

不均一性をもつ 1 次元 Fermi-Pasta-Ulam 格子系における エネルギー局在

京大院・工 土井 祐介(Yusuke Doi)¹
Graduate School of Engineering,
Kyoto University

1. はじめに

1988 年の発表以来[1], 非線形局在モードの研究は様々になされてきている[2]. 非線形性に起因する局在波動としてソリトンとの類似性を連想するが, 非線形局在モードはその振動が格子スケールであることがソリトンと大きく異なっている. この差異は, 最も大きく局在したときには格子点数にエネルギーが集中するという点, また, 対象性の異なる 2 つの静止型モードが存在しその 2 つのモードのエネルギー差(Peierls-Nabarro ポテンシャル)が非線形局在モードの振る舞いに大きな影響を与える点[3]などに現れる. 振動が格子スケールであることから, 非線形局在モードは格子スケールでの格子の構造と鋭敏に相互作用することが予想される. 実際, 非線形局在モードは系の不純物の質量に応じて様々に相互作用をすること[4], また異なる種類の格子の接合部においての相互作用[5]などが報告されている. 一方, 系に多数の非線形局在モードが存在する場合, これらの非線形局在モードが相互に衝突を繰り返すことによってより少数の大きな非線形局在モードが形成され, 最終的に唯一の非線形局在モードが残るというカオスのブリーザーという現象が存在する[6,7]. 本報告では系に不均一性がある場合, このカオスのブリーザーがどのような影響を受けるかについて数値シミュレーションによって解析する.

2. カオスのブリーザーとは

非線形性を有する格子系において短波長の初期条件(π モード)に微小擾乱を加え, その時間発展を調べると, 変調不安定によって系に多数の非線形局在モードが出現し, それらが自由に動き回りながら衝突を繰り返すという結果が得られる. 衝突時にはそれぞれのモードがエネルギーを交換するが, 衝突を繰り返した結果, いくつかの非線形局在モードが他のモードからエネルギーを吸収して成長し, 最終的には系に大きなエネルギーを持った非線形局在モードが 1 つだけ残る. このただひとつ残った非線形局在モードはしばらくの間, 系を不規則に動き回るが, 最終的には壊れてしまいエネルギーは系全体に拡散する. これらの現象は Burlakov らによって報告され[6], 後に Cretegnny らによってカオスのブリーザー(Chaotic breather)と名付けられた[7]. 特に, Fermi-Pasta-Ulam(FPU)系において長波長の初期条件において変調不安定からいわゆる再帰現象が観測されることと対比できる興味深い現象であるといえる.

3. 計算モデル

最近接格子点の相互作用ポテンシャルが調和ポテンシャルと 4 次の非調和ポテンシャルの和で与えられる FPU- β 格子系を考える. すなわち系の Hamiltonian は

¹ e-mail:yusuke_doi@kuaero.kyoto-u.ac.jp

$$H = \sum_i \left(\frac{1}{2} \alpha u_i^2 + \frac{1}{4} \beta u_i^4 \right)$$

であたえられる。ここで u_i は格子間隔のつりあいの間隔からのずれである。このとき各質点の運動方程式は

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

であたえられる。均一 ($m_i = 1$) な FPU- β 格子系においては前述の非線形局在モードおよびカオスのブリーザーが存在し、それらは様々に解析されている。

今回は質点に周期的な構造を考慮することによって不均一を導入する。すなわち 2 種類の異なる質量 ($m_1 = 1$, $m_2 = m_{imp}$) の質点が d 個ずつ周期的に並んでいる系を考える (図 1)。ここで系固有のパラメータは α , β , m_{imp} および d である。格子数 n は 100, 境界は周期境界条件とする。この後の数値シミュレーションでは $\alpha = 1$ とする。

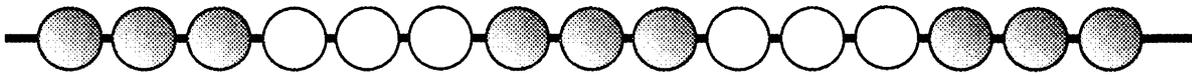


図 1 モデルの模式図

4. 数値シミュレーション

上述の系に初期条件として

$$\begin{aligned} u_i(0) &= a_0 (-1)^i \\ \dot{u}_i(0) &= O(10^{-14}) \end{aligned}$$

なる変位と初期擾乱を与えて、カオスのブリーザーの進展を数値シミュレーションによって調べた。なお、数値積分としては 6 次のシンプレクティック数値積分を用いた。

4-1 線形の場合

まず、線形の場合 ($\beta = 0$) の計算結果を示す。図 2(a) は $d = 25$ の場合の各格子点のエネルギーの大きさを濃淡で示したものである。この場合、系に均等に与えられたエネルギーはすぐに固有モードに対応するように移動していることがわかる。図 2(b) はこのときの 2 種類の質点の領域へのエネルギーの分配の様子を表したものである。エネルギーは振動に応じて領域の間を移動しているもののその変化の様子は時間に対して周期的であることがわかる。

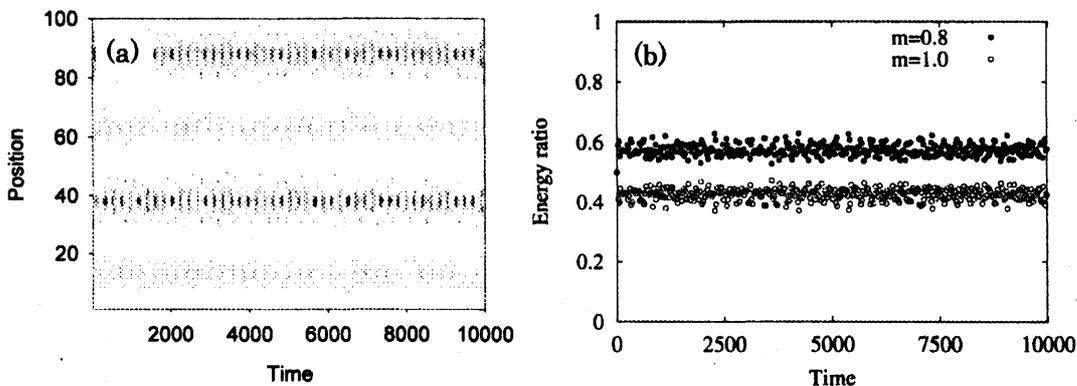


図 2 線形の場合の各格子点のエネルギー変化

4-2 非線形の場合

次に、 $\beta=4$ の場合の計算結果を示す。図 3 左に $d=1, 2, 10$ および 50 の場合の各格子点のエネルギーの変化の様子を示す。先ほどの線形の場合と異なりエネルギーが格子点数に集中する非線形局在モードが励起されているのがわかる。均一な系においてはこの非線形局在モードは系の中を自由に移動することが報告されている。しかし、今回のように系に周期的な不均一性を導入すると非線形局在モードの振る舞いは周期的構造の大きさに応じて変化する。まず $d=1$ の場合、均一系の場合と同様に衝突によって系に少数の大きなエネルギーを持つ非線形局在モードが生成し系の中を伝播している。次に $d=2$ の場合、衝突の結果生まれた大きな非線形局在モードは格子点上に捕捉されているのがわかる。さらに $d=10$ の場合、励起された非線形局在モードはお互いに十分に相互作用をする前に周期構造に捕捉されていることがわかる。捕捉された非線形局在モードはその周期構造の中を往復するだけで構造の外に出ることはできない。最後に $d=50$ の場合、それぞれの周期構造の中で非線形局在モードが衝突を繰り返しカオスのブリーザー的な振る舞いをしているのがわかる。

それぞれの場合の各領域へのエネルギー配分の様子を図 3 右に示す。非線形局在モードが生成されそれらが周期構造の影響を受けることから、エネルギー配分の様子は線形の場合とは大きく異なっている。一般に、エネルギーの偏在は線形の場合よりも大きくなっている。また、エネルギーは質量が小さい質点で構成される構造のほうにより多く分配されることがわかる。さらに、エネルギー分配の比率は周期構造の大きさに依存していることもわかる。図 4 にその依存性を示す。この図から周期構造の大きさが $d=5$ から 10 のときにエネルギーの分配が最も偏っていることがわかる。

周期構造中の非線形局在モードの振る舞いを詳しくみるために、系に存在する非線形局在モードのエネルギーとその分布を調べた。図 5-7 にその一例を示す。 $d=1$ の場合、初期には様々なエネルギーの非線形局在モードが系に存在しているが一定時間の後にはエネルギーに 1 つのピークが出現する。またそのピークは時間の経過とともにさらにエネルギーが大きな方向へと移動しているのがわかる。これは均一な系におけるカオスのブリーザーの振る舞いと同様であると考えられる。次に、 $d=10$ の場合、初期から均一ではないエネルギー分布が現れている。またそのエネルギー分布は長時間経過してもほとんど変化しない。これは、捕捉された非線形局在モードがお互いに衝突による相互作用を行なわないため、エネルギーが変化しないからである。最後に $d=50$ の場合は、初期には $d=1$ の場合と同様に様々なエネルギーの非線形局在モードが系に存在しているが、時間の経過とともにエネルギー分布に 2 つのピークが観測されるようになる。これは 2 つの異なる質点の領域それぞれでカオスのブリーザーの過程が進行するためだと考えられる。

4-3 熱平衡状態

非線形性が大きくなった場合の例として $\beta=10$ の場合の計算結果を図 8 に示す。この場合、 $\beta=4$ と同じタイムスケールでカオスのブリーザーが減衰し系全体が熱平衡状態へと移行している。熱平衡状態においては周期構造に捕捉されていた非線形局在モードは壊れている。また周期構造中に偏在していたエネルギーは熱平衡状態においては系全体に均一に分散している。この結果は線形系においては長時間経過の後にも固有モードとしてエネルギーがある程度偏在しているのとは異なっている。

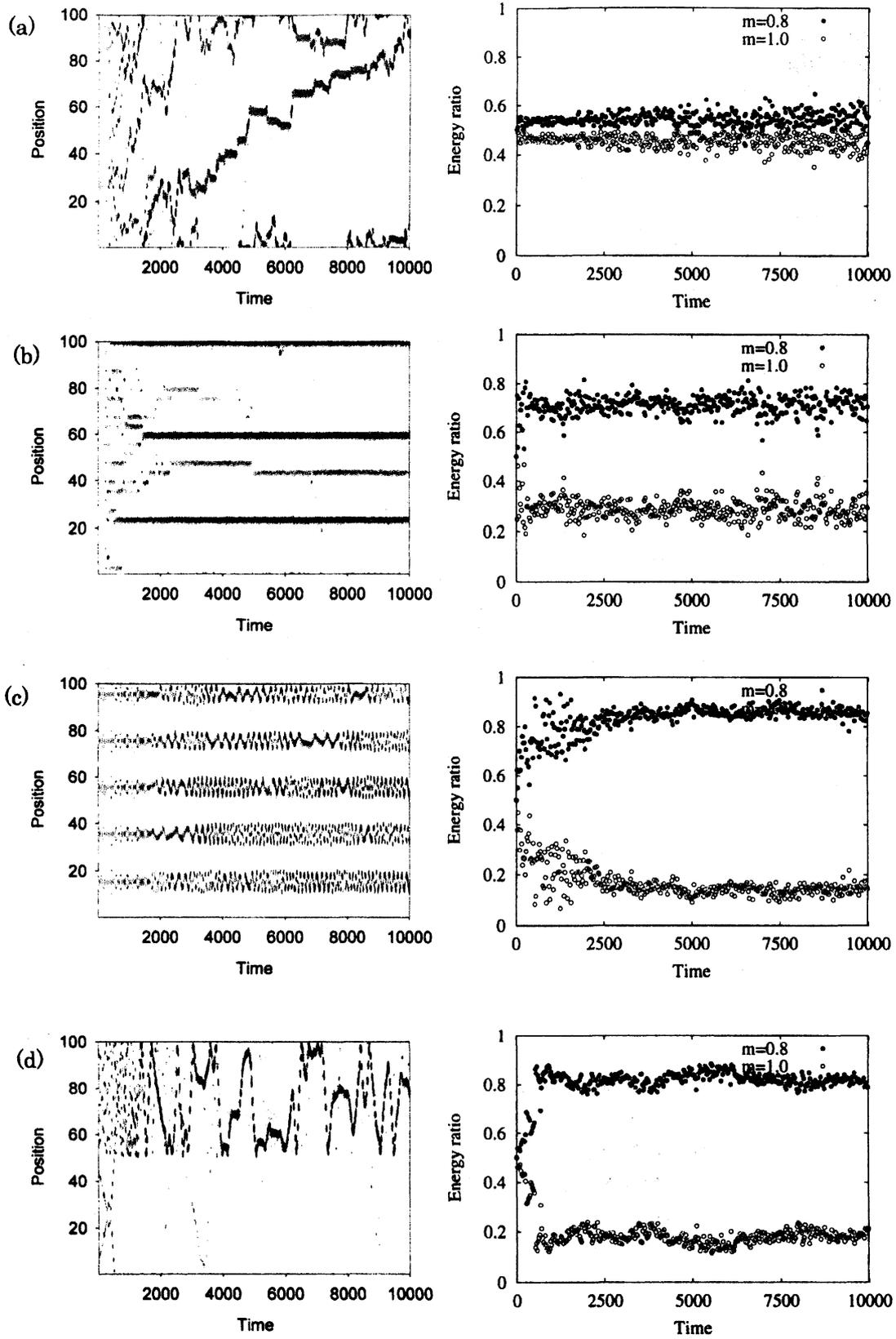


図3 $\beta=4$ の場合のエネルギー局在の様子:(a) $d=1$, (b) $d=2$, (c) $d=10$, (d) $d=50$

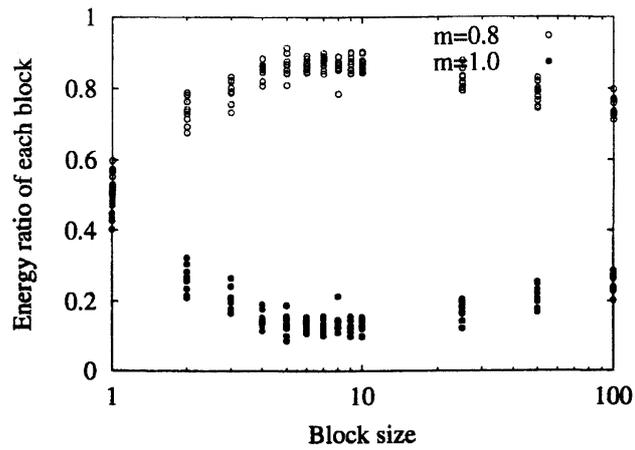


図4 周期構造のサイズとエネルギー分配の関係

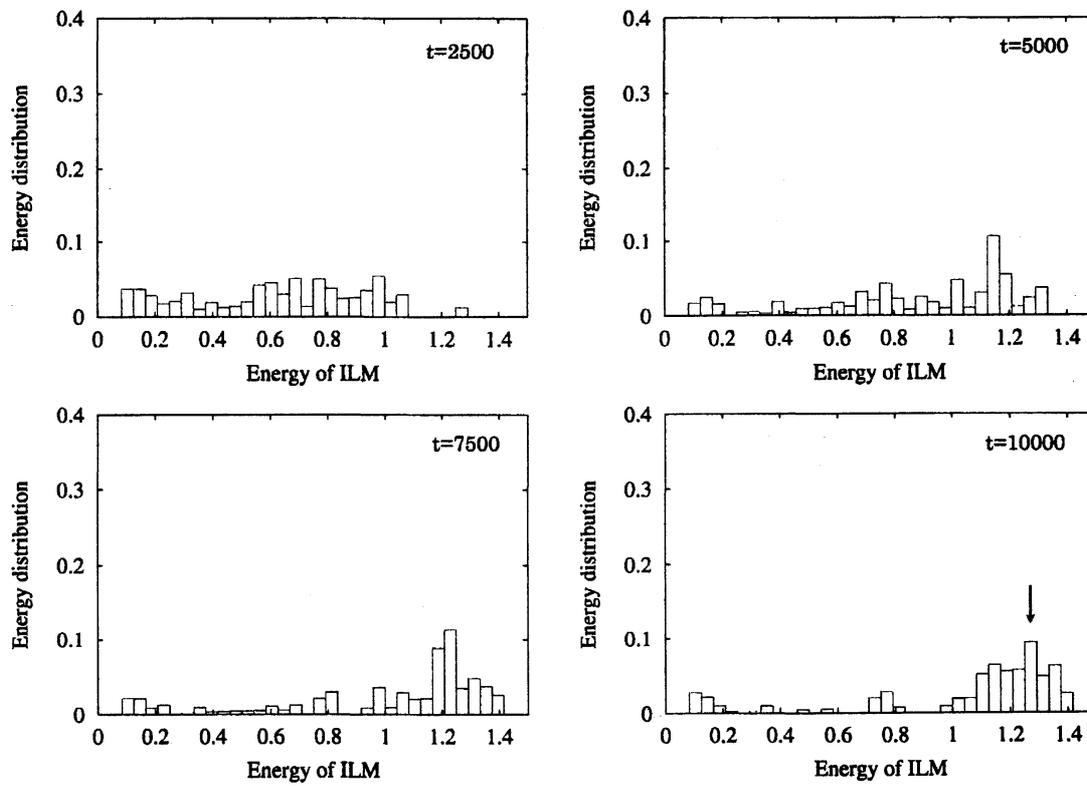


図5 $d=1$ の場合の非線形局在モードのエネルギー分布の様子

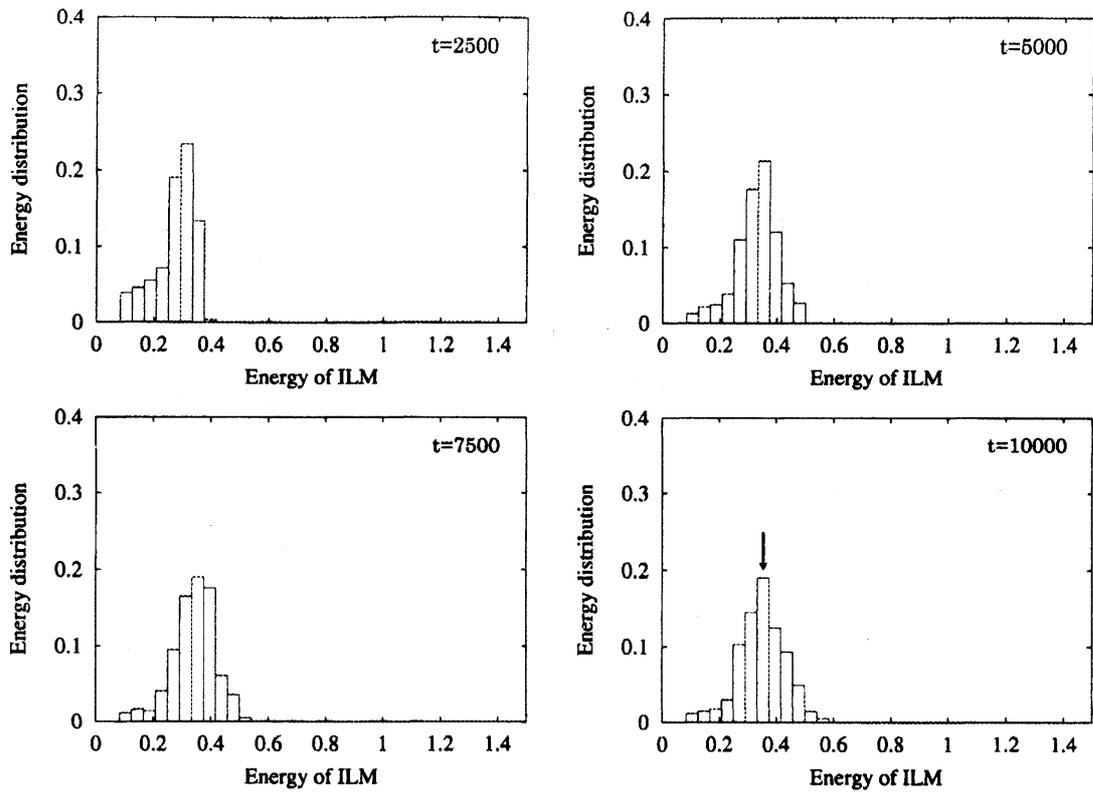


図6 $d=10$ の場合の非線形局在モードのエネルギー分布の様子

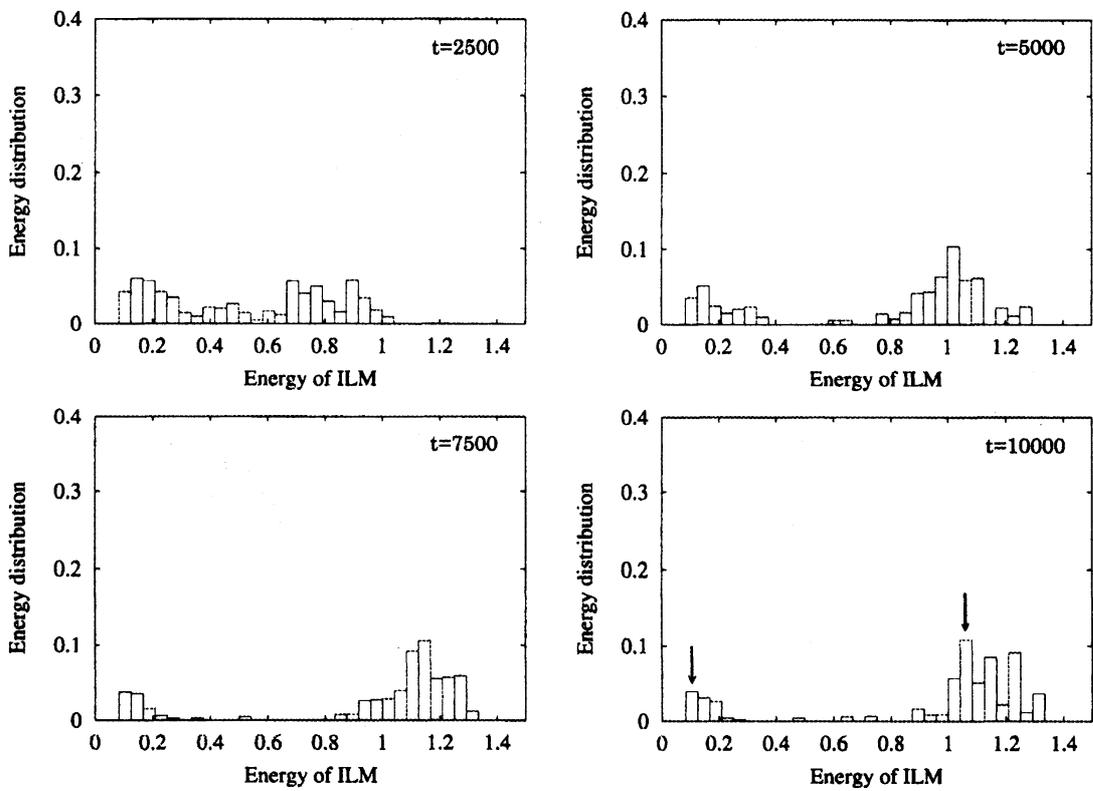


図7 $d=50$ の場合の非線形局在モードのエネルギー分布の様子

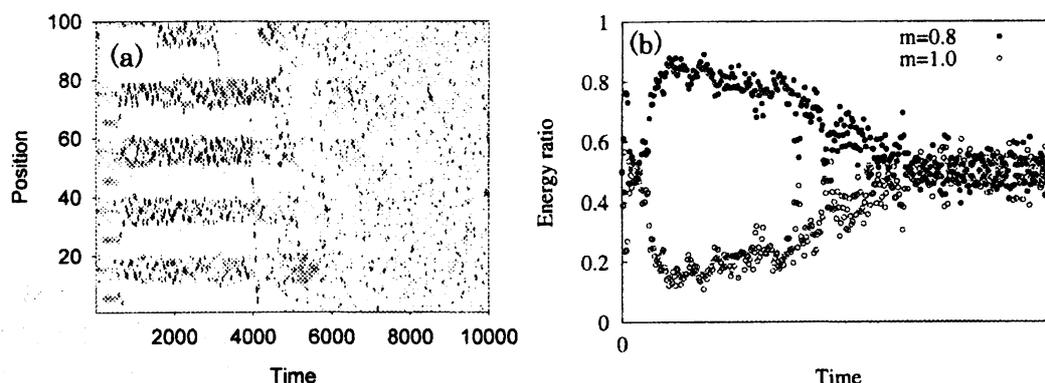


図8 非線形性が非常に強い場合のカオスのブリーザーの振る舞い($\beta=10$, $d=10$)

5. 考察

周期的な構造を持つ格子系において非線形局在モードが質量の軽い質点の構造に捕捉されやすい理由は[5]に従って説明することができる。2つの質量の異なる格子系の接合部での Peierls-Nabarro(PN)ポテンシャルを計算すると、軽い質点→重い質点の接合部ではPNポテンシャルは均一系の部分よりも大きくなり、逆に重い質点→軽い質点の接合部では均一系の部分よりも小さくなるという結果が得られる。つまり、均一系のPNポテンシャルを乗り越えながら伝わってきた非線形局在モードは重い質点→軽い質点の接合部は容易に乗り越えることができるが、軽い質点→重い質点の接合部を乗り越えられるかどうかは一般には判断できない。多くの場合、均一系を伝播するのに必要なエネルギーより大きなエネルギーを持たないので軽い質点→重い質点の接合部を乗り越えることはできないと考えられる。さらに、PNポテンシャルの影響は非線形局在モードの振幅が大きくなるにつれてさらに大きくなるので、衝突を繰り返しながら成長していくカオスのブリーザーは2つの領域の接合部でのPNポテンシャルの影響を大きく受けると考えられる。以上の議論から非線形局在モードは重い質点の領域→軽い質点の領域への移動は容易であるがその逆は困難であるといえる、したがって一度軽い質点の領域に入ると、そこに捕捉されてしまう。

カオスのブリーザーの振る舞いは d の大きさと非線形局在モードの特性長 L の大きさによって3種類に分類することができる。

- (1) d が L よりも小さい場合、非線形局在モードは周期構造の影響を受けることなく系を自由に動き回り、最終的に均一な系と同様に1つの非線形局在モードのみが系に残る。エネルギー分布を見ると、高エネルギーの非線形局在モードにエネルギーが集中していることがわかる。
- (2) d と L がほぼ同じ大きさの場合、非線形局在モードは周期構造の中に捕捉されて系を自由に伝播できなくなることがわかる。その結果、それぞれの局在モードが衝突によってエネルギーを交換し、ひとつの非線形局在モードに成長するという過程が阻害されている。この場合のエネルギー分布は(1)よりも低いエネルギーに分布していることがわかる。これは系の中の各構造に捕捉された局在モードがそれ以上成長しないためである。
- (3) d が L よりも十分大きな場合はそれぞれの構造内で非線形局在モードが融合していき、カオスのブリーザーの過程が進んでいくことがわかる。エネルギー分布では2つのピークが存在することがわかる。これは2種類の領域でのそれぞれの非線形局在モードのエネルギー分布に対応する。

次に2種類の領域にエネルギーがどのように配分されるかを見る。図4から、非線形局在モードは質量が軽い領域に捕捉されることがわかる。また、 d と L がほぼ同じ大きさの場合に、質量が軽い領域にエネルギーが最も大きく配分されている。これは L と d が同程度の場合、初期に生成された非線形局在モードはすぐに軽い質量の領域に移動して捕捉されるが、 L が大きくなると、生成した非線形局在モードが軽い質量の領域に移動する前に他のモードと衝突をしてもとの領域内に戻る可能性が大きくなり、軽い質量の領域に移動する前に重い質量の領域で大きなエネルギーをもつ非線形局在モードが生成されるためである。

また、熱平衡状態においては周期構造の大きさに関係なくエネルギーの偏在がなくなる。これは熱平衡状態における(非線形局在モードが減衰した後の)波動は非線形局在モードよりも波長がはるかに長い(π モード的でない)ため、周期構造の影響をほとんど受けることなく系の中を自由に動き回ることだけできるからだと考えられる。実際、均一系におけるカオスのブリーザーの研究の中で熱平衡状態での波動は長波長のソリトンであるとの指摘がある。このことは今回のシミュレーション結果から考えられる結果と矛盾しない。

6. 終わりに

今回は、非線形局在モードが系の格子オーダーの不均一性からどのような影響を受けるかを調べるために、周期的な構造を導入した1次元FPU格子系におけるカオスのブリーザーの振る舞いを数値シミュレーションによって調べた。その結果、系の微細な構造は非線形局在モードの集団的な振る舞いに大きな影響をあたえることが示された。特に、非線形局在モードの特性長と周期構造のサイズに着目してカオスのブリーザーの振る舞いについて考察を行なった。今後はランダムな質量分布をもつ構造でのカオスのブリーザーの振る舞いなどを調べる予定である。

謝辞

今回報告した研究は財団法人日本科学協会の笹川科学研究助成を受けて行なわれたものである。

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]Y. S. Kivshar, D. K. Campbell, Phys. Rev. E **48**, 3077 (1993).
- [4]Y. Doi, Wave Motion. E **38**, 177 (2003).
- [5]I. Bena, A. Saxena, and J.M. Sancho, Phys. Rev. E **66**, 036617 (2002).
- [6]V.M. Burlakov, S.A. Kiselev, and V.I. Rupasov, Phys. Lett. A **147**, 130 (1990).
- [7]T. Cretegny, T. Dauxois, S. Ruffo, A. Torcini, Physica D **121**, 109 (1998).