

離散ブリーザーの滑らかな移動を実現する対称格子の構築

Construction of a Symmetric Lattice for Smooth Propagation of Discrete Breather

大阪大学 大学院工学研究科 土井 祐介 *1

Y. Doi

GRADUATE SCHOOL OF ENGINEERING, OSAKA UNIVERSITY

鳥取大学 学術研究院工学系部門 吉村 和之 *2

K. YOSHIMURA

FACULTY OF ENGINEERING, TOTTORI UNIVERSITY

1 はじめに

幅広いクラスの非線形格子系において離散ブリーザー (Discrete Breather, DB) / 非線形局在モード (Intrinsic Localized Mode, ILM) と呼ばれる局在振動モードが観測されている。DB の励起は粒子間相互作用の非線形性によってフォノンバンドの外側に振動が励起されるものの、フォノンモードと共鳴する事が出来ないためエネルギーが系全体に分散されないというメカニズムで理解できる。ここで、格子系の離散性によりフォノン振動が許される振動数帯に制限が生じることと粒子間相互作用の非線形性が共に求められることから非線形格子系特有の現象であると捉える事ができる。

DB は 1988 年の Sievers, Takeno による報告 [1] 以来、さまざま格子系において存在証明 [2, 3, 4] , 安定性解析 [4] などの理論的解析および数値シミュレーションによる性質の解析が行われてきた。さらに、DB はその存在に系の離散性と非線形性を必要とするのみで、可積分性などの特別な性質を必要としないことから、さまざまな物理系での存在が示されている [5, 6]。

DB の中でも局在構造を保ったまま系を伝ばする移動型 DB の存在は特に注目されている [7, 8, 9, 10]。移動型 DB は系の狭い領域に高いエネルギーを保持したまま伝ばする性質から、ナノ・マイクロ構造でのエネルギー・熱輸送として応用することも期待される。移動型 DB は数値シミュレーションにおいて静止絵 DB に摂動を加えることにより容易に構成できる事が知られている一方で、そのダイナミクスについての詳しい理解は進んでいない。静止型に摂動を加えて生成した移動型 DB は伝ばと共に速度を失い、格子にトラップされる [11]。また、反復法により計算した移動型 DB の数値解は格子間隔と同じ空間周期でその軌道が揺らぐ [12, 13]。このような複雑なダイナミクスは移動型 DB が格子の離散性の影響を強く受けている事を示す。この離散性の影響は Peierls-Nabarro (PN) ポテンシャルと呼ばれる実効的ポテンシャルで特徴付けられる [14, 15]。DB の良い移動性のためにはこの PN ポテンシャルを小さくすることが重要であると考えられている。

*1 〒 565-0871 大阪府吹田市山田丘 2-1 E-mail: doi@ams.eng.osaka-u.ac.jp

*2 〒 680-8552 鳥取市湖山町南 4 丁目 101 番地 E-mail: kazuyuki@tottori-u.ac.jp

われわれは移動型 DB が滑らかに伝ばする条件として格子の隠れた対称性に着目し [16, 17], 対称性を満たす格子のパラメータを数値的に求めた [18]. この格子系においては摂動に対してロバストに伝ばする DB を構成可能である. また移動型 DB の数値解は直線的な軌道をとるなど良い性質を持つ事を示した. 本稿では Fermi-Pasta-Ulam (FPU)- β 格子系を拡張した格子系において, この隠れた対称性を持つ格子系のパラメータの存在と一意性を示し, 格子系の解析的な表現を与える. また, この対称性を満たす格子系を用いた移動型 DB の数値解の計算法を構築する.

2 格子の対称性

N 粒子からなる周期境界条件の非線形格子

$$H = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N p_n^2 + \Phi(q_1, q_2, \dots, q_N), \quad (1)$$

を考える. ここで $p_n \in \mathbb{R}$, $q_n \in \mathbb{R}$ はそれぞれ n 番目の粒子の運動量と変位を表す. また $\Phi(q_1, q_2, \dots, q_N): \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$ は粒子の変位 (q_1, q_2, \dots, q_N) の関数である.

物理座標 $q_n (n = 1, 2, \dots, N)$ と複素ノーマルモード座標 $U_m (m = -N/2 + 1, -N/2 + 2, \dots, N/2)$ の間の変数変換

$$q_n = \frac{(-1)^n}{\sqrt{N}} \sum_{m=-N/2+1}^{N/2} U_m \exp\left[-i \frac{2\pi n}{N} m\right], \quad n = 1, 2, \dots, N, \quad (2)$$

を考える. モード座標 $U_{N/2}$ は格子の一樣変位を表している. ハミルトニアン (1) に式 (2) を代入することにより, 複素ノーマルモード座標 U_m に関するハミルトニアン

$$H = \frac{1}{2} \sum_{m=-N_h}^{N_h+1} \dot{U}_m \dot{U}_{-m} + \Phi(\mathbf{U}, U_{N/2}), \quad (3)$$

を得る. ここで $N_h = N/2 - 1$ であり, ベクトル $\mathbf{U} = (U_{-N_h}, U_{-N_h+1}, \dots, U_{N_h})$ とする. このときポテンシャル $\Phi(\mathbf{U}, U_{N/2})$ を $U_{N/2}$ に依存しない部分とそれ以外の部分に分解する.

$$\Phi(\mathbf{U}, U_{N/2}) = \Phi(\mathbf{U}, 0) + \mathcal{G}(\mathbf{U}, U_{N/2}), \quad (4)$$

ここで $\mathcal{G}(\mathbf{U}, U_{N/2}) \equiv \Phi(\mathbf{U}, U_{N/2}) - \Phi(\mathbf{U}, 0)$ とした.

次の写像 $\mathcal{T}_\lambda: \mathbb{C}^{N-1} \rightarrow \mathbb{C}^{N-1}$ を考える.

$$\mathcal{T}_\lambda: U_m \mapsto U_m \exp(-im\lambda), \quad m = -N_h, \dots, N_h, \quad (5)$$

ここで λ は実定数である. この写像は λ の大きさに対応して, $U_{N/2} = \sum_{n=1}^N q_n / \sqrt{N} = 0$ を満足する任意の波形パターンを格子列に沿ってシフトさせ, かつ変位の符号を反転させる操作に対応している. 例えば $\lambda = 2\pi/N$ とした場合,

$$\mathcal{T}_{2\pi/N}: U_m \mapsto U_m \exp(-2\pi mi/N), \quad m = -N_h, \dots, N_h, \quad (6)$$

となる. これを式 (2) に代入すると $-q_{n+1}$ となる. したがって $\mathcal{T}_{2\pi/N}$ は波形パターンを一格子分横にシフトして符号を反転させる写像になっていることがわかる.

この写像 \mathcal{T}_λ を用いて, $U_{N/2}$ に依存しないポテンシャル成分 $\Phi(\mathbf{U}, 0)$ を分解する.

$$\Phi(\mathbf{U}, 0) = \Phi_s(\mathbf{U}) + \Phi_a(\mathbf{U}) \quad (7)$$

ここで $\Phi_s(\mathbf{U})$ は $\Phi(\mathbf{U}, 0)$ のうち任意の λ の写像 \mathcal{T}_λ に対して不変な成分, $\Phi_a(\mathbf{U})$ はそれ以外の成分を表す.

$$\Phi_s(\mathcal{T}_\lambda \mathbf{U}) = \Phi_s(\mathbf{U}) \quad \text{for any } \lambda \in \mathbb{R} \text{ and any } \mathbf{U} \in \mathbb{C}^{N-1} \quad (8)$$

$$\Phi_a(\mathbf{U}) = \Phi(\mathbf{U}, 0) - \Phi_s(\mathbf{U}) \quad (9)$$

$\Phi_s(\mathbf{U})$ を対称項と呼ぶ. この分解を用いてハミルトニアン (13) は

$$H = \frac{1}{2} \sum_{m=-N_h}^{N_h+1} \dot{U}_m \dot{U}_{-m} + \Phi_s(\mathbf{U}) + \Psi(\mathbf{U}, U_{N/2}), \quad (10)$$

と書き換えられる. ここで $\Psi = \Phi_a(\mathbf{U}) + \mathcal{G}(\mathbf{U}, U_{N/2})$ は全ポテンシャル $\Phi(\mathbf{U}, U_{N/2})$ の非対称成分である. いま, $U_{N/2} = \dot{U}_{N/2} = 0$ である部分空間 $\mathcal{I} = \{(\mathbf{q}, \mathbf{p}) \in \mathbb{R}^{2N} \mid \sum_{n=1}^N q_n = \sum_{n=1}^N p_n = 0\}$ を考えて対称格子を次のように定義する.

定義 1

格子系 (3) または (10) について \mathcal{I} が系の不変部分空間でありかつ $\Psi(\mathbf{U}, 0) = 0$ であるとき, この格子系を対称格子と呼ぶ.

この定義から, 任意の対称格子の \mathcal{I} 上の力学系のハミルトニアンは

$$H = \frac{1}{2} \sum_{m=-N_h}^{N_h} \dot{U}_m \dot{U}_{-m} + \Phi_s(\mathbf{U}). \quad (11)$$

で与えられる.

3 Pairwise Interaction Symmetric Lattice

前章で議論した対称格子を構築するために N 個の粒子からなる一次元の系を考える.

$$H = \sum_{n=1}^N \frac{1}{2} p_n^2 + \sum_{n=1}^N \left[\frac{\mu_0}{2} q_n^2 + \frac{\mu_1}{2} (q_{n+1} - q_n)^2 \right] + \frac{1}{4} \sum_{n=1}^N \sum_{r=1}^{N/2} b_r (q_{n+r} - q_n)^4, \quad (12)$$

ここで q_n, p_n はそれぞれ n 番目の粒子の変位, 運動量, μ_0 はオンサイトポテンシャルの係数, μ_1 は最近接粒子間の線形結合強度を表す. b_r は第 r 近接粒子間の非線形結合強度を表している. 境界条件は周期境界条件とする. この系は FPU- β 格子に長距離の非線形相互作用を付け加えたものになっている. 実際 $b_r = 0$ ($r \geq 2$) としたとき, 系は FPU- β 格子に戻る.

式 (12) に物理座標 \mathbf{q} から複素ノーマルモード座標 \mathbf{U} への座標変換 (2) を行くと,

$$H = \frac{1}{2} \sum_{m=-N_h}^{N_h+1} \dot{U}_m \dot{U}_{-m} + \Phi_s(\mathbf{U}) + \Phi_a(\mathbf{U}) + \frac{\mu_0}{2} U_{N/2}^2. \quad (13)$$

を得る. ポテンシャルの対称項 $\Phi_s(\mathbf{U})$ および非対称項 $\Phi_a(\mathbf{U})$ はそれぞれ

$$\begin{aligned} \Phi_s(\mathbf{U}) &= \frac{1}{2} \sum_{m=-N_h}^{N_h} \left[\mu_0 + 4\mu_1 \cos^2 \left(\frac{\pi m}{N} \right) \right] U_m U_{-m} \\ &+ \frac{4}{N} \sum_{i,j,k,l=-N_h}^{N_h} \phi^{(i,j,k,l)}(\mathbf{b}) U_i U_j U_k U_l \Delta(i+j+k+l) \end{aligned} \quad (14)$$

$$\begin{aligned}\Phi_{\mathbf{a}}(\mathbf{U}) &= -\frac{4}{N} \sum_{i,j,k,l=-N_h}^{N_h} \psi^{(i,j,k,l)}(\mathbf{b}) U_i U_j U_k U_l \Delta(i+j+k+l+N) \\ &\quad -\frac{4}{N} \sum_{i,j,k,l=-N_h}^{N_h} \psi^{(i,j,k,l)}(\mathbf{b}) U_i U_j U_k U_l \Delta(i+j+k+l-N)\end{aligned}\quad (15)$$

である。ここで

$$\phi^{(i,j,k,l)}(\mathbf{b}) = \sum_{q=1}^{N/2} b_q f_q^{(i,j,k,l)} \quad (16)$$

$$\psi^{(i,j,k,l)}(\mathbf{b}) = -\sum_{q=1}^{N/2} (-1)^q b_q f_q^{(i,j,k,l)}, \quad (17)$$

である。また、 $\mathbf{b} = [b_1, b_2, \dots, b_{N/2}]^T$ としている。関数 f は

$$f_q^{(i,j,k,l)} = \begin{cases} \cos \frac{iq\pi}{N} \cos \frac{jq\pi}{N} \cos \frac{kq\pi}{N} \cos \frac{lq\pi}{N} & \text{for odd } q \\ \sin \frac{iq\pi}{N} \sin \frac{jq\pi}{N} \sin \frac{kq\pi}{N} \sin \frac{lq\pi}{N} & \text{for even } q, \end{cases} \quad (18)$$

で与えられる。関数 $\Delta(d)$ は

$$\Delta(d) = \begin{cases} 1 & \text{if } d = 0 \\ 0 & \text{otherwise.} \end{cases} \quad (19)$$

で定義される。

集合 $\mathcal{S} = \{(i, j, k, l) \in \mathbb{Z}^4 \mid -N_h \leq i, j, k, l \leq N_h, i+j+k+l = \pm N\}$ を定義する。格子 (13) は非対称項 (15) が零の時かつその時のみ対称格子となる。 $\Phi_{\mathbf{a}}(\mathbf{U}) = 0$ となる条件は

$$\psi^{(i,j,k,l)}(\mathbf{b}) = 0, \quad \forall (i, j, k, l) \in \mathcal{S}. \quad (20)$$

と等価である。

式 (20) に関して次の補題が成り立つ。

補題 2

$(i, j, k, l) \in \mathcal{Z}^4$ および $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^{N/2}$ で $\psi^{(i,j,k,l)}(\mathbf{b}) = 0$ が成り立つ場合、 $\psi^{(-i,-j,-k,-l)}(\mathbf{b}) = 0$ も成り立つ。

証明 任意の $q \in \mathbb{Z}$ に対して $s_{-(2q-1)i} = -s_{(2q-1)i}$ および $c_{-2qi} = c_{2qi}$ が成り立つので $f_q^{(-i,-j,-k,-l)} = f_q^{(i,j,k,l)}$ である。したがって、 $\psi^{(-i,-j,-k,-l)}(\mathbf{b}) = \psi^{(i,j,k,l)}(\mathbf{b})$ が成り立つ。 ■

方程式 (20) は任意のインデックスの入れ替えに対して不変であるので、集合 \mathcal{S} の代わりに部分集合 $\mathcal{S}_0 = \{(i, j, k, l) \mid -N_h \leq i \leq j \leq k \leq l \leq N_h, i+j+k+l = \pm N\} \subset \mathcal{S}$ での方程式 (20) を議論すれば十分である。このことと補題 2 より、これ以降は集合 $\mathcal{S} = \{(i, j, k, l) \mid -N_h \leq i \leq j \leq k \leq l \leq N_h, i+j+k+l = N\} \subset \mathcal{S}_0$ について議論する。

2つの集合 $\mathcal{S}_1 = \{(0, n+1, N/2-n, N/2-1) \mid 1 \leq n \leq N/4-1\} \subset \mathcal{S}$ と $\mathcal{S}_2 = \{(2-m, m, N/2-1, N/2-1) \mid m=1 \text{ or } 3 \leq m \leq N/4+1\} \subset \mathcal{S}$ を考えると次の補題が成り立つ。

補題 3

$N \in \mathbb{N}$ を 4 の倍数とする。方程式 $\psi^{(i,j,k,l)}(\mathbf{b}) = 0, \forall (i, j, k, l) \in \mathcal{S}_1 \cup \mathcal{S}_2$ は $N/2 - 1$ 個の線形独立な方程式であり非自明な解 $\mathbf{b} \neq 0$ を持つ。さらにこの $N - 1$ 個の方程式の解 \mathbf{b} は集合 \mathcal{S} の他の方程式の解でもある。

補題 4

$N \in \mathbb{N}$ を 4 の倍数, b_1 を非零の定数とする. 方程式 $\psi^{(i,j,k,l)}(\mathbf{b}) = 0, \forall (i, j, k, l) \in S_1 \cup S_2$ の非自明な解は

$$b_r = \begin{cases} \frac{b_1 \sin^2 \frac{\pi}{N}}{\sin^2 \frac{r\pi}{N}} & (r = 1, 2, \dots, N/2 - 1), \\ \frac{b_1}{2} \sin^2 \frac{\pi}{N} & (r = \frac{N}{2}). \end{cases} \quad (21)$$

で与えられる.

補題 3 と補題 4 から次の定理が導かれる.

定理 5

N を 4 の倍数とする. $\mathbf{b} = (b_1, b_2, \dots, b_{N/2})$ が方程式系 $\psi^{(i,j,k,l)}(\mathbf{b}) = 0, \forall (i, j, k, l) \in S_1 \cup S_2$ の非自明な解であるとき, ハミルトニアン (12) で定義される格子は対称格子である. さらに, 対称格子 (12) は b_1 を非零の定数として以下の形で陽に与えられる.

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N p_n^2 + \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N [\mu_0 q_n^2 + \mu_1 (q_{n+1} - q_n)^2] \\ &+ \frac{1}{4} \sum_{n=1}^N \sum_{r=1}^{N/2-1} \frac{b_1 \sin^2 \frac{\pi}{N}}{\sin^2 \frac{r\pi}{N}} (q_{n+r} - q_n)^4 + \frac{1}{8} \sum_{n=1}^N b_1 \sin^2 \left(\frac{\pi}{N} \right) (q_{n+N/2} - q_n)^4. \end{aligned} \quad (22)$$

式 (22) で与えられる格子は Pairwise interaction symmetric lattice (PISL) と呼ばれる [18].

$r \ll N$ の場合, (21) は $b_r/b_1 = r^{-2}$ と近似される. この近似は粒子間相互作用を全粒子ではなく第 M 近接相互作用までで打ち切った近似 PISL を考える際に有用である. このとき近似 PISL は次の形で与えられる.

$$H = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N p_n^2 + \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N [\mu_0 q_n^2 + \mu_1 (q_{n+1} - q_n)^2] + \frac{1}{4} \sum_{n=1}^N \sum_{r=1}^M b_1 r^{-2} (q_{n+r} - q_n)^4, \quad (23)$$

後述する移動型 DB の数値解の探索においては FPU- β 格子と PISL を一つのパラメータで連続的に接続する格子

$$H = \sum_{n=1}^N \left[\frac{1}{2} p_n^2 + \frac{1}{2} (q_{n+1} - q_n)^2 + \frac{b_1}{4} (q_{n+1} - q_n)^4 \right] + \frac{C}{4} \sum_{n=1}^N \sum_{r=2}^{N/2} b_r (q_{n+r} - q_n)^4 \quad (24)$$

が有用である. ここで C が $0 \leq C \leq 1$ の定数で, $C = 0$ の時 FPU- β 格子, $C = 1$ の時 PISL を表す. この格子は Translational asymmetry controlled lattice (TASCL)[17] と呼ばれる.

4 PISL における移動型 DB の構築

オンサイトポテンシャル無し ($\mu_0 = 0$) のもとで静止型 DB に摂動を与えて移動型 DB を構成する事を考える. 静止型 DB の波形を $\mathbf{U}_{\text{static}}$ とした時, 摂動は $d\mathcal{T}_\lambda[\mathbf{U}_{\text{static}}]/d\lambda$ に平行な方向にとる. 具体的に計算を行うと摂動の成分 δU_m は

$$\delta U_m = -i\delta l m U_m, \quad m = -N/2 + 1, \dots, N/2 - 1 \quad (25)$$

で与えられる。ここで δl は摂動の大きさを決定するパラメータである。また $U_{N/2} = 0$ より $\delta U_{N/2} = 0$ である。摂動 δU_m を逆変換により物理空間に戻して運動量の摂動とする。

$$\delta p_n = -\delta l \frac{(-1)^n}{\sqrt{N}} \sum_{m=-N/2+1}^{N/2} imU_m \exp \left[-i \frac{2\pi n}{N} m \right], \quad n = 1, 2, \dots, N. \quad (26)$$

$N = 128$ の TASCL(24) において内部振動数 $\omega_{\text{DB}} = 2.5$ の静止型 DB に摂動を加えて生成した移動型 DB の局在中心の軌道を図 1 に示す。局在中心は各粒子のエネルギー e_n に対して

$$x(t) = \sum_{n=1}^N n e_n. \quad (27)$$

で計算した。粒子あたりのエネルギーは

$$e_n = \frac{1}{2} p_n^2 + \frac{1}{4} [(q_n - q_{n-1})^2 + (q_{n+1} - q_n)^2] + \frac{b_1}{8} [(q_n - q_{n-1})^4 + (q_{n+1} - q_n)^4] \\ + \frac{C}{8} \sum_{r=2}^{N/2} b_r [(q_n - q_{n-r})^4 + (q_{n+r} - q_n)^4] \quad (28)$$

と定義している。また図 1 の軌道は DB の内部振動による揺らぎを減らすために

$$X(t) = \frac{1}{2\tau} \int_{t-\tau}^{t+\tau} x(t) dt \quad (29)$$

で平均化したものを用いている。平均化の間隔 τ は十分に長く設定している。

図 1(a) は FPU- β の場合 ($C = 0$) の結果を示している。摂動の大きさが小さい場合 ($\delta l = 0.005$) には DB は粒子間を伝ばせず、初期に置かれた粒子の位置で捕捉されて振動していることが見て取れる。一方で摂動の大きさが大きくなると ($\delta l = 0.0056, 0.0060$)、DB は粒子間を伝ばし始める。しかしこの場合も局在中心の軌道は粒子間隔で揺らいでいる。これらの様子は DB が実効的な運動エネルギーを持った粒子だと考えると、その移動に対して実効的なポテンシャル障壁が存在している事を示している。すなわち実効的な運動エネルギーが小さい場合、DB はポテンシャル障壁を乗り越えることができない。ポテンシャル障壁の大きさよりも大きな運動エネルギーを摂動として与えられた場合、DB は障壁を乗り越えて移動し始めるが、この障壁の影響で移動速度は変動する。

一方で図 1(b) に示す PISL ($C = 1$) の場合、小さな摂動の場合も DB は粒子間を伝ばしていくことがわかる。また伝ばに伴う移動速度の変動は見られない。このため、PISL においては FPU- β 格子のような移動型 DB に対する実効的なポテンシャルが存在しないと考えられる。すなわち、本稿で述べた格子の隠れた対称性は移動型 DB に対する離散性の影響としての実効的なポテンシャル障壁の有無と関連づけられる。

5 PISL を用いた非線形格子系の移動型 DB の数値解探索

上述のように、PISL は滑らかな移動性を示す DB を静止型 DB に対する摂動から生成できる。一般の非線形格子においては系の離散性による実効的なポテンシャル障壁による移動型 DB の速度の揺らぎにより Newton 法を用いた移動型 DB の探索が困難な場合がある。一方、PISL では移動型 DB が一定の速度で伝ばする事から比較的容易に Newton 法による移動型 DB を探索することができる。したがって、移動型 DB の解を見つけたい非線形格子と PISL をパラメータで連続的に変化させる格子系を作り、PISL における移動型 DB の解を初期解として解を延長することで所望の格子における移動型 DB 解を探索することが可能であると考えられる。以下に例として PISL を起点とした FPU- β 格子系での移動型 DB の探索方法の概略を示す。

1. FPU- β 格子と PISL を接続する格子系として TASCL(24) を用いる. 運動方程式は

$$\dot{q}_n = p_n, \quad (30)$$

$$\begin{aligned} \dot{p}_n = & q_{n+1} + q_{n-1} - 2q_n + b_1 [(q_{n+1} - q_n)^3 + (q_{n-1} - q_n)^3] \\ & + C \sum_{r=2}^{N/2} b_r [(q_{n+r} - q_n)^3 + (q_{n-r} - q_n)^3], \end{aligned} \quad (31)$$

で与えられる. ただし $n = 1, 2, \dots, N$ である. $(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = (q_1, \dots, q_N, p_1, \dots, p_N)$ とする. 初期条件が $(\mathbf{q}(0), \mathbf{p}(0))$ である解の時間発展は運動方程式 (30), (31) を積分することで得られる. 時間 τ の時間発展を写像 $\mathcal{F}_{C,\tau} : \mathbb{R}^{2N} \rightarrow \mathbb{R}^{2N}$ で表す.

$$\mathcal{F}_{C,\tau}(\mathbf{q}(0), \mathbf{p}(0)) = (\mathbf{q}(\tau), \mathbf{p}(\tau)). \quad (32)$$

2. PISL($C = 1$) において内部振動数 ω_{DB} の静止型 DB の近似解を構成する. 近似解を

$$\bar{q}_n^{(s)}(t) = a_n \cos \omega_{\text{DB}} t, \quad n = 1, 2, \dots, N, \quad (33)$$

と仮定する. ただし a_n は静止型 DB の空間波形である. (33) を運動方程式 (30), (31) に代入し, 回転波近似を行うと a_n についての代数方程式

$$\begin{aligned} a_{n+1} + a_{n-1} - (2 - \omega_{\text{DB}}^2) a_n + \frac{3b_1}{4} [(a_{n+1} - a_n)^3 + (a_{n-1} - a_n)^3] \\ + \frac{3}{4} \sum_{r=2}^{N/2-1} b_r [(a_{n+r} - a_n)^3 + (a_{n-r} - a_n)^3] \\ + \frac{3}{4} b_{N/2} (a_{n+N/2} - a_n)^3 = 0, \quad n = 1, 2, \dots, N. \end{aligned} \quad (34)$$

を得る. 静止型 DB の近似解 a_n , $n = 1, 2, \dots, N$ は (34) を数値的に解くことにより得られる.

3. PISL($C = 1$) において $U_{N/2} = 0$ のもとで内部振動数 ω_{DB} の静止型 DB の数値解を求める. 具体的には相空間の周期軌道を探査する. $(\mathbf{q}^{(s)}(0), \mathbf{p}^{(s)}(0))$ を静止型 DB の初期状態, $T = 2\pi/\omega_{\text{DB}}$ を静止型 DB の内部振動周期とする. このとき, 時間発展写像 $\mathcal{F}_{1,T}(\mathbf{q}^{(s)}(0), \mathbf{p}^{(s)}(0))$ は $C = 1$ での運動方程式 (30), (31) の時間 T の積分で定義される. 初期状態が周期軌道上の点であるためには $(\mathbf{q}^{(s)}(0), \mathbf{p}^{(s)}(0))$ に対する方程式

$$\mathcal{F}_{1,T}(\mathbf{q}^{(s)}(0), \mathbf{p}^{(s)}(0)) = (\mathbf{q}^{(s)}(0), \mathbf{p}^{(s)}(0)). \quad (35)$$

を満足する必要がある. 方程式 (35) の数値解について, Step 2 で得られた (34) の解 $(a_1, \dots, a_N, 0, \dots, 0)$ を $(\mathbf{q}^{(s)}(0), \mathbf{p}^{(s)}(0))$ の試行解として Newton 法を用いて探索する.

4. PISL($C = 0$) において Step 3 で得られた静止型 DB に摂動 (26) を与えることによって速度 $v_{\text{DB}} = r/s$ [site/period] の移動型 DB の近似解を構成する. パラメータ r と s は整数である. 速度 r/s は移動型 DB が s 回の内部振動時間 sT の間に r 格子間隔分移動する事を意味する. ここで $T = 2\pi/\omega_{\text{DB}}$ である. 速度 v_{DB} はある範囲内で摂動パラメータ δl に比例している. そのため所望の移動速度 v_{DB} の移動型 DB を得るための δl を決定することができる.

5. $C \in [0, 1]$ において TASCL を考える. ある与えられた $T = 2\pi/\omega_{\text{DB}}$ と $v_{\text{DB}} = r/s$ に対して写像 $\mathcal{M}_C : \mathbb{R}^{2N} \rightarrow \mathbb{R}^{2N}$ を以下のように定義する.

$$\mathcal{M}_C = (-1)^r \mathcal{S}_r \circ \mathcal{F}_{C,sT}, \quad (36)$$

ここで $\mathcal{S}_r : \mathbb{R}^{2N} \rightarrow \mathbb{R}^{2N}$ は以下の巡回置換を表す写像である.

$$\mathcal{S}_r(q_1, \dots, q_N, p_1, \dots, p_N) = (q_{1-r}, \dots, q_{N-r}, p_{1-r}, \dots, p_{N-r}), \quad (37)$$

もしインデックス i が $i \leq 0$ の場合は $i + N$ とみなす. $(\mathbf{q}^{(t)}(0), \mathbf{p}^{(t)}(0))$ を内部振動数 ω_{DB} , 速度 v_{DB} である移動型 DB の初期状態とする. 初期状態は以下の関係を満足する.

$$\mathcal{M}_C(\mathbf{q}^{(t)}(0), \mathbf{p}^{(t)}(0)) = (\mathbf{q}^{(t)}(0), \mathbf{p}^{(t)}(0)). \quad (38)$$

これは $(\mathbf{q}^{(t)}(0), \mathbf{p}^{(t)}(0))$ に関する方程式であり Newton 法を用いて数值的に厳密な解を探索可能である. このようにして得られた方程式 (38) の解を $\mathbf{X}_C^{(t)}(0) = (\mathbf{q}^{(t)}(0), \mathbf{p}^{(t)}(0))$ とする.

6. PISL($C = 1$) において初期試行解を Step 5 で得られた $\bar{\mathbf{X}}^{(t)}(0)$ として, Newton 法を用いて方程式 (38) の解 $\mathbf{X}_1^{(t)}(0)$ を探索する.
7. Step 6 で得られた解 $\mathbf{X}_1^{(t)}(0)$ を FPU- β 格子 ($C = 0$) の解 $\mathbf{X}_0^{(t)}(0)$ まで延長する. パラメータ C が $C = 0$ になるまで徐々に減らしながら方程式 (38) を繰り返し解くことにより解を延長する. すなわち, $\Delta C > 0$ を微小な定数, $\mathbf{X}_C^{(t)}(0)$ を C における方程式 (38) の解とすると, $C - \Delta C$ での方程式 (38) は初期試行解を $\mathbf{X}_C^{(t)}(0)$ とした Newton 法で解くことができる.

図 2 に解の延長によって PISL から FPU- β まで変化させた移動型 DB の構造を示す. PISL では DB の周りにテイルが存在しないが, FPU- β に近づけるにつれてテイルが出現することが分かる. このように, PISL で得られた滑らかな移動性を示す DB 解を試行解として FPU- β 格子での移動型 DB に解を延長することが可能である. 他の非線形格子においても PISL を起点とした移動型 DB の解の探索が可能であると期待される.

謝 辞

この研究は科学研究費補助金 (No. 19K12003, No. 19K03654) の助成をうけています.

参 考 文 献

- [1] A. J. Sievers and S. Takeno, Phys Rev Lett **61**, 970 (1988).
- [2] S. Flach, Phys. Rev. E, **51**, 1503 (1995).
- [3] G. James, J. Nonlinear Sci., **13**, 27 (2003).
- [4] K. Yoshimura, Japan J. Indust. Appl. Math. **36**, 893 (2019).
- [5] S. Flach and A. V. Gorbach, Phys. Rep. **467**, 1 (2008).
- [6] K. Yoshimura, Y. Doi, and M. Kimura, in *Progress in Nanophotonics 3*, edited by M. Ohtsu and T. Yatsui (Springer International Publishing, Cham, 2015), pp. 119–166.
- [7] V. M. Burlakov, S. A. Kiselev, and V. N. Pyrkov, Phys. Rev. B **42**, 4921 (1990).
- [8] S. Takeno and K. Hori, J. Phys. Soc. Jpn. **60**, 947 (1991).
- [9] K. Hori and S. Takeno, J. Phys. Soc. Jpn. **61**, 4263 (1992).
- [10] K. W. Sandusky, J. B. Page, and K. E. Schmidt, Phys. Rev. B **46**, 6161 (1992).

- [11] K. Yoshimura and Y. Doi, IEICE Tech Rep **118**, 15 (2019).
- [12] S. Aubry and T. Cretegny, Phys. Nonlinear Phenom. **119**, 34 (1998).
- [13] S. Aubry, Phys. Nonlinear Phenom. **216**, 1 (2006).
- [14] Y. S. Kivshar and D. K. Campbell, Phys. Rev. E **48**, 3077 (1993).
- [15] M. Johansson and P. Jason, in *Quodons in Mica: Nonlinear Localized Travelling Excitations in Crystals*, edited by J. F. R. Archilla, N. Jiménez, V. J. Sánchez-Morcillo, and L. M. García-Raffi (Springer International Publishing, Cham, 2015), Springer Series in Materials Science, pp. 147–178.
- [16] K. Yoshimura and Y. Doi, Wave Motion **45**, 83 (2007).
- [17] Y. Doi and K. Yoshimura, J. Phys. Soc. Jpn. **78**, 034401 (2009).
- [18] Y. Doi and K. Yoshimura, Phys. Rev. Lett. **117**, 014101 (2016).

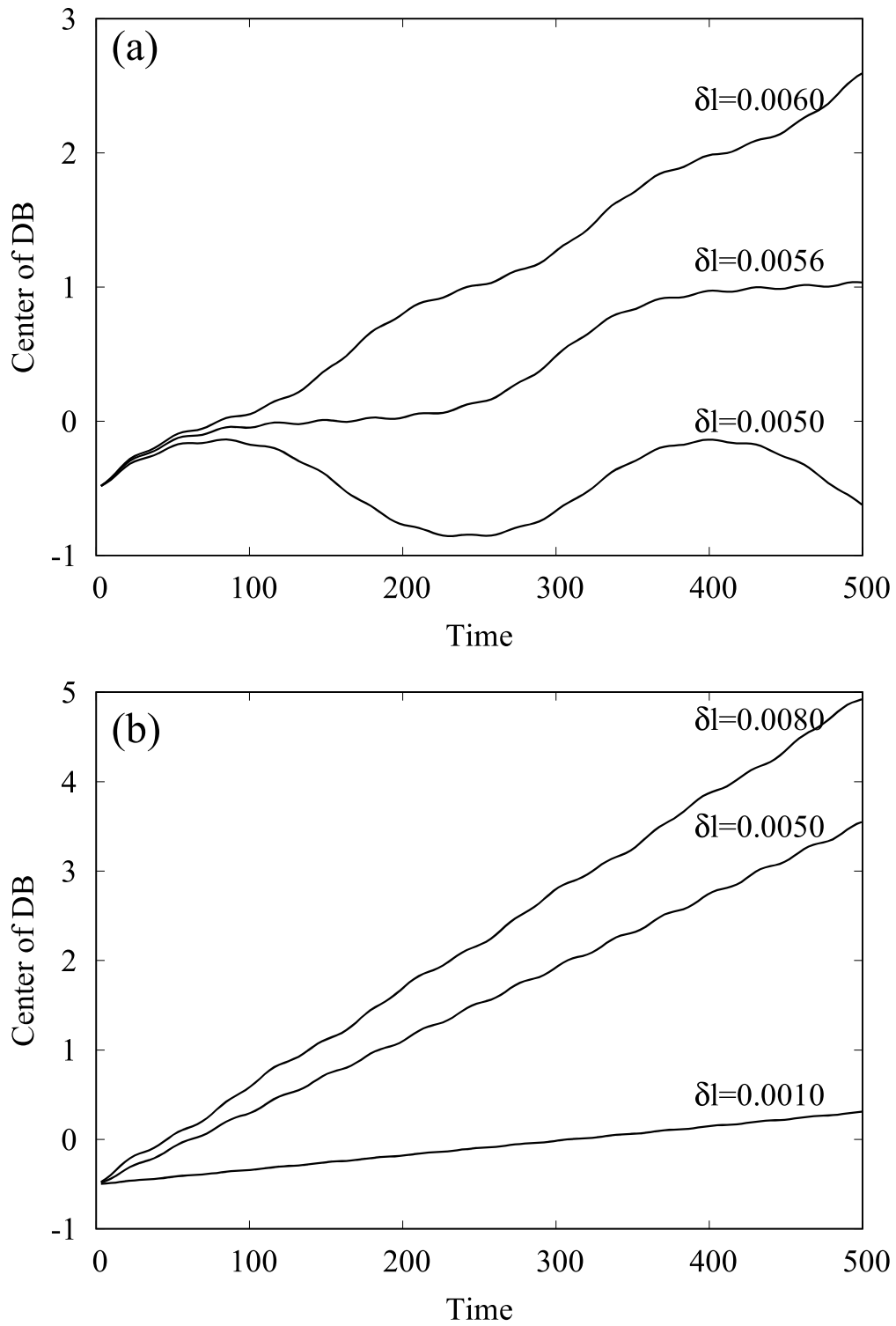
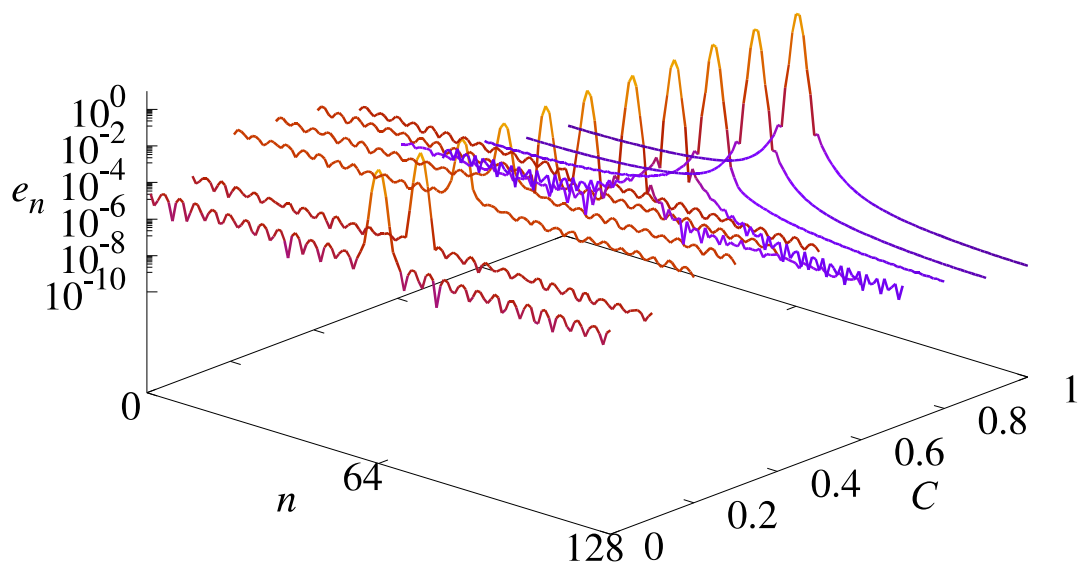


Fig. 1: Trajectories of traveling DB perturbed by Eq. (26): (a)FPU- β and (b)PISL.



⊠ 2: Structure of traveling DB in TASCL.