格一维极限下失效. 相应地, 动量守恒往往被视为反常导热的关键前提之一. 相比之下, 弱长程区域中在 $\sigma \approx 1.25$ 附近出现的接近扩散窗口之所以具有很强的物理冲击性, 恰在于它提示: 仅在保持哈密顿动力学与动量守恒的前提下, 引入幂律长程非谐耦合就可能打开一条通往 (准) 正常运输的机制通道, 从而对“动量守恒必然导致反常热传导”的传统认识构成了挑战. 因此本文将该结论概括为“弱长程区出现接近扩散的准正常热传导窗口, 并暗示长程相互作用可能为动量守恒体系实现傅里叶定律打开新的机制通道”.

需要强调的是, 现阶段该“近扩散窗口”更合适

的表述是准正常或接近扩散的数值观测结果, 其挑战性来自多指标的一致指向, 而其“尚待确证性”也同样源于长程体系的数值困难.

一方面, 从平衡态能流自关联函数的角度, 在弱长程区不同 σ 的 $C_{JJ}(t)$ 呈现显著差异, 其中 $\sigma = 1.25$ 的曲线在长时间尾部呈现出更接近扩散情形的衰减特征. 另一方面, 从文献汇总看, 弱长程区的热导发散指数 α 在不同 σ 区间仍存在显著分歧 (例如 $1 \leq \sigma \leq 2$ 段 α 的定量差异), 而这种差异除有限尺寸/统计窗外, 也可能受到长程体系中热流定义与边界/热浴实现差异的影响, 因此对“严格正常”的判定必须更谨慎.

因此, 本文采取更稳妥的立场: 把 $\sigma = 1.25$ 的结果视为一个值得重点关注的候选窗口, 并强调需要在统一数值设置下进行更系统的交叉验证, 例如同时对非平衡 κ 标度、Green-Kubo 长时尾以及热能密度涨落的时空标度, 以排除“有限尺度渡越伪像”的可能. 同时, 本文也指出, 目前文献仍缺少对若干 σ 特征点 (包括 $\sigma = 1.25$) 进行大系统尺寸下的系统扫描与有限尺寸标度分析, 从而尚不能确认这些分界究竟属于连续渡越还是动力学相变.

从理论图像上看, 短程体系中“动量守恒导致反常热传导”的结论往往建立在局域守恒律与短程相互作用所诱导的流体力学描述之上; 而在长程非局域耦合存在时, 输运的长时记忆核、有效散射通道与模耦合结构可能发生质变, 使得传统短程经验需要被重新检验. 因此, $\sigma \approx 1.25$ 的“近扩散窗口”并不意味着推翻既有认识, 而更可能提示: 长程非局域性为一维体系提供了不同于短程情形的“有效

弛豫路径/散射图景”, 其渐近极限及普适性仍需进一步厘清.

3.5 交错长程耦合非可积体系中的弹道热输运

2022 年 Yoshimura 等^[61] 把传统的长程 FPUT 晶格体系改造为一种交错长程耦合的类 FPUT 晶格体系, 并声称该体系具有声子倒逆过程消失的特性. 这一体系的哈密顿量为

$$H = \sum_i^N \left\{ \frac{p_i^2}{2} + V_{\text{NN}}(x_{i+1} - x_i) + \sum_{r=1}^{N/2-1} V_{\text{LR}}[x_{i+r} - (-1)^r x_i] \right\}, \quad (6)$$

式中, 粒子间相互作用分为两项: 最近邻简谐项 $V_{\text{NN}}(\xi) = \xi^2/2$ 和长程的非谐项 $V_{\text{LR}}(\eta) = \frac{k_{\text{LR}}\eta^4}{4r^2}$ (其中 $\eta_i = x_{i+r} - (-1)^r x_i$, k_{LR} 表征体系的非线性强度); $(-1)^r$ 体现了长程项的交错耦合.

根据 Peierls 理论, 声子倒逆过程消失意味着体系没有热阻, 因此该体系将呈现在最近邻短程体系框架下只在可积系统会观测到的弹道热输运. 由于计算上的困难, Yoshimura 等^[61] 利用传统的非平衡分子动力学方法, 在固定边界条件下, 通过增大一个截断长程距离的方式去逼近一个长程系统. 在较小的非线性强度 ($k_{\text{LR}} = 0.1$) 下, 他们的数据展示了平坦的温度分布和随尺寸线性增长的热导率. 从低维体系热输运的理论发展脉络来看, 这项工作突破了传统在短程体系下建立的普遍认识, 即只有可积系统才能呈现弹道热输运. 该工作表明,

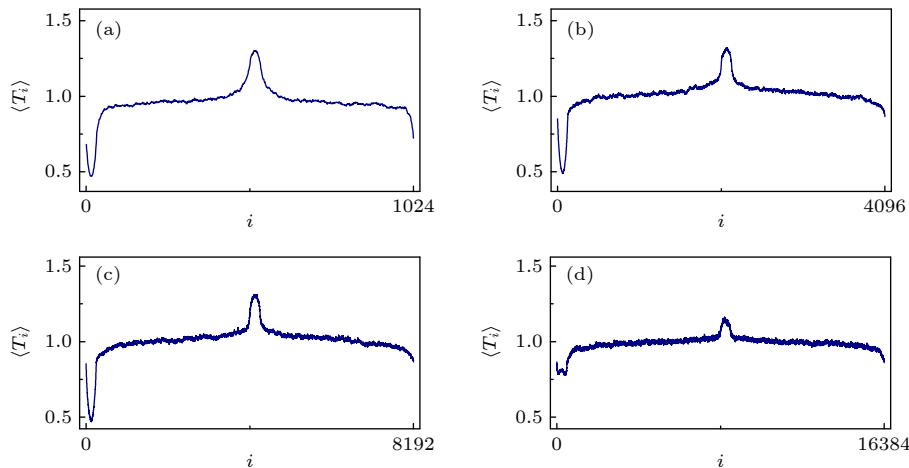


图 12 交错长程耦合非可积体系在不同系统尺寸下的温度分布

Fig. 12. Temperature distribution of the alternating long-range coupled non-integrable system at different system sizes.

引入适当的长程相互作用, 至少从数学上, 一个非可积系统同样可以呈现弹道输运. 然而遗憾的是, Yoshimura 等^[61]只局限于较小的非线性强度, 这在有限系统下很容易陷入线性可积系统的范围. 同时, 如前文所述, 用传统的非平衡分子动力学方法来研究长程体系热输运本身绕不开边界和热源耦合的困难. 因此, 他们的工作只限于讨论构造一个声子倒逆过程消失及其验证.

2025年, Wang 和 Xiong^[50]把这一具有声子倒逆过程消失的体系从接近线性区域 ($k_{LR} = 0.1$) 扩展到完全非线性区域 ($k_{LR} = 1$), 系统计算出了满足弹道输运的所有特征性标志, 如平坦的体温度分布 (见图 12), 热能密度涨落时空关联的弹道标度律及其表征的输运分布函数给出的均方位移随时间的弹道式增长 (见图 13), 以及长时间下不衰减的能流自关联函数 (见图 14). 这是第一次用充

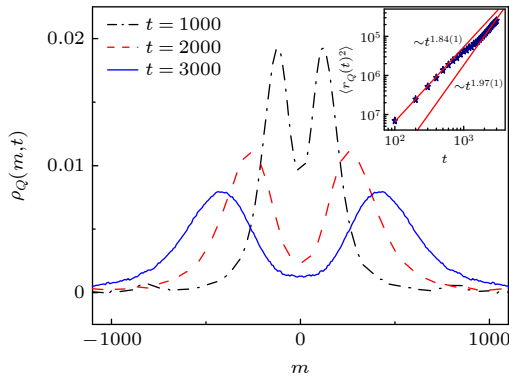


图 13 交错长程耦合非可积体系在不同时间下的 $\rho_Q(m, t)$, 插图给出其均方位移随时间的关系

Fig. 13. The $\rho_Q(m, t)$ of the alternating long-range coupled non-integrable system at different times, the inset shows the relationship between its mean square displacement and time.

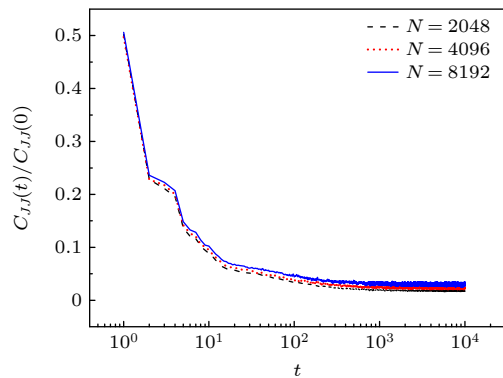


图 14 交错长程耦合非可积体系的能流自关联函数

Fig. 14. The energy current auto-correlation function of the alternating long-range coupled non-integrable system.

分的数据支持非可积系统中的弹道热输运, 说明在完全混沌的非可积系统中弹道热输运是可行的, 表明“弹道并不必然等价可积”, 因此全面丰富了长程和短程体系热输运的整体图像.

4 总结和展望

本文围绕一维长程相互作用 FPUT 类晶格的非平衡热输运, 系统阐述了领域内一些新的进展: 在保持哈密顿动力学与动量守恒的前提下, 仅仅通过把相互作用从最近邻推广到幂律衰减的长程相互作用, 就足以使一维体系热输运呈现出一系列超出短程体系的新奇输运现象, 包括热导率发散指数的显著增强、能流自关联的反持续负关联、弱长程区的正常热输运窗口, 以及非可积体系的弹道输运等. 具体来说, 本文主要综述了如下结果.

1) 长程 FPUT 体系在特定长程相互作用衰减指数 $\sigma = 2$ 时, 热导率随尺寸的发散指数显著增强, 呈现“类弹道但仍属超扩散”的标度区间, 结合最大李雅普诺夫指数与能量时空图的证据, 这归结于体系弱的非可积性和特殊的移动呼吸子动力学.

2) 在长程 FPUT 体系平均场极限及强长程区 ($0 \leq \sigma \leq 1$), 能量输运可从超扩散转入亚扩散并在能流自关联函数中出现反持续 (antipersistent) 负关联结构及其随 σ 的非单调演化, 说明长程性不仅改变幂律指数, 更可能改写载流子散射图景.

3) 在长程 FPUT 体系弱长程区 ($1 \leq \sigma \leq 3$), 在 $\sigma \approx 1.25$ 附近可以发现接近正常扩散的正常热传导窗口, 其热能密度涨落关联函数接近高斯且标度指数逼近正常扩散值, 暗示长程相互作用可能为“动量守恒体系实现傅里叶定律”打开新的机制通道.

4) 在适当构造的交错长程耦合非可积体系中可观察到完整的弹道输运所有特征, 说明弹道输运并不必然等价于可积性, 长程耦合可能通过抑制某类关键散射/倒逆过程在非可积背景下实现无热阻传输.

根据以上进展, 本文提出如下一些开放问题供读者参考.

1) 据我们调研, 截至目前文献中尚缺少针对上述 σ -驱动输运分区的系统临界行为研究, 特别是缺乏在多种系统尺寸 N 下进行的有限尺寸标度分析, 从而尚不能确认这些分界点是否属于严格意义上的动力学相变. 因此, 目前关于 $\sigma = 0.5$,

$\sigma \approx 1.25$ 和 $\sigma = 2$ 等特征点的证据主要来自有限尺度数值观察, 尚缺乏系统的有限尺寸标度与临界指数研究. 未来需要在统一边界条件与足够大 N 下, 对有效指数 $\alpha_{\text{eff}}(\sigma; N)$ 、能流负关联以及 $\rho_Q(m, t)$ 的标度行为做系统扫描, 以判定这些分界究竟属于连续渡越还是动力学相变, 并探索可能的普适类.

2) 本文主要聚焦于固定平均温度 (如 $T = 0.5$) 和固定非线性强度下的结果. 已知在短程 FPUT 链中, 热输运标度指数 α 可能随温度变化. 在长程 FPUT 体系中, 温度和非线性强度如何影响文中所述的各种输运现象, 是否存在一个相图, 也是未来值得研究的一个重要方向.

3) 本文的一个核心结论是: 仅通过将非线性相互作用从短程推广到幂律长程, 一维动量守恒晶格即可出现强超扩散增强、弱长程区近正常扩散窗口、强长程区反持续能流关联乃至亚扩散, 以及在特殊结构设计下的弹道输运等多样行为. 这些现象提示: 长程相互作用并非只是改变指数的参数扰动, 而是在微观层面改变了能量交换的空间结构与长时记忆, 从而对现有理论框架 (尤其是在最近邻短程体系下发展出的非线性涨落流体力学理论^[15,16]) 提出了直接挑战. 检验长程 FPUT 体系下涨落流体力学理论的适用性, 以及发展长程体系下的流体力学区域的热传导理论也是未来一个重要的研究方向.

4) 本文综述主要呈现了近年来一维长程 FPUT 体系的新奇输运现象. 这些输运现象背后的微观动力学机制是什么? Doi 和 Yoshimura^[53] 证明零温下在 $\sigma = 2$ 长程 FPUT 体系中存在没有尾巴不衰减的移动呼吸子; Wang 等^[36] 首次把 $\sigma = 2$ 的超扩散输运与体系中发现的移动呼吸子联系; Xiong 和 Wang^[45] 发现 $\sigma = 0.5$ 有特殊的不动呼吸子构型; Xiong 和 Wang^[44,50] 把复杂的输运变化与呼吸子和声子散射联系在一起. 然而, 这些尝试只是初步的现象学关联, 更深入地在不同系统中研究不同载流子及其散射动力学也是将来一个值得细致探讨的方向.

5) 新近几年, 短程最近邻体系的经典热化已取得了更深的认识, 特别是厦门大学赵鸿教授研究组发现了热化时间和扰动强度的平方反比的普适标度律^[20-24]. 然而, 关于长程相互作用体系的热化研究, 到目前为止只是些前期的探索 (如扬州大学王健教授研究组的工作^[62]). 这一在短程体系发现

的普适标度律是否同样适用于长程相互作用的晶格体系? 这一问题也值得研究.

6) 最后, 或许值得强调的是, 长程相互作用并非纯粹的理论构造, 现有实验技术已能够制备并操控具有长程耦合的真实材料与人工结构. 例如, 库仑晶体 (Coulomb crystals)^[63]、伊辛焦绿石磁体 (Ising pyrochlore magnets)^[64,65] 以及坡莫合金纳米磁体 (permalloy nanomagnets)^[66] 等体系都天然或有效地表现出长程相互作用特征. 更重要的是, 近年来在包含长程相互作用的系统中已实现了高效率的热整流^[35,67,68], 表明通过相互作用范围工程调控热流方向性与幅值具有现实可行性. 结合本文对一维长程 FPUT 类晶格的综述结果, 我们认为其对实际材料热物性的理解与调控具有如下启示: 长程耦合不仅会改变传统声子散射与能量扩散的标度规律, 还可能在非平衡条件下引入更丰富的动力学结构——尤其是在“交错的长程耦合+非线性”共同作用时, 体系可呈现混沌与规则运动交织的复杂动力学图景, 这种由相空间结构调控热流的机制为解释与设计热整流效应提供了新的视角. 换言之, 除增强散射/引入无序之外, 长程耦合与非线性协同所诱导的相干/非相干竞争, 以及由此产生的能流关联与输运通道重构, 可能成为构筑高性能热二极管、热开关与热逻辑器件的关键物理抓手, 从而推动从模型研究到可调控热输运材料与器件设计的跨越.

参考文献

- [1] Lepri S, Livi R, Politi A 2003 *Phys. Rep.* **377** 1
- [2] Dhar A 2008 *Adv. Phys.* **57** 457
- [3] Li N, Ren J, Wang L, Zhang G, Hanggi P, Li B 2012 *Rev. Mod. Phys.* **84** 1045
- [4] Chen J, Xu X, Zhou J, Li B 2022 *Rev. Mod. Phys.* **94** 025002
- [5] Zhao H, Wang J, Zhang Y, He D H, Fu W C 2021 *Sci. China: Phys. Mech. Astron.* **51** 030012 (in Chinese) [赵鸿, 王娇, 张勇, 贺达海, 符维成 2021 中国科学: 物理学 力学 天文学 **51** 030012]
- [6] Chen S G 2010 *Nonequilibrium Statistical Mechanics* (Beijing: Science Press) pp1-3 (in Chinese) [陈式刚 2010 非平衡统计力学 (北京: 科学出版社) 第 1—3 页]
- [7] Zheng Z G, Hu G 2016 *From Dynamics to Statistical Physics* (Beijing: Peking University Press) pp200-260 (in Chinese) [郑志刚, 胡岗 2016 从动力学到统计物理学 (北京: 北京大学出版社) 第 200—260 页]
- [8] Rieder Z, Lebowitz J L, Lieb E 1967 *J. Math. Phys.* **8** 1073
- [9] Toda M 1979 *Phys. Scr.* **20** 424
- [10] Casati G, Ford J, Vivaldi F, Visscher W M 1984 *Phys. Rev. Lett.* **52** 1861
- [11] Lepri S, Livi R, Politi A 1997 *Phys. Rev. Lett.* **78** 1896

- [12] Hu B, Li B, Zhao H 1998 *Phys. Rev. E* **57** 2992
- [13] Ernst M H, Hauge E H, van Leeuwen J M J 1976 *J. Stat. Phys.* **15** 7
- [14] Narayan O, Ramaswamy S 2002 *Phys. Rev. Lett.* **89** 200601
- [15] van Beijeren H 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 180601
- [16] Spohn H 2014 *J. Stat. Phys.* **154** 1191
- [17] Giardinà C, Livi R, Politi A, Vassalli M 2000 *Phys. Rev. Lett.* **84** 2144
- [18] Gendelman O V, Savin A V 2000 *Phys. Rev. Lett.* **84** 2381
- [19] Doyon B, Gopalakrishnan S, Møller F, Schmiedmayer J, Vasseur R 2025 *Phys. Rev. X* **15** 010501
- [20] Lin W, Fu W, Wang Z, Zhang Y, Zhao H 2025 *Phys. Rev. E* **111** 024122
- [21] Wang Z, Fu W, Zhang Y, Zhao H 2024 *Phys. Rev. Lett.* **132** 217102
- [22] Fu W, Zhang Y, Zhao H 2021 *Phys. Rev. E* **104** L032104
- [23] Wang Z, Fu W, Zhang Y, Zhao H 2020 *Phys. Rev. Lett.* **124** 186401
- [24] Fu W, Zhang Y, Zhao H 2019 *Phys. Rev. E* **100** 010101
- [25] Fu W, Wang Z, Wang Y, Zhang Y, Zhao H 2025 arXiv: 2508.15666v1 [cond-mat.stat-mech]
- [26] Lepri S, Livi R, Politi A 2020 *Phys. Rev. Lett.* **125** 040604
- [27] Roy D, Dhar A, Spohn H, Kulkarni M 2024 *Phys. Rev. E* **110** 044110
- [28] McCarthy C, Gopalakrishnan S, Vasseur R 2024 *Phys. Rev. B* **11** L180301
- [29] Prolhac S 2026 *Phys. Rev. E* **113** L012102
- [30] Padmanabhan T 1990 *Phys. Rep.* **188** 285
- [31] French R H, Parsegian V A, Podgornik R, et al. 2010 *Rev. Mod. Phys.* **82** 1887
- [32] Campa A, Dauxois T, Ruffo S 2009 *Phys. Rep.* **480** 57
- [33] Bouchet F, Gupta S, Mukamel D 2010 *Physica A* **389** 4389
- [34] Levin Y, Pakter R, Rizzato F B, Teles T N, Benetti F P C 2014 *Phys. Rep.* **535** 1
- [35] Gupta S, Ruffo S 2017 *Int. J. Mod. Phys. A* **32** 1741018
- [36] Wang J, Dmitriev S V, Xiong D 2020 *Phys. Rev. Res.* **2** 013179
- [37] Olivares C, Anteneodo C 2016 *Phys. Rev. E* **94** 042117
- [38] Bagchi D 2017 *Phys. Rev. E* **95** 032102
- [39] Bagchi D 2017 *Phys. Rev. E* **96** 042121
- [40] Iubini S, Di Cintio P, Lepri S, Livi R, Casetti L 2018 *Phys. Rev. E* **97** 032102
- [41] Di Cintio P, Iubini S, Lepri S, Livi R 2019 *J. Phys. A: Math. Theor.* **52** 274001
- [42] Tamaki S, Saito K 2020 *Phys. Rev. E* **101** 042118
- [43] Bagchi D 2021 *Phys. Rev. E* **104** 054108
- [44] Xiong D, Wang J 2022 *Phys. Rev. E* **106** L032201
- [45] Xiong D, Wang J 2024 *Phys. Rev. E* **109** 044122
- [46] Iubini S, Lepri S, Ruffo S 2022 *J. Stat. Mech.* **2022** 033209
- [47] Defaveri L, Olivares C, Anteneodo C 2022 *Phys. Rev. E* **105** 054149
- [48] Andreucci F, Lepri S, Ruffo S, Trombettoni A 2022 *SciPost Phys. Core* **5** 036
- [49] Andreucci F, Lepri S, Ruffo S, Trombettoni A 2023 *Phys. Rev. E* **108** 024115
- [50] Wang J, Xiong D 2025 *Phys. Rev. E* **111** 054102
- [51] Jia P Z, Deng L Q, Chen X K, Xie Z X, Chen K Q 2025 *Appl. Phys. Lett.* **127** 102103
- [52] Chen X K, Zhu J, Qi M, Jia P Z, Xie Z X 2025 *Phys. Rev. Appl.* **23** 034085
- [53] Doi Y, Yoshimura K 2016 *Phys. Rev. Lett.* **117** 014101
- [54] Chen S, Zhang Y, Wang J, Zhao H 2013 *Phys. Rev. E* **87** 032153
- [55] Zaburdaev V, Denisov S, Klafter J 2015 *Rev. Mod. Phys.* **87** 483
- [56] Li N B, Li B W, Flach S 2010 *Phys. Rev. Lett.* **105** 054102
- [57] Klages R 2007 *Microscopic Chaos, Fractals, and Transport in Nonequilibrium Statistical Mechanics Advanced Series in Nonlinear Dynamics* (Singapore: World Scientific) pp320–340
- [58] Denisov S, Klafter J, Urbakh M 2003 *Phys. Rev. Lett.* **91** 194301
- [59] Li B, Wang J 2003 *Phys. Rev. Lett.* **91** 044301
- [60] Ruan Q, Liu W, Luo H, Wang L 2025 *Phys. Rev. E* **112** L012102
- [61] Yoshimura K, Doi Y, Kitamura T 2022 *Phys. Rev. E* **105** 024140
- [62] Wang J, Li A C 2022 *Phys. Rev. E* **106** 014135
- [63] Britton J W, Sawyer B C, Keith A C, Wang C C J, Freericks J K, Uys H, Biercuk M J, Bollinger J J 2012 *Nature* **484** 489
- [64] Bramwell S T, Harris M J, den Hertog B C, Gingras M J P, Gardner J S, McMorro D F, Wildes A R, Cornelius A, Champion J D M, Melko R G, Fennell T 2001 *Phys. Rev. Lett.* **87** 047205
- [65] Melko R G, den Hertog B C, Gingras M J P 2001 *Phys. Rev. Lett.* **87** 067203
- [66] Wang R F, Nisoli C, Freitas R S, Li J, McConville W, Cooley B J, Lund M S, Samarth N, Leighton C, Crespi V H, Schiffer P 2006 *Nature* **439** 303
- [67] Pereira E, Ávila R R 2013 *Phys. Rev. E* **88** 032139
- [68] Chen S, Pereira E, Casati G 2015 *Europhys. Lett.* **111** 30004

SPECIAL TOPIC—Heat conduction and its related interdisciplinary areas

Recent progress on thermal transport in one-dimensional long-range interacting Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou lattice systems*

XIONG Daxing^{1)†} LI Nianbei^{2)‡} CHEN Jie^{3)††}

1) (*MinJiang Collaborative Center for Theoretical Physics, College of Physics and Electronic Information Engineering, Minjiang University, Fuzhou 350108, China*)

2) (*Institute of Systems Science, Department of Physics, College of Information Science and Engineering, Huaqiao University, Xiamen 361021, China*)

3) (*MOE Key Laboratory of Advanced Micro-Structured Materials, China-EU Joint Laboratory for Nanophononics, Center for Phononics and Thermal Energy Science, School of Physics Science and Engineering, Tongji University, Shanghai 200092, China*)

(Received 31 December 2025; revised manuscript received 31 January 2026)

Abstract

Long-range (LR) interactions are no longer just a theoretical idea: they can be engineered in several low-dimensional platforms and offer a new way to control heat transport. At the same time, they push beyond the standard picture developed mainly for short-range, momentum-conserving lattices. In this review, we consider one-dimensional Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou (FPUT)-type lattices where LR effects enter mainly through a quartic anharmonic coupling that decays as a power law, characterized by an exponent σ . Our goal is to explain, in a unified way, how LR anharmonicity changes microscopic energy exchange, collective dynamics, and the macroscopic scaling laws of heat conduction—while also clarifying what is well established and what is still debated.

We first introduce the main models and the quantities used to describe transport in LR-FPUT systems. These include the nonequilibrium steady-state thermal conductivity $\kappa(N)$, the equilibrium Green-Kubo (GK) approach based on the heat-current autocorrelation $C_{JJ}(t)$, and spatiotemporal correlations of heat/energy fluctuations $\rho_Q(m, t)$, together with the scaling of the mean-squared displacement (MSD). A key technical point is that, in LR lattices, the microscopic heat current contains explicit nonlocal contributions. As a result, different (formally related) implementations of the current may lead to noticeable differences at finite system sizes and finite times. To extract the intrinsic transport behavior, we therefore stress practical checks: i) the stability of scaling exponents against boundary and driving protocols, ii) validation among all the three methods, i.e., $\kappa(N)$, $C_{JJ}(t)$, and $\rho_Q(m, t)$, and iii) careful control of finite-size and finite-time crossovers.

Based on these methods, we review representative σ -dependent transport regimes. i) The special point $\sigma = 2$ is central and remains controversial. Early work reported ballistic-like behavior under certain boundary conditions. More recent studies using more controlled numerical method (e.g., periodic driving together with correlation scaling) tend to support strongly enhanced superdiffusion, with an effective divergence exponent around $\alpha \simeq 0.7$, rather than ballistic transport. The most consistent physical picture links this enhancement to

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 12275116, 12175074, 12475037) and the Science and Technology Commission of Shanghai Municipality, China (Grant No. 24520711200).

† Corresponding author. E-mail: xmuxdx@163.com

‡ Corresponding author. E-mail: nbli@hqu.edu.cn

†† Corresponding author. E-mail: jie@tongji.edu.cn

weak nonintegrability and the presence of long-lived coherent carriers, such as mobile breathers or related nonlinear excitations, while recognizing that finite-size results are unusually sensitive to boundary implementation and to how the heat current is defined. We summarize the current consensus and the main remaining disagreements, and we argue that ballistic vs strong superdiffusion should be decided by consistency across multiple observables, not by temperature profiles alone. ii) In the weak-LR regime ($1 \leq \sigma \leq 3$), a striking result is a near-diffusive window around $\sigma \simeq 1.25$. This is conceptually important because it suggests a possible route toward quasi-normal transport within Hamiltonian, momentum-conserving one-dimensional lattices, which usually show anomalous conduction in the short-range case. We discuss how this challenges the common intuition that momentum conservation implies anomalous transport, but we also emphasize that the current evidence should be viewed as a strong candidate that still needs careful confirmation against finite-size crossovers and method dependence. iii) In the strong-LR regime ($0 \leq \sigma \leq 1$), simulations show clear antipersistent (negative) structures in $C_{JJ}(t)$ and a trend toward slower transport, sometimes described as subdiffusive-like transport. iv) We also discuss an inverse LR coupling design LR-FPUT model that can invoke ballistic transport, suggesting that LR nonlocality combined with structural modulation may open new transport channels and may be useful for thermal rectification.

Finally, we outline key open directions: establishing reliable finite-size scaling to distinguish genuine σ -driven dynamical transitions from broad crossovers; mapping transport regimes in a $(\sigma, T, \text{nonlinearity})$ phase diagram; and identifying the microscopic carriers (phonons, stationary/mobile breathers) and their scattering dynamics that underpin the observed superdiffusive, near-diffusive, and antipersistent slow-transport behaviors. These needs also connect to experiments, since LR couplings can be realized in platforms such as Coulomb crystals and frustrated magnets, and LR interaction engineering has already enabled efficient thermal rectification-suggesting practical routes to tune heat conduction and build thermal diodes/switches based on nonlocality and nonlinearity.

Keywords: anomalous thermal transport, discrete breathers, ballistic transport, long-range interaction

DOI: [10.7498/aps.75.20251803](https://doi.org/10.7498/aps.75.20251803)

CSTR: [32037.14.aps.75.20251803](https://cstr.net/urn:csdn:CSTR:32037.14.aps.75.20251803)

一维长程相互作用Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou晶格体系热输运的研究进展

熊大兴 李念北 陈杰

Recent progress on thermal transport in one-dimensional long-range interacting Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou lattice systems

XIONG Daxing LI Nianbei CHEN Jie

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 75, 070002 (2026) DOI: 10.7498/aps.75.20251803

CSTR: 32037.14.aps.75.20251803

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.75.20251803>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

粒子间长程相互作用以及晶格中孤立缺陷点对两硬核玻色子在一维晶格势阱中量子行走的影响

Effects of long-range inter-particle interactions and isolated defect on quantum walks of two hard-core bosons in one-dimensional lattices

物理学报. 2023, 72(17): 170501 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230642>

低维微纳尺度体系声子热传导和热调控: 来自芯片散热的非平衡统计物理问题

Phononic thermal conduction and thermal regulation in low-dimensional micro-nano scale systems: Nonequilibrium statistical physics problems from chip heat dissipation

物理学报. 2023, 72(23): 234401 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20231546>

非线性光纤中Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou现象的稳定性分析

Stability analysis of Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou phenomenon in nonlinear optical fibers

物理学报. 2024, 73(23): 235201 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20241380>

扰动振幅和扰动频率对Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou回归现象的影响

Influence of perturbation amplitude and perturbation frequency on Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou recurrence phenomenon

物理学报. 2022, 71(18): 185201 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220945>

金属导热理论的研究进展与前沿问题

Recent advances in thermal transport theory of metals

物理学报. 2024, 73(3): 037201 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20231151>

基于离子阱中离子晶体的热传导的研究进展

Research progress of heat transport in trapped-ion crystals

物理学报. 2024, 73(3): 033701 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20231719>