

# 一次元Lennard-Jones系のカオス

新潟大自然  
新潟大工

岡部恒康 [1]  
山田弘明 [1]

## 1 Introduction

1次元最近接 Lennard-Jones (LJ) 系のカオス的振る舞いについて報告する。この系とよく研究されている Fermi-Pasta-Ulam 系 (FPU 系) との重要な違いは、LJ 系ではエネルギーや密度によってポテンシャルの凸性が破れる領域が存在する事にある。この系の研究は、Bocchieri を始めとする多数の研究者によって行われたが [2], FPU 系と同程度の振る舞いしか示さない低エネルギー領域を中心に解析され、凸性が破れるような高エネルギー領域についてはあまり研究がされていない。我々は、カオス性の指標であるリアプノフ指数のエネルギー依存性について、Lennard-Jones 系特有の性質が存在する事を数値的に示す [3]。

## 2 Model

長さ  $L$  の 1次元リングの上に  $N$ 個の古典粒子が存在する。その 1次元座標  $q_i$ , ( $i = 1, \dots, N$ ) に対するポテンシャルは次式で与えられる；

$$U_{LJ}(r) = 4 \left[ \left( \frac{1}{r} \right)^{12} - \left( \frac{1}{r} \right)^6 \right] + f(L, N), \quad (r = |q_{i+1} - q_i|, (i = 1, \dots, N)) \quad (1)$$

ここで  $L$  は系全体の長さ、 $f(L, N)$  は密度によって最低のポテンシャルエネルギーを 0 にとるための定数。また、リング上で考えるため周期的境界条件  $q_{N+1} = q_1 + L$  を課す。ポテンシャルの極小値は  $r_0 = 2^{1/6}$  である。密度  $d$  は、平衡間隔  $r_0 = 2^{1/6}$  ( $V'(r_0) = 0$ ) を基準として、 $d = \frac{Nr_0}{L}$  と定義する。初期配置として、その密度における最低のポテンシャルエネルギーとなる配置を選んだ。なお高精度な軌道とその摂動ベクトルの時間発展を求めるため、数値計算には 6 次の Symplectic Integrator を用いた。この系のリアプノフ指数を Gram-Schmit の直交化法を使って求めた。その結果リアプノフスペクトルは、粒子数 8 個以上はほとんど同じである事が解る [3]。したがって大自由度系として粒子数  $N$  が 8 個の系を調査する。

## 3 Lyapunov Exponents

図 1 に、様々な密度  $d = 1$  での LJ 系の最大リアプノフ指数 (MLE) のエネルギー依存性を Log-log スケールで図示した [4]。その結果低密度  $d < 1$  において、カオス領域が FPU 系とは違って弱カオス、強カオスの二つの領域だけではなく、その間の領域にエネルギー

ーによって変化せず最大リアプノフ指数 (MLE)  $\lambda_1$  が一定値をとる中間の領域が存在する事がわかる [3, 4]. この結果と同様な数値結果が K. Yoshimura [5] によっても数値的に得られている。

このように弱カオスと強カオスの中間領域で、エネルギー変化に対し“情報損失”の目安でもあるリアプノフ指数が一定値をとる領域をここではプラトー領域と呼ぶ。このプラトー領域の存在はポテンシャルが凸性をもつ FPU 系や Soft-core 系では見られない Lennard-Jones 系特有の性質である。これより、このプラトー領域は密度が低いとより広範囲のエネルギー領域で見えることがわかる。そして、高密度になるとこのようなプラトー領域は消失してしまう。

この結果を解釈するためにポテンシャルの局所不安定性を考える。軌道の指数関数的不安定性は、一般化された Hill 方程式を考える事によって、トポロジカルな不安定性とパラメトリックな不安定性の2種類に大別できる [6]. 例えば、ポテンシャルが凸性をもつ場合は、パラメトリックな不安定性しか持たない。ところが LJ 系では、この2種類の不安定性を両方含んでいる。そこで、LJ 系のトポロジカルな局所不安定性によるリアプノフ指数  $\lambda_A$  をポテンシャルのヘシアン行列の負固有値を調べる事により、大まかに見積もった。この局所不安定性によるリアプノフ指数  $\lambda_A$  を密度  $d$  を変えて調査したものが図 2 である。この図 2 をみると低密度 ( $d \leq 1$ ) の領域では、密度による概形の差はほとんどなく、どれもエネルギー  $E$  が 0.3 より大きい領域では密度によらずほとんど一定値をとるプラトー領域が見える。このように  $\lambda_A$  に上界があるという事は、エネルギーを上げていけば、いずれはパラメトリック不安定性が効いてくる事を示唆している。なぜなら MLE  $\lambda_1$  は高エネルギー領域でランダム行列近似により単調に増加しているため、いずれは MLE  $\lambda_1$  の方がリアプノフ指数  $\lambda_A$  より大きくなるためである。しかし高密度 ( $d = 1.2$ ) のところでは、この局所不安定性によるリアプノフ指数  $\lambda_A$  は、ほとんど 0 である。これは高密度では斥力が効き、ポテンシャルが凸関数性を持つため、ポテンシャルにより局所不安定性がなくなる事を示している。

結局、プラトー領域でのリアプノフ指数  $\lambda_1$  と  $\lambda_A$  の概形と値はほとんど一致している。つまりプラトー領域は局所不安定性によって形成されている事がわかる。それより高エネルギー側では  $\lambda_A$  より  $\lambda_1$  の方が大きくなるので、パラメトリック不安定性が効いてきているのといえる [3]. 一方高密度  $d = 1.2$  では、リアプノフ指数  $\lambda_A$  がほとんど 0 のため MLE  $\lambda_1$  の値が低密度の時と比べて小さくなっている。つまり高密度では、 $\lambda_A$  がほとんど効かずにパラメトリック不安定性により支配されていることがわかる。このために高密度領域では、プラトー領域が存在しにくいのである [4].

このように、トポロジカルな局所不安定性とパラメトリックな不安定性の競合により、MLE のエネルギー依存性が決まっているといえる。

## 4 Spatio-temporal pattern

今、問題となるプラトー領域では、エネルギーの増加分が直接確率的な軌道の増加に結びつかず、何等かの時空構造にその増加分のエネルギーが使われていると考えられる。そ

ここで密度  $d = 0.5$  を代表に、図3でLJ系の全粒子の座標の時間変動を各エネルギーごとに示した。そうすると丁度プラトー領域のところで、粒子の組織的な運動が見える [4]。おそらくこの協同現象によって“有効的な自由度”の個数が減少し、プラトー領域が存在するものと推察される。しかしプラトー領域固有の協同現象が正確に存在するかどうか、そしてそれが局所不安定性とどう関係しているのか？というのがわからず、今後の課題である。そのプラトー領域の性質と系の長距離の揺らぎを調べるためには、カオスだけではなくソリトンも考えて、二つの中間の性質をもつ系の性質を調査する必要があるのではないかと考える。このような中間な系は、ほとんど調査されておらず今後重要性が増す分野だと思う。

また、今回報告できなかったが、この系の統計的性質に注目した  $1/f$  型揺らぎを調査したのものもある [7]

## 参考文献

- [1] Email: okabe@tsphys.eng.niigata-u.ac.jp, hyamada@cc.niigata-u.ac.jp
- [2] P. Bocchieri, A. Scotti, B. Bearzi and A. Loinger, *Phys. Rev. A* **2**, 2013 (1970).
- [3] T. Okabe and H. Yamada; *Int. J. Mod. Phys. B*, published.
- [4] T. Okabe and H. Yamada; in preparation.
- [5] K. Yoshimura; *Physica D* **104**, 148 (1997).
- [6] M. Pettini, *Phys. Rev. E* **47**, 828 (1993).
- [7] T. Okabe and H. Yamada; *chaos, solitons & fractals*, published.

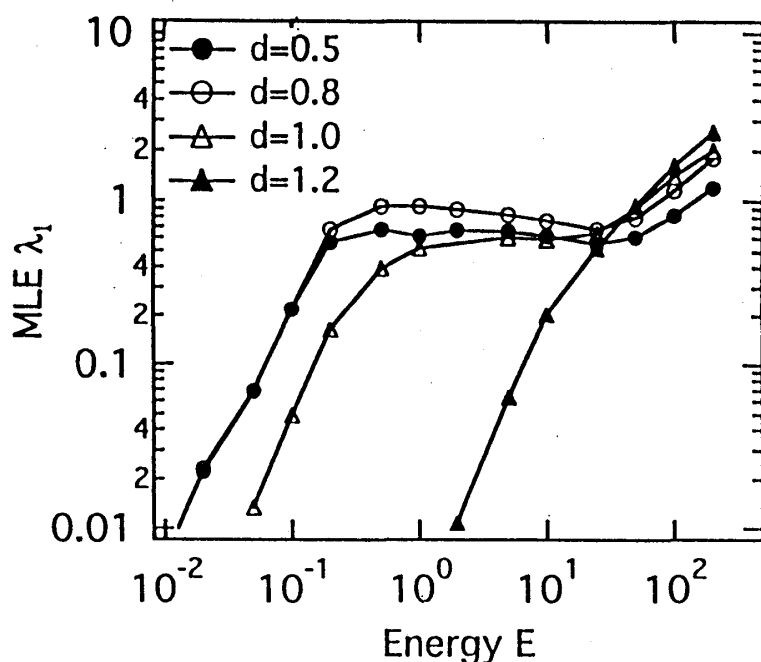


図1. 最大リアプノフ指数  $\lambda_1(E)$  のエネルギー依存性

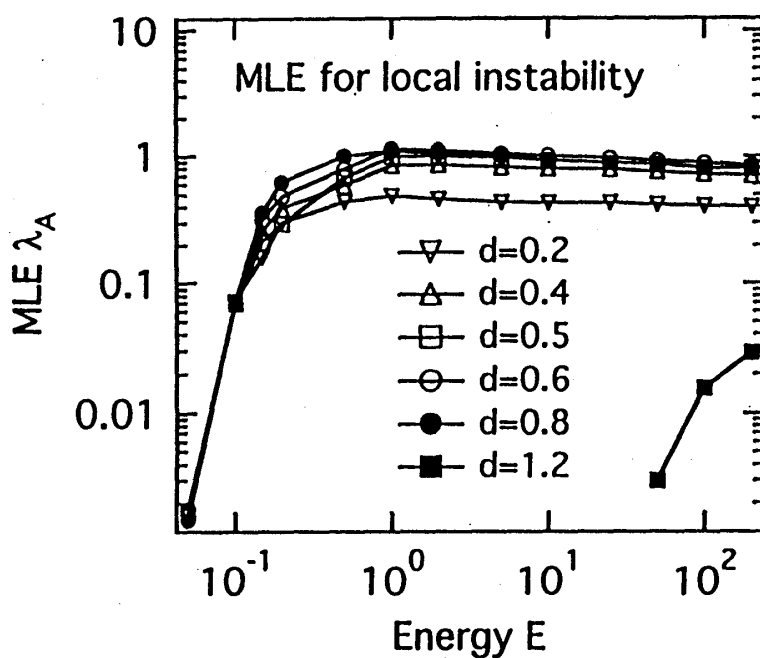


図2. ポテンシャルのヘシアン行列の負固有値に対応したリアプノフ指数  $\lambda_A(E)$  のエネルギー依存性

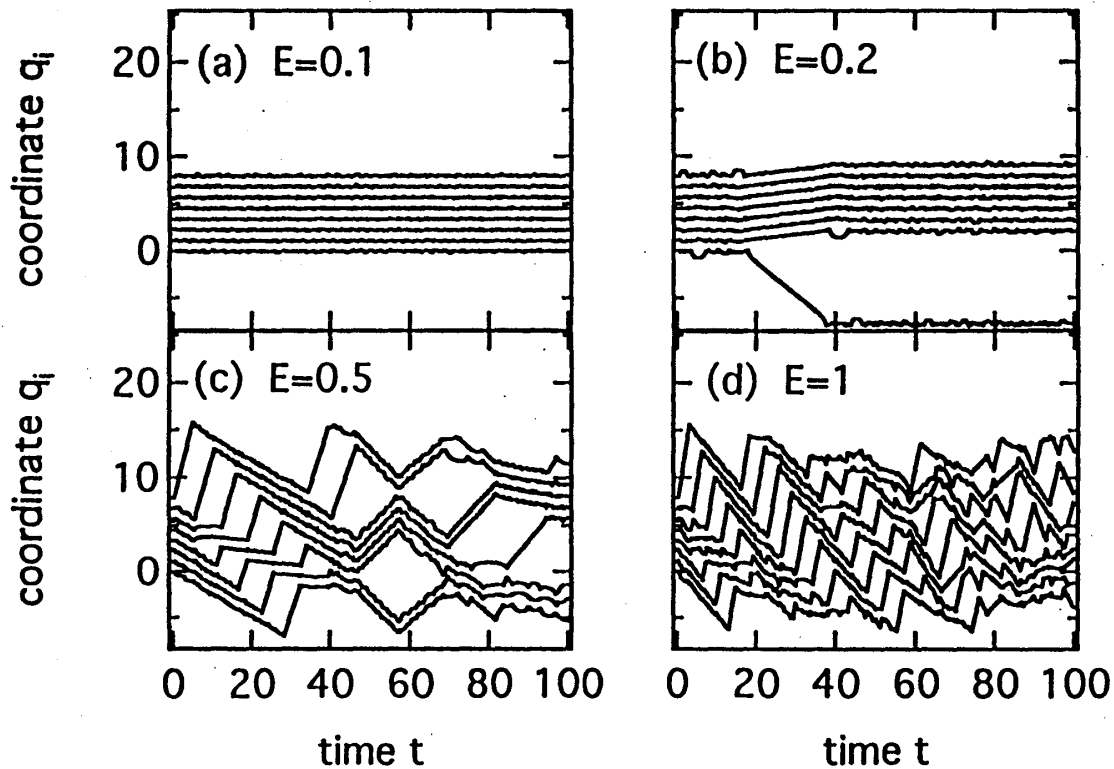


図3. 密度  $d = 0.5$ , 粒子数  $N=8$  の LJ 系の座標の時間変化 ( $t \leq 100$ ).