

# 非線形局在モードの衝突の数値シミュレーション

京大院・工 土井 祐介(Yusuke Doi)<sup>1</sup>  
Graduate School of Engineering,  
Kyoto Univ.

## 1.はじめに

1988年の Sievers および Takeno による報告以来[1]、非線形局在モード(Intrinsic Localized Mode, ILM)について数多くの研究がなされてきた[2]。非線形局在モードは非線形性を有する離散格子系において、不純物などの介在なしに出現する局在振動である。不純物上に束縛されないことから格子系の任意の位置に出現し、また格子中をソリトンのように移動することも可能である。実際、移動型の非線形局在モードは数値シミュレーションによって得られている。

格子系を伝播していく移動型の非線形局在モードの性質の中で、衝突時の振る舞いは興味のあるものの一つである。ソリトンはその名前の由来のとおり衝突によって壊れることはない。一方、非線形局在モードの衝突については、ある種のエネルギーのやり取りが存在すると考えられている。非線形局在モードの衝突については Forinash らが移動型非線形局在モードと静止した非線形不純物モードの衝突、Bang らが移動型非線形局在モードと静止型非線形局在モードの衝突について研究を行っている[3,4]。

Cretegnny らは3次の非線形相互作用ポテンシャルで記述される  $\beta$ -FPU 格子系において、高波数  $\pi$  モードの変調不安定について数値シミュレーションを行っている[5]。それによると、 $\pi$  モードの変調不安定によって系にはほぼ等間隔に非線形局在モードが出現し、それらが移動しながら互いに衝突を繰り返した結果、ある時間経過の後に、大きな振幅(エネルギー)をもつ非線形局在モードがひとつだけ残るという結果が得られている。Cretegnny らはこの結果について、エネルギーの大きさが異なる2つ非線形局在モードが衝突する時に、大きなエネルギーの非線形局在モードが、小さい方のエネルギーを吸収することによって、さらに大きなエネルギーをもつようになるためとしている。

しかし、非線形局在モードの衝突時の振る舞いについてはよく分かっていない点が多い。特に衝突作用中のエネルギー交換について詳細に調べた例はみられない。これは、非線形局在モードの解析解が得られていないことから、解析的な議論が行えないことにも一因がある。したがって、数値シミュレーションを行い、その結果を検討することによって現象の理解を深めていく必要がある。

---

<sup>1</sup> e-mail:yusuke\_doi@kuaero.kyoto-u.ac.jp

本稿では、非線形局在モードの衝突時の振る舞いについて、振動の位相差とエネルギー交換の關係に着目して数値シミュレーションを行う。その結果に基づいて、非線形局在モードの衝突時のエネルギーの交換過程について考察する。

## 2. 移動型非線形局在モードについて

本稿で取り扱う移動型の非線形局在モードについて簡単に説明する。静止型の非線形局在モードには対称性の違いから Sievers-Takeno モード(ST モード)と Page モード(P モード)が存在することが知られている[6]。これは、局在モードのピークが格子点上にあるか、格子点と格子点の中央にあるかの違いによって生じる(図 1)。移動型非線形局在モードではピークが系を移動していくので系を伝播しながら、ST モードおよび P モードの状態を移り変わる。Kivshar らによると非可積分系では ST モードと P モードとの間にエネルギー差が存在し、移動型の非線形局在モードは系を伝播するにつれて状態遷移のためのエネルギー障壁を越えるためにエネルギーを失っていく[7]。しかし、今回取り扱う衝突現象では、その開始から終了までの時間スケールでの減少量は無視しても問題ないと評価した。したがって、今回のシミュレーションでは非線形局在モードのエネルギーの変化は衝突作用による非線形局在モード同士のエネルギー交換のみによるものとする。

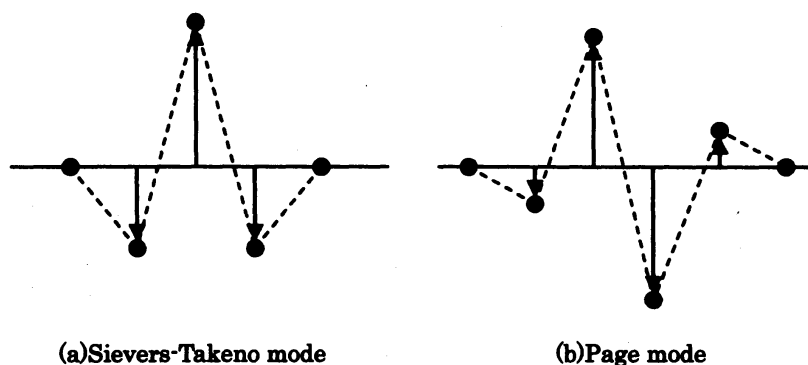


図 1 対称性の異なるモード

## 3. 計算モデル

数値シミュレーションを行うモデルを説明する。系は 1 次元離散格子系( $\beta$ -FPU 系)とする。各格子点の質量  $m_i$  は均一で  $m_i = 1$  とする。各格子点は最近接格子点のみと相互作用し、その相互作用ポテンシャルは  $k_2 - k_4$  ポテンシャル

$$\Phi(r) = \frac{1}{2}r^2 + \frac{1}{4}\beta r^4 \quad (1)$$

とする。ここで  $r$  は格子間隔のつりあいの長さからのずれである。 $\beta$  は非線形性の大きさを表すパラメータであるが、今回のシミュレーションでは  $\beta = 4$  とする。また、系の格子数は  $N = 1000$  とし、境界条件は周期境界条件とする。すなわち、変位( $x_i$ )および運動量( $p_i = \dot{x}_i$ )が系の両端の

$$\begin{aligned} x_0 &= x_N, p_0 = p_N \\ x_{N+1} &= x_1, p_{N+1} = p_1 \end{aligned} \quad (2)$$

となる。

この条件の下で、各格子点のつりあいの位置からの変位  $u_i$  の時間変化を記述する運動方程式は、

$$\ddot{u}_i = u_{i-1} + u_{i+1} - 2u_i + \beta(u_{i-1} - u_i)^3 + \beta(u_{i+1} - u_i)^3 \quad (1 \leq i \leq N) \quad (3)$$

と与えられる。

次に以下で用いる種々のパラメータを定義しておく。

格子点のエネルギー  $e_i$  は、その点の運動エネルギーと、格子点の両側の最近接格子点との相互作用のポテンシャルエネルギーをそれぞれ半分ずつ足し合わせたものとする。

$$e_i = \frac{1}{2}\dot{u}_i^2 + \frac{1}{2}(\Phi(u_i - u_{i-1}) + \Phi(u_{i+1} - u_i)) \quad (4)$$

次に非線形局在モードのエネルギーを定義する。局在モード中の格子エネルギーの最大値  $e_{\max}$  に対して、エネルギーが  $e_{\max}$  から単調減少かつ、 $e_{\max}$  の 5% より大きなエネルギーをもつという条件を満たしている点の集合を非線形局在モードの範囲とし、その範囲内にある格子点のエネルギーの総和を非線形局在モードのエネルギー  $E$  とする。

$$E = \sum_{e_i \geq 0.05e_{\max}} e_i \quad (5)$$

非線形局在モードの振動の位相は、局在モード中の格子エネルギーが最大となる格子点の振動の位相で代表させる。

#### 4. シミュレーション方法

非線形局在モードの衝突のシミュレーション方法を示す。まず、衝突のシミュレーションに用いる非線形局在モードを数値的につくる。具体的には、初期擾乱として

$$\begin{aligned} u_{N/2-1} &= -\frac{a_0}{2}, \dot{u}_{N/2-1} = v \\ u_{N/2} &= a_0, \dot{u}_{N/2} = 0 \\ u_{N/2+1} &= -\frac{a_0}{2}, \dot{u}_{N/2+1} = -v \\ u_i &= 0, \dot{u}_i = 0 \quad (i: \text{その他}) \end{aligned} \quad (6)$$

を系に与え、その後の時間発展を計算する。図 1 に計算の一例を示す。この図のように初期擾乱から非線形局在モードが系にあらわれる。出現する非線形局在モードの振幅は初期擾乱の振幅  $a_0$  に依存している。さまざまな  $a_0$  に対して得られる非線形局在モードを系から取り出し保存しておく。図 2 に数値的に得られた非線形局在モードの横幅、振動周波数のエネルギー依存性を示す。図から、エネルギー - 横幅関係とエネルギー - 振動周波数関係はそれぞれ 1 つの曲線となっており、一対一に対応していることが分かる。したがって、非線形局在モードのエネルギーを決める

とその非線形局在モードが一意に定まる。

上述の方法で数値的に得られた非線形局在モードの2つを取り出して、十分に離れた位置に配置する。これを初期条件としてその後の時間発展を運動方程式(3)を数値積分することによって調べる。数値積分にはシンプレクティック数値積分法を用いた。得られた結果から、衝突作用中の非線形局在モードのエネルギーおよび振動の位相を調べた。

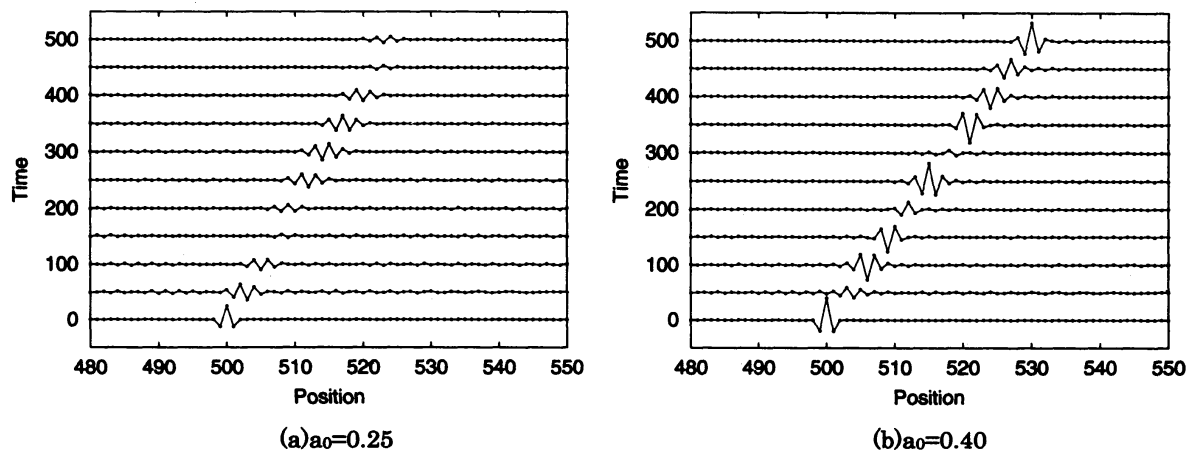
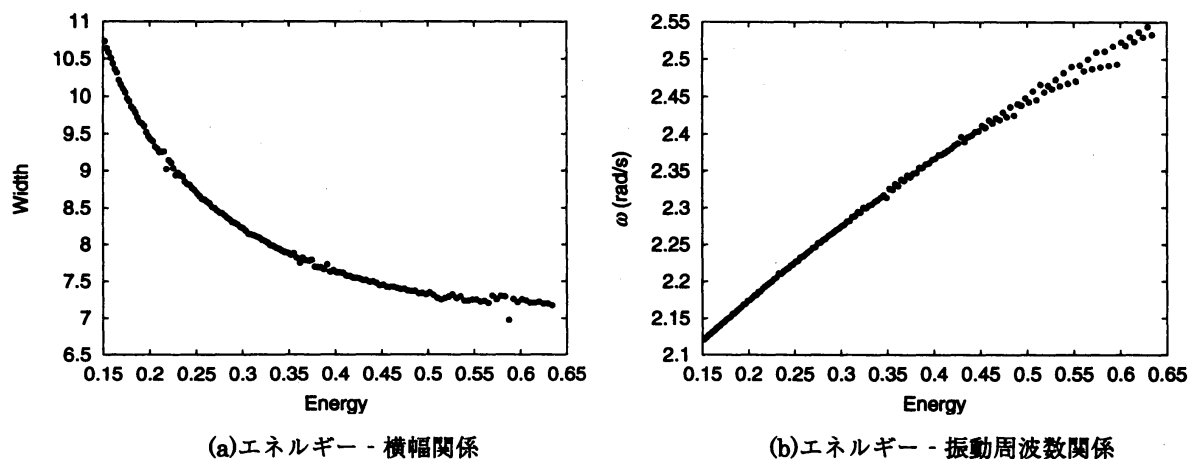


図2 初期擾乱(6)に対する非線形局在モードの生成の様子



(a)エネルギー - 横幅関係

(b)エネルギー - 振動周波数関係

図3 非線形局在モードの横幅・振動周波数のエネルギー依存性

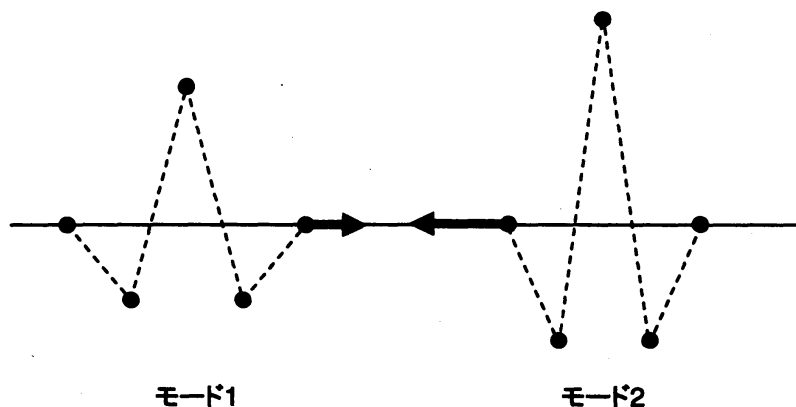


図4 シミュレーションの初期設定

## 5. シミュレーション結果

数値シミュレーション結果として、衝突する非線形局在モードのエネルギー差が(1)0 の場合 ( $E_1(0)=0.60, E_2(0)=0.60$ )、(2)比較的小さい場合 ( $E_1(0)=0.20, E_2(0)=0.25$ )、(3)比較的大きい場合 ( $E_1(0)=0.20, E_2(0)=0.60$ )についてそれぞれ示す。

### 5.1 非線形局在モードのエネルギー差が0の場合

同じエネルギーをもつ2つの非線形局在モードが異なる位相で衝突するときの様子を計算した。計算は位相差が $2\pi$ になるまで $2\pi/200$ 刻みで位相差を変化させて行った。位相差 $\Delta\phi$ は

$$\Delta\phi = \phi_2 - \phi_1 \quad (7)$$

としている。 $\Delta\phi > 0$ のときには、モード2の位相が進んでいるとみなす。ここでは例として位相差 $\Delta\phi$ が $0, \pi/2, \pi, 3\pi/4$ の場合を示す。

図5は位相差が0の場合の衝突の様子を濃淡表示したものである。振幅の大きい部分が淡くなっている。(a)は完全に対称な形を持つ非線形局在モード同士の衝突、(b)はエネルギー、位相は同じであるが対称性がない非線形局在モード同士の衝突の様子である。(a)の場合、二つの非線形局在モードは衝突によって融合し、ある格子点上で静止したまま振動する。この状態はしばらくの間維持される。一方、(b)の場合、一度相互作用した後に異なるエネルギーの非線形局在モードとして離れていく。この場合のエネルギーおよび位相差の変化を図6に示した。衝突後はエネルギー交換の結果、二つの非線形局在モードのエネルギーに差が生じるので振動周波数にも差が生じ、位相差に変化が起こることがわかる。

図7は $\Delta\phi = \pi/2$ 、モード2の位相がモード1の位相より $\pi/2$ 進んでいる場合の結果である。この場合、モード2がモード1からエネルギーを吸収している。一方、図8は $\Delta\phi = -\pi/2$ の場合である。 $\Delta\phi = \pi/2$ の場合とは逆に、モード2がモード1にエネルギーを与えている。

図9は $\Delta\phi = \pi$ 、2つの非線形局在モードが逆位相の場合である。この場合、2つの非線形局在モードはお互いにエネルギーのやり取りを行わない。したがって、振動周波数は変化せず、位相差は $\Delta\phi = 0$ のまま変わらない。

図10は $\Delta\phi = \pi/2$ および $\Delta\phi = -\pi/2$ の場合の衝突の様子を示す。

図11に非線形局在モードの衝突前の位相差と衝突後のエネルギーの関係を示す。横軸は0から $\pi$ までがモード2の位相進み、 $\pi$ から $2\pi$ までが位相遅れである。この図から衝突時には位相の進んでいる非線形局在モードが他方の非線形局在モードからエネルギーを吸収していることが分かる。エネルギーの変化は周期 $2\pi$ で起こっており、エネルギー差は $\Delta\phi = 2\pi$ で最大、 $\Delta\phi = \pi$ で0となっている。

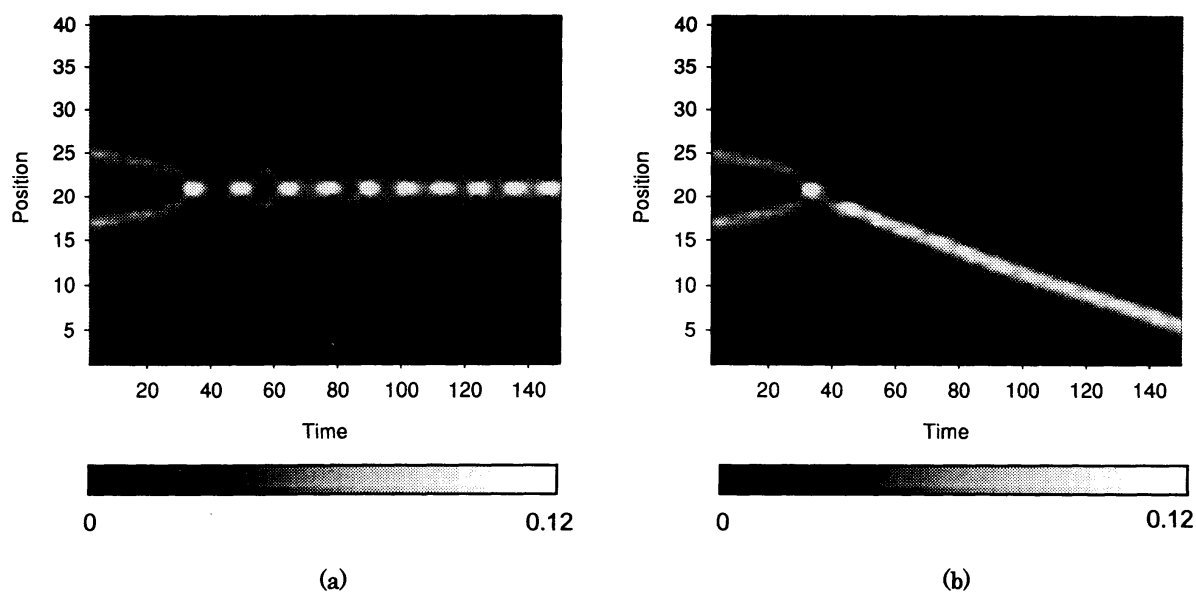


図5 非線形局在モードの移動の様子およびエネルギーの変化( $E_1=0.60$ ,  $E_2=0.60$ , 位相差  $0$ )

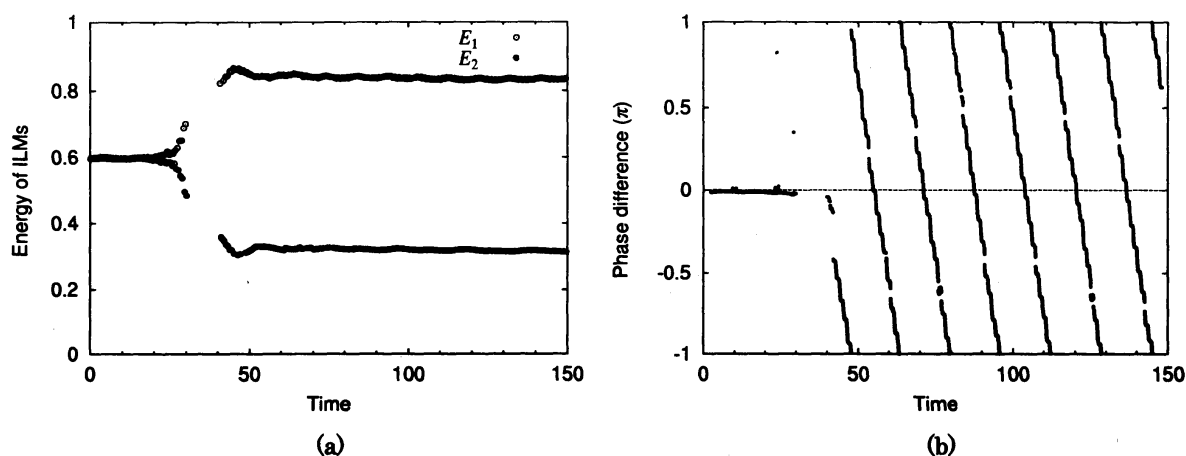


図6 衝突前後の変化の様子( $E_1=0.60$ ,  $E_2=0.60$ ,  $\Delta\phi=0$ ) (a)エネルギー変化 (b)位相差の変化

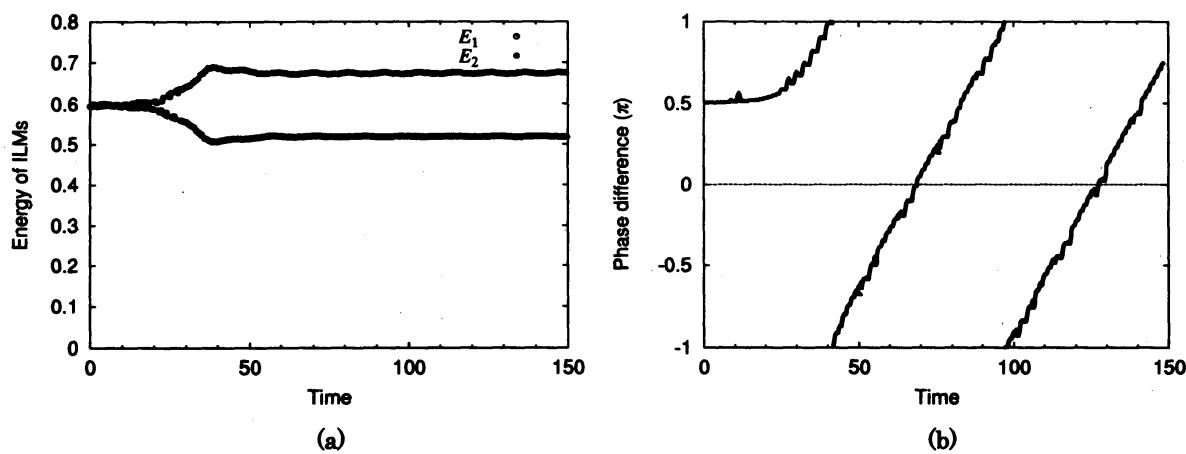


図7 衝突前後の変化の様子( $E_1=0.60$ ,  $E_2=0.60$ ,  $\Delta\phi=\pi/2$ ) (a)エネルギー変化 (b)位相差の変化

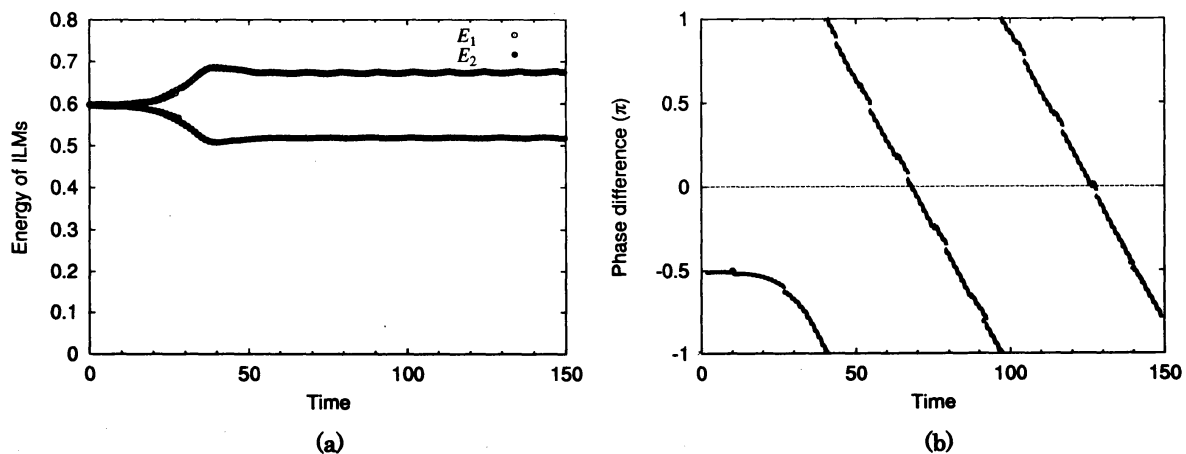


図8 衝突前後の変化の様子( $E_1=0.60$ ,  $E_2=0.60$ ,  $\Delta\phi = -\pi/2$ ) (a)エネルギー変化 (b)位相差の変化

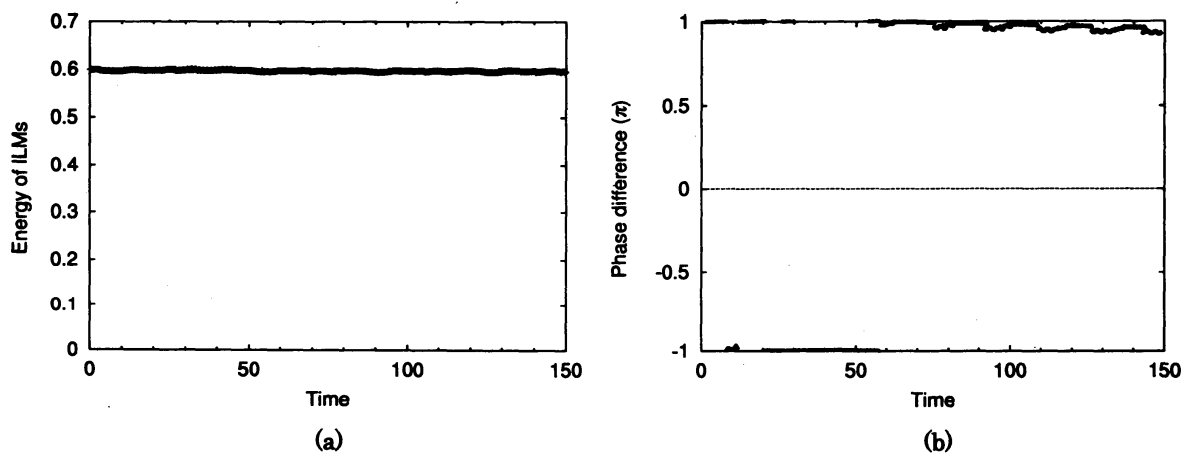


図9 衝突前後の変化の様子( $E_1=0.60$ ,  $E_2=0.60$ ,  $\Delta\phi = \pi$ ) (a)エネルギー変化 (b)位相差の変化

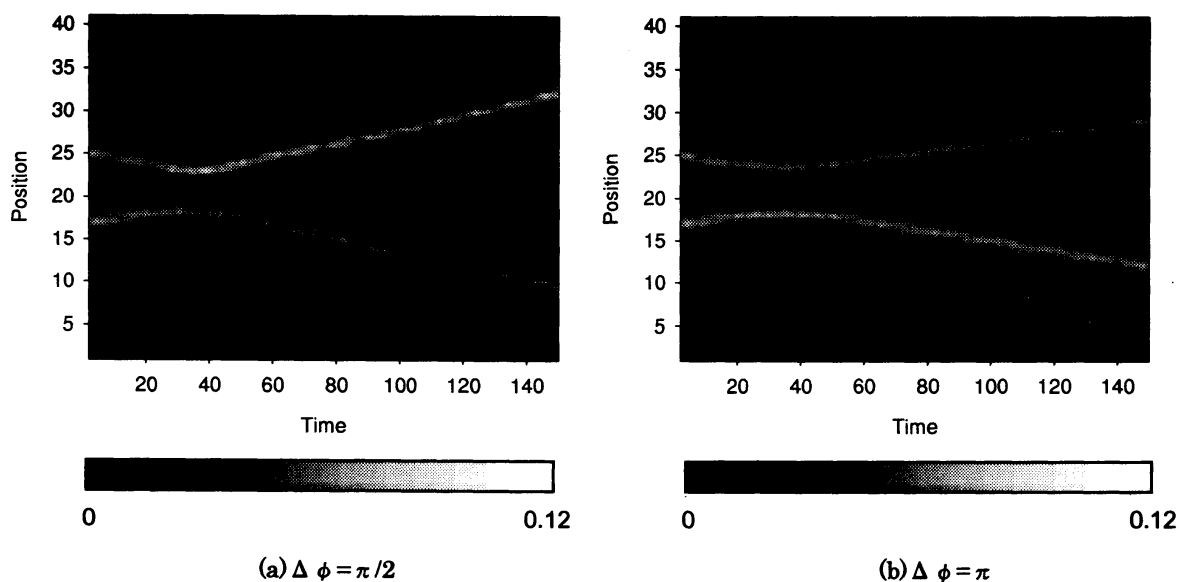


図10 非線形局在モードの移動の様子およびエネルギーの変化( $E_1=0.60$ ,  $E_2=0.60$ )

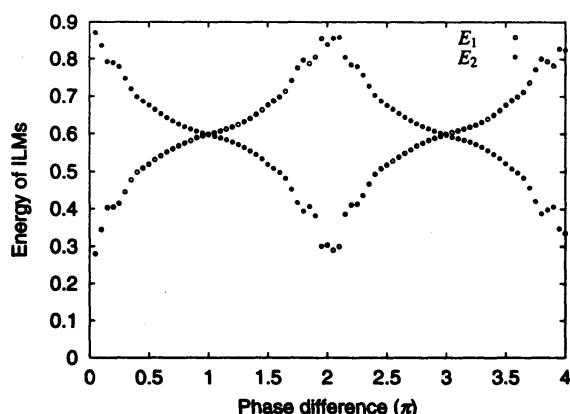


図 11 衝突後のエネルギーの位相差依存性

## 5.2 非線形局在モードのエネルギー差が小さい場合

$E_1=0.20, E_2=0.25$  の場合の結果を示す。前節の同一エネルギーの非線形局在モードの場合と異なり、2つのモードの位相差は衝突前から変化し続ける。したがって、衝突開始時の位相差については厳密に決定することができなかった。ここでは例を4つ示す。

衝突中のエネルギーの変化を見ると、位相が進んでいる非線形局在モードが他方からエネルギーを吸収していることが分かる。図 12(a)(b)では、衝突開始時にはモード2がモード1よりも位相が進んでおり、エネルギーが大きくなるが、位相進みが $\pi$ を超えることで位相遅れとなり、エネルギーも小さくなっていく。一方、図 12(c)(d)では、衝突開始時にはモード2の位相がモード1よりも遅れており、モード2のエネルギーが小さくなっていく。そして、ある時刻でモード1とモード2のエネルギーの大きさが逆転する。その結果、2つのモードの振動周波数の大きさも逆転し、位相差の変化の方向が逆になる。その後、位相遅れから位相進みへと変わり、モード2のエネルギーが減少から増加に転じるが、結局衝突の前後では、モード1とモード2のエネルギーの大きさが逆転する。

また、この計算結果では非線形局在モードのエネルギー増加・減少の変化は一回である。これは衝突前の位相差の変化速度は  $0.082 \times 2\pi$  (rad/s) と比較的小さく、衝突中の位相進み・遅れの交代が一回であるためである。

図 13 は図 12 の(a)・(d)に対応する局在モードの移動の様子を示している。



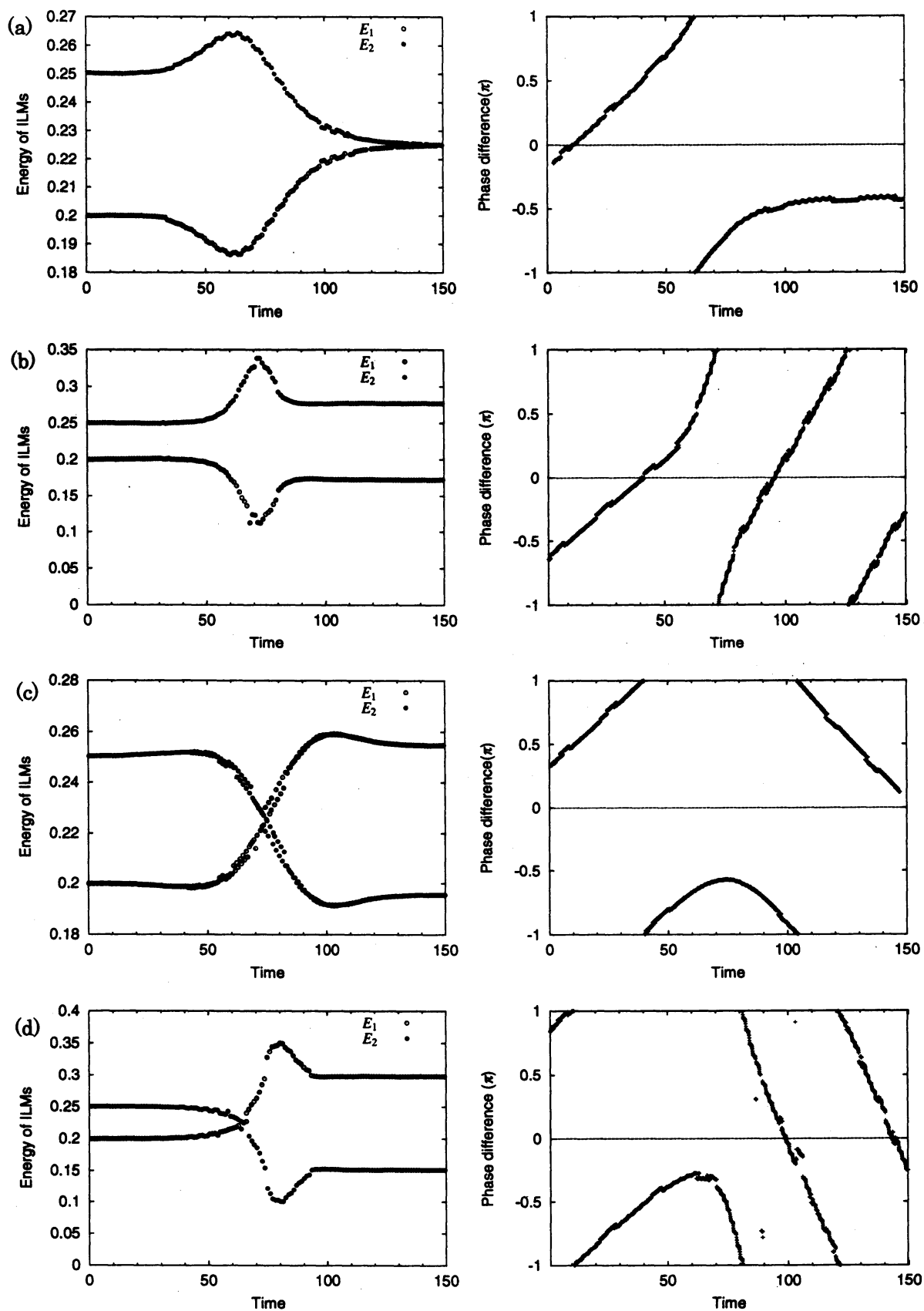


図 12 衝突作用中の変化の様子( $E_1=0.20$ ,  $E_2=0.25$ ) 左側:エネルギー 右側:位相差

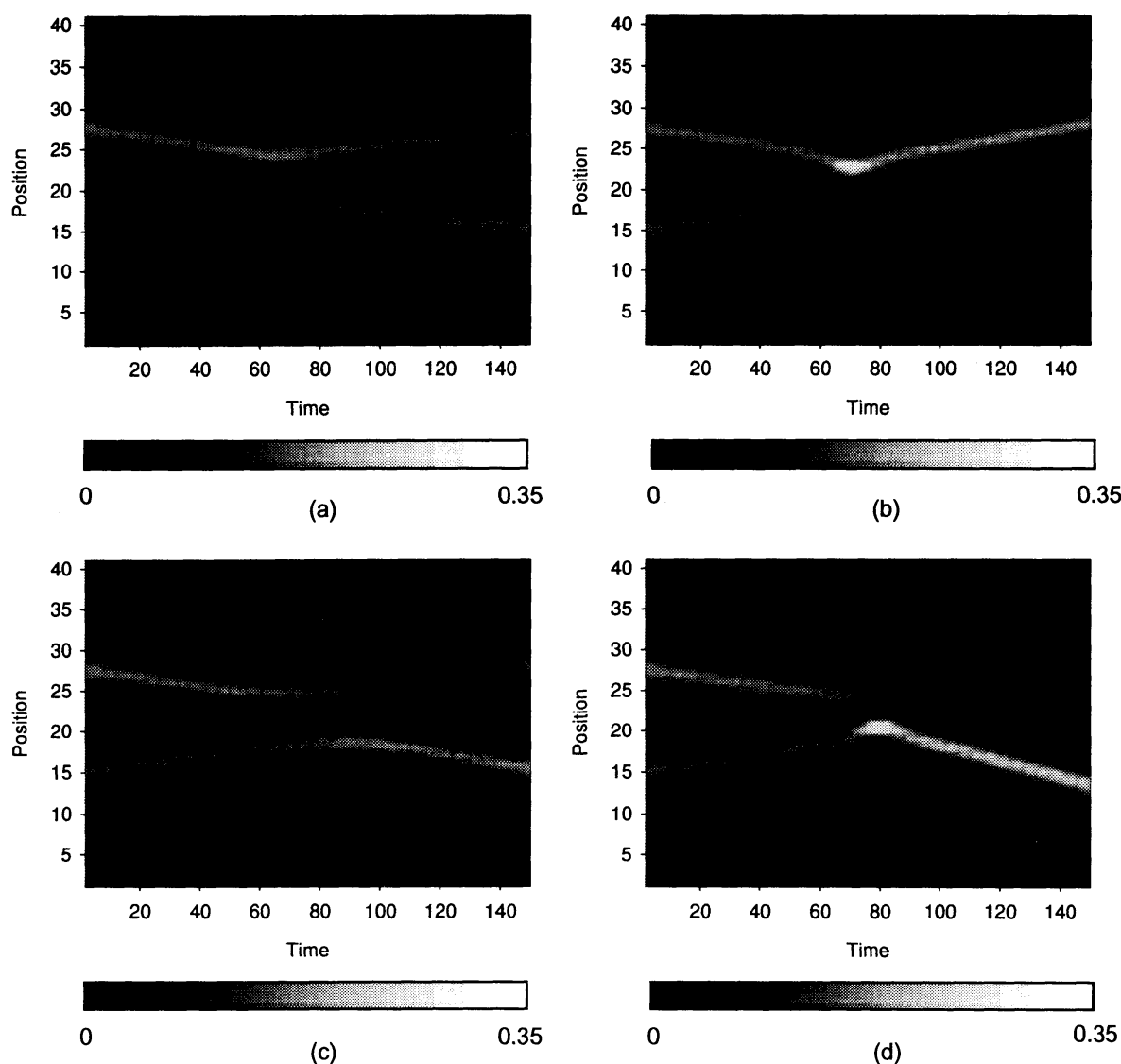


図 13 非線形局在モードの移動の様子およびエネルギーの変化( $E_1=0.20, E_2=0.25$ )

### 5.3 非線形局在モードのエネルギー差が大きい場合

$E_1=0.20, E_2=0.60$  の場合の結果を図 14 に示す。これまでの結果と同様、位相が進んでいる非線形局在モードが他方からエネルギーを吸収している。しかし、エネルギーのやり取りに着目すると図 12 とは異なり、非線形局在モードはエネルギーの増減を何度も繰り返している。これは、衝突前の 2 つの局在モードの位相差の変化速度が  $0.0541 \times 2\pi$  (rad/s) と  $E_1=0.20, E_2=0.25$  の場合よりも約 7 倍大きいからであると考えられる。位相差が短時間に大きく変化することによって非線形局在モードは衝突作用中に何度も位相遅れと位相進みの状態を移り変わる。その結果、2 つの非線形局在モードは何度もエネルギーのやり取りを行う。

また、 $E_1=0.20, E_2=0.25$  の場合と異なり、2 つの非線形局在モードのエネルギーの大きさが逆転することはない。これはもともと 2 つの局在モードのエネルギーが大きく離れているため、また、

位相進み・遅れによるエネルギーの吸収・放出の方向がめまぐるしく変わることによって、一回あたりのエネルギーの吸収量・放出量が少なくなり、一方向へのエネルギーの移動が制限されてしまうためである。

図 15 に非線形局在モードの移動の様子および、エネルギーの変化を示しているが、図 13 に比べると、何度も相互にエネルギーのやり取りをしている様子が分かる。

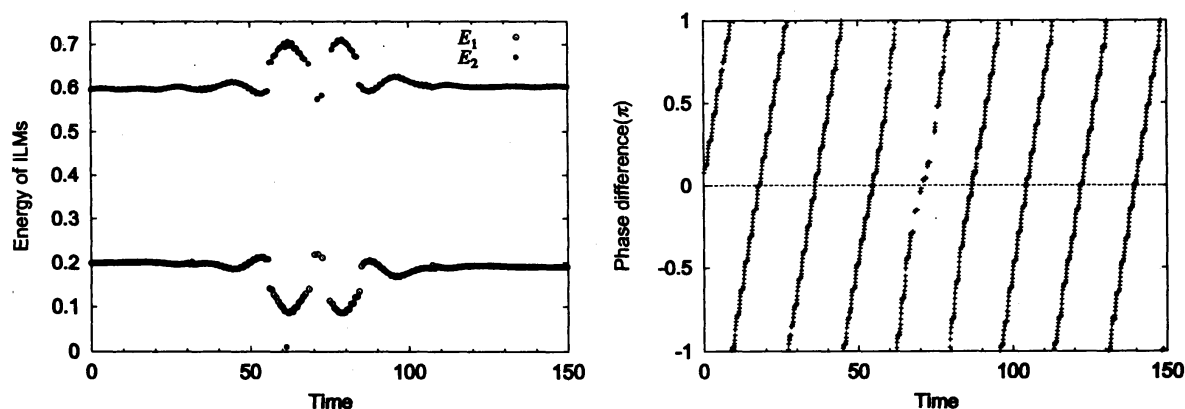


図 14 衝突作用中の変化の様子( $E_1=0.20, E_2=0.60$ ) 左側:エネルギー 右側:位相差

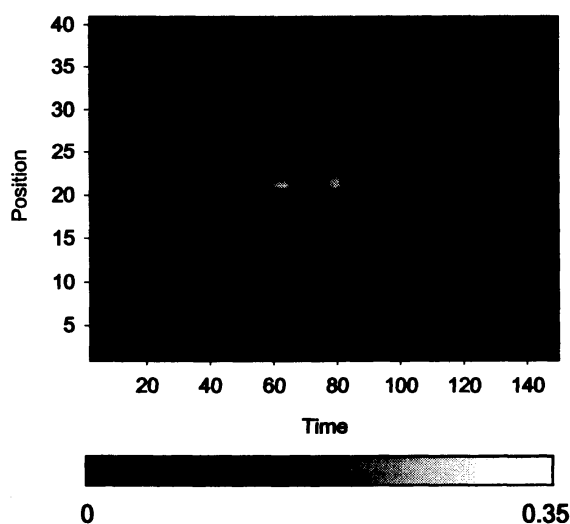


図 15 非線形局在モードの移動の様子およびエネルギーの変化( $E_1=0.20, E_2=0.60$ )

## 6. 考察

シミュレーション結果から、非線形局在モードの衝突時のエネルギーの交換について考察する。衝突する 2 つの非線形局在モードの位相差とエネルギーの交換に着目すると、位相が進んでいる非線形局在モードが他方の非線形局在モードからエネルギーを吸収していることが分かる。そのエネルギーの移動率は  $\Delta \phi = \pi/2, -\pi/2$  の時に最も大きくなり、 $\Delta \phi = 0, \pi$  ではエネルギーのやり取りが行われぬ。非線形局在モードのエネルギー交換は振動の位相差に依存しているといえる。

図 16 に衝突する非線形局在モードのエネルギーが異なる場合の、衝突前のある時刻での 2 つの

非線形局在モードの位相差と衝突後のエネルギーとの関係を示した(前述のとおり、衝突開始の時刻を明確に決定できないため、衝突開始時の位相差が定義できないので任意の時刻での位相差をとっている)。この結果を見ると、衝突後の非線形局在モードの状態は、周期  $2\pi$  で変化していることが分かる。したがって、衝突後の非線形局在モードのエネルギー、および、衝突中の正味のエネルギー交換量は衝突前の位相差によって決まるといえる。

次に、衝突前の2つの非線形局在モードのエネルギー差と、衝突時の振る舞いの関係について考える。正味のエネルギー交換量についてみてみると、衝突前のエネルギー差が小さい場合にエネルギーがより多く移動していることがわかる。これは、エネルギー差が小さい場合には2つの非線形局在モードの位相差の変化量が小さく、1回の位相進み(遅れ)の状態が長く続くことで、エネルギー増加(減少)が長く継続するためだと考えられる。逆にエネルギー差が大きい場合、衝突作用中に位相進み・遅れが何度も入れ替わるので1回あたりのエネルギー移動が小さくなる。したがって、非線形局在モードは十分にエネルギーを交換できない。

もともとのエネルギー差が小さく、衝突開始時の位相差の変化が小さい場合、エネルギーの交換によってエネルギー差が変化し、位相差の変化速度が変わる。例えば、衝突開始時に  $\Delta\phi > 0$  ならば、モード間のエネルギー差が広がっていく。その結果、位相差の変化率が大きくなり、 $\Delta\phi < 0$  の状態でエネルギー差を縮める状態へと早く変わろうとする。逆に、衝突開始時に  $\Delta\phi < 0$  の状態ならばモード間のエネルギー差が小さくなっていく。この結果、位相差の変化率は小さくなり、エネルギー差の縮小を長く継続させて、最終的には2つのモードのエネルギーの大きさが逆転するように作用する。そしてエネルギーの大小が逆転して逆方向にエネルギー差が広がり始めると、エネルギーの差を縮める作用へと移動しようとする。このようなエネルギー移動にブレーキをかける作用によって、片方の非線形局在モードが一定以上のエネルギーを吸収できないようになっていくと考えられる。したがって、衝突によって、非線形局在モードが消滅するほどのエネルギーの移動は起こらない。一方、衝突前のエネルギー差が大きい場合は、もともとの位相の変化率が大きいので、エネルギー差の変化による位相の変化速度の増減は、あまりエネルギー交換に影響を与えない。逆に言えば、エネルギーの一定以上の移動を阻害する作用が現れるほどに、エネルギーの交換が行われない。

最後に Cretegnny らの結果との比較を行う。衝突作用時のエネルギー変化を解析することによって、衝突前後で2つの非線形局在モードのエネルギーの大小が入れ替わってしまう結果が得られた。これは非線形局在モードの衝突時における「大きいエネルギーをもつ非線形局在モードがより大きくなる」という説明とは異なる結果である。ただし、衝突前後の非線形局在モードについてそのエネルギー交換過程を無視し、生成したモードのエネルギーの大小のみに着目すると、2つのモードのエネルギー差が大きくなっている場合が多いのは事実である。衝突後の非線形局在モードのエネルギー差が衝突前の結果よりもシフトしているこの現象は、今回の位相差によるエネルギー移動のメカニズムのみでは説明ができない。これらの点についての説明は今後の課題で

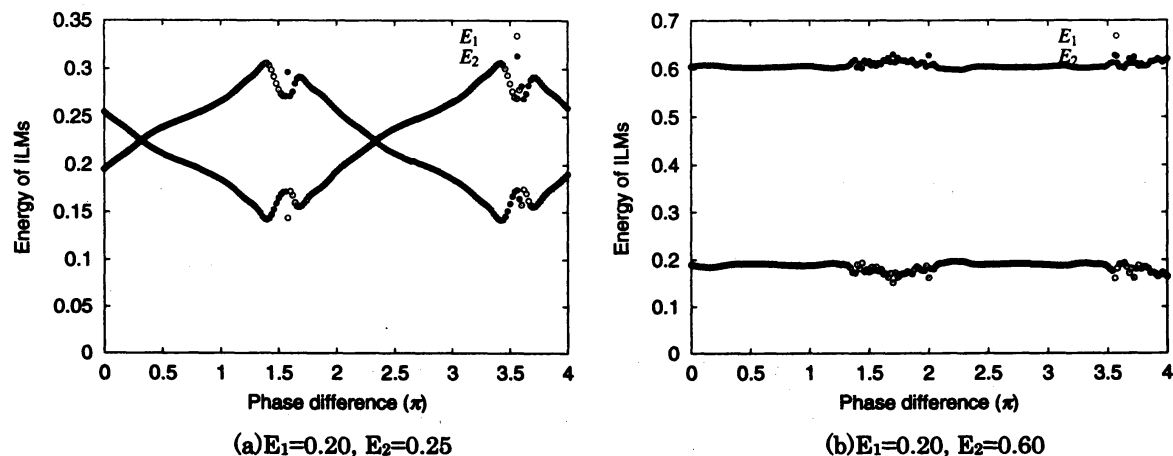


図 16 衝突後のエネルギーの位相差依存性

## 7.終わりに

本研究では非線形局在モードの衝突時のエネルギーの交換について、2つの非線形局在モードの位相差に着目して数値シミュレーションを行った。その結果、衝突後の非線形局在モードのエネルギーが位相差に依存していること、そしてエネルギー交換のメカニズムについて一定の説明をすることができた。今後は、なぜ衝突後にモード間のエネルギー差が広がる場合が多いのか等、残された課題の解決を目指して解析を進めたい。

## 参考文献

- [1] A. J. Sievers and S. Takeno, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 970 (1988).
- [2] S. Flach, C. R. Willis, *Phys. Rep.* **295**, 181 (1998).
- [3] K. Forinash, M. Peyrard, B. Malomed, *Phys. Rev. E* **49**, 3400 (1994).
- [4] O. Bang, M. Peyrard, *Phys. Rev. E* **53**, 4143 (1996).
- [5] T. Cretegny, T. Dauxois, S. Ruffo, A. Torcini, *Physica D* **121**, 109 (1998).
- [6] J. B. Page, *Phys. Rev. B* **41**, 7835 (1990).
- [7] Y. S. Kivshar, D. K. Campbell, *Phys. Rev. E* **48**, 3077 (1993).