

格子の対称性による非線形局在モードの移動性の変化の解析

阪大・工 土井 祐介 (Yusuke Doi),
阪大・工 中谷 彰宏 (Akihiro Nakatani)
Graduate School of Engineering, Osaka University

概要

非線形局在モードの移動性には格子の「対称性」が重要であると考えられる。本研究では Fermi-Pasta-Ulam β 格子系に対応する対称格子モデルを物理的に意味づけが可能な形で導出する方法を示す。また得られた格子系において非線形局在モードが滑らかに移動しうることを確かめた。

1 はじめに

非線形局在モード (Intrinsic Localized Mode, ILM) は非線形格子系において普遍的に出現する局在振動モードとして知られている [1]。格子振動の振幅が格子スケールに比べて微小な場合、線形化された運動方程式から、定在波の波数に対応して固有振動数が規定される。この線形振動の固有振動は一般に上限値をもち、固有振動が存在し得ない領域 (禁止帯) が存在する。ところが振動の振幅が大きくなると格子間の非線形相互作用によって禁止帯に属する振動数での振動が励起されうる。しかしこのような非線形振動は (線形) 固有振動の振動数とは共鳴せず、固有振動を通じたエネルギーの拡散が行えない。したがって、空間的に局在した大振幅の振動モードが出現する。これが ILM である。近年では数値シミュレーションによる解析のみならず、種々の物理系においての観測実験も数多く報告されている [2]。

ILM の大きな特徴として、局在のピークが空間的に移動しない静止型 ILM の他に、局在のピークが有限の速度で伝播する移動型 ILM が存在することが挙げられる。数値シミュレーションにおいては、静止型 ILM に適切な擾乱を与えることによって比較的容易に移動型 ILM への遷移を観測することが可能である。しかしながら移動型 ILM の構造については、その厳密な解を求めることが困難であることから精密な解析が殆ど行われていないのが現状である。このような数値シミュレーションで得られた ILM は長時間シミュレーションの結果、伝播速度が減速する、局在エネルギーが系に拡散していくなどの現象が観測されることから、厳密な解とはなっていない。Yoshimura は Fermi-Pasta-Ulam (FPU) 格子系における移動型 ILM を速度および振動数で体系的に解析し、移動型 ILM が全系にわたって有限の Tail を持つことを見出した [3]。このような Tail は移動速度および振動数と格子の固有振動数の関係によってその大きさが変化すること、またこのことから格子系の「対称性」が ILM の移動性に影響を及ぼす可能性を示唆している。これに基づき、4 粒子で構成された FPU 格子系に対して「対称性」の高い格子系を構成することによって移動

型 ILM の厳密解を構成することが可能であり、それを用いて任意の速度を持ち、滑らかに移動する ILM が存在可能であることが数値シミュレーションで示されている [4].

本研究では、 N 自由度の FPU 格子系に対応する対称性の高い格子系の構成法を示し、その格子系において滑らかに伝播する ILM の数値解が存在することを数値シミュレーションにより示す.

2 対称格子系

ハミルトニアンが以下で与えられる 1 次元の非線形格子を考える.

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

ここで p_n は運動量, q_n は各格子点の平衡点からのずれであり, Φ はポテンシャルエネルギーである. この格子系に対し複素ノーマルモード座標

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

を導入する. この場合, 運動方程式は

$$\frac{d^2 U_m}{dt^2} = -\frac{\partial \Phi}{\partial U_{-m}} \quad (m = -N/2 + 1, \dots, N/2 - 1), \quad (3)$$

で与えられる. ここで $U_{N/2}$ については重心の変位であり, 時間変化しないとする.

複素ノーマルモード座標 $\{U_m\}$ において写像

$$T_\lambda : U_m = U_m \exp(-im\lambda) \quad (m = -N/2 + 1, \dots, N/2 - 1) \quad (4)$$

を考える. これは U_m 空間における回転操作に対応する. この変換をたとえば $\lambda = 2\pi/N$ として (2) に適用すると

$$T_{2\pi/N} q_n = q_{n-1}, \quad (5)$$

となることは容易に確かめられる. したがって, 写像 T_λ は q_n 空間で定義される物理量の別の格子点への並進操作に対応することが分かる. すなわち U_m 空間での回転操作は, q_n 空間での並進操作に対応する.

このことを踏まえて, 複素ノーマルモード座標で定義されたポテンシャルエネルギーを $\Phi(\mathbf{U})$ を写像 T_λ に対して不変な成分とそれ以外の成分に分離することを考える.

$$\begin{aligned} \Phi(\mathbf{U}) &= \Phi_s(\mathbf{U}) + \Phi_a(\mathbf{U}), \\ \Phi_s(T_\lambda \mathbf{U}) &= \Phi_s(\mathbf{U}) \quad \text{for any } \lambda. \end{aligned} \quad (6)$$

さらに分離したポテンシャルエネルギーに対してパラメータ c を導入して、元の系に対して写像 T_λ に対する対称性をコントロールする格子系を構成する。

$$\Phi_c = \Phi_s(\mathbf{U}) + (1 - c)\Phi_a(\mathbf{U}) - c\phi_s, \quad (7)$$

ここで ϕ_s は写像 T_λ に対して不変であるような付加的なポテンシャルである。式 (7) は $c = 0$ においてオリジナルの系となる一方、 $c = 1$ においては T_λ に対して不変なポテンシャルとなる。このような系は Translational Asymmetry Controlled Lattice (TASCL) と呼ばれており、その性質が解析されている [4]。

TASCL における対称格子 ($c = 1$) において運動方程式 (3) は次の性質があることが知られている。

1. $U_m(t) = u_m(t)$ が (3) の解であるならば $U_m(t) = u_m(t) \exp(-im\lambda)$ も同じく (3) の解である。

2. ハミルトニアン H とは別の保存量

$$I = \sum_{m=1}^{N/2-1} m(\dot{U}_m U_{-m} - U_m \dot{U}_{-m}) \quad (8)$$

が存在する。

これらの性質から、解 u_m に対して変換 T_λ を用いることによって解の族を作ることができる。これは解が局在解である場合、局在の中心を任意に並進移動した解が存在することを示している。また保存量 I の方向に対して解が中立安定であることが分かる。したがって、対称格子における静止型の局在解に対して、保存量 I によって決定される適切な擾乱を与えることによって局在解がなめらかに移動することが期待される。このように TASCL は移動型 ILM の性質を調べるのに役立つ格子系であると考えられる。

3 FPU- β 系と対応する対称格子系

FPU- β 格子系を考える。系のハミルトニアンは

$$H = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N p_n^2 + \sum_{n=1}^N \left[\frac{\kappa}{2} (q_{n+1} - q_n)^2 + \frac{1}{4} (q_{n+1} - q_n)^4 \right] \quad (9)$$

で与えられる。TASCL は

$$H_c = \frac{1}{2} \sum_{m=-N_h}^{N_h} p_n^2 + c\Phi_s(\mathbf{U}) + (1 - c)\Phi_a(\mathbf{U}) \quad (10)$$

と書ける。ここで $N_h = N/2 - 1$ である。また Φ_s, Φ_a は

$$\begin{aligned}\Phi_s(\mathbf{U}) &= \frac{\kappa}{2} \sum_{i=-N_h}^{N_h} \omega_i \omega_{-i} U_i U_{-i} \\ &\quad + \frac{1}{4N} \sum_{i=-N_h}^{N_h} \sum_{j=-N_h}^{N_h} \sum_{k=-N_h}^{N_h} \sum_{l=-N_h}^{N_h} \omega_i \omega_j \omega_k \omega_l U_i U_j U_k U_l \delta_{i+j+k+l,0}\end{aligned}\quad (11)$$

$$\begin{aligned}\Phi_a(\mathbf{U}) &= -\frac{1}{4N} \sum_{i=-N_h}^{N_h} \sum_{j=-N_h}^{N_h} \sum_{k=-N_h}^{N_h} \sum_{l=-N_h}^{N_h} \omega_i \omega_j \omega_k \omega_l U_i U_j U_k U_l \delta_{i+j+k+l,N} \\ &\quad - \frac{1}{4N} \sum_{i=-N_h}^{N_h} \sum_{j=-N_h}^{N_h} \sum_{k=-N_h}^{N_h} \sum_{l=-N_h}^{N_h} \omega_i \omega_j \omega_k \omega_l U_i U_j U_k U_l \delta_{i+j+k+l,-N}\end{aligned}\quad (12)$$

で与えられる。ただし $\delta_{I,J}$ はクロネッカーのデルタ、 $\omega_I = \sin\left(\frac{4\pi I}{N}\right)$ は線形格子の固有振動数である。

TASCL において $c = 1$ とすることによって、FPU- β に対応する対称格子系は

$$\begin{aligned}H_{c=1} &= \frac{1}{2} \sum_{m=-N_h}^{N_h} p_m^2 \\ &\quad - \frac{1}{4N} \sum_{i=-N_h}^{N_h} \sum_{j=-N_h}^{N_h} \sum_{k=-N_h}^{N_h} \sum_{l=-N_h}^{N_h} \omega_i \omega_j \omega_k \omega_l U_i U_j U_k U_l \delta_{i+j+k+l,0}\end{aligned}\quad (13)$$

となることが分かる。ここで、簡単のため、 $\kappa = 0$ とした。

このハミルトニアンを (2) の逆変換を用いて q_n 空間に戻すことができるが、物理的な解釈が困難な複雑なポテンシャルとなる。

そこで、FPU- β 格子系を拡張した次のポテンシャルを考える。

$$\Phi(\mathbf{q}) = \sum_{d=1}^{N/2-1} b_d \Phi_d(\mathbf{q}) + \frac{b_{N/2}}{2} \Phi_{N/2}(\mathbf{q}).\quad (14)$$

ただし

$$\Phi_d(\mathbf{q}) = \frac{1}{4} \sum_{n=1}^N (q_{n+d} - q_n)^4\quad (15)$$

である。これは通常の FPU- β 格子が最近節格子間でのみ相互作用するのに対し、全粒子が結合するように拡張したモデルである。ここで b_d は距離 d だけ離れた格子間の相互作用の強度を表す。ここで簡単のため $b_1 = 1$ とする。また $b_{N/2}$ については結合の数が他の半分であることを考慮している。

ここで $\Phi_d(\mathbf{q})$ を変数変換 (2) により $\Phi_d(\mathbf{U})$ に変換することを考える。簡単な計算の後、以下の式が得られる。

1. d が偶数の場合

$$\begin{aligned}\Phi_{2l}(\mathbf{U}) &= \frac{4}{N} \sum_{I=-N_h}^{N_h} \sum_{J=-N_h}^{N_h} \sum_{K=-N_h}^{N_h} \sum_{L=-N_h}^{N_h} U_I U_J U_K U_L S_{2lI} S_{2lJ} S_{2lK} S_{2lL} \\ &\quad \times (\delta_{I+J+K+L,0} + \delta_{I+J+K+L,-N} + \delta_{I+J+K+L,N})\end{aligned}\quad (16)$$

2. d が奇数の場合

$$\begin{aligned}\Phi_{2l-1}(\mathbf{U}) &= \frac{4}{N} \sum_{I=-N_h}^{N_h} \sum_{J=-N_h}^{N_h} \sum_{K=-N_h}^{N_h} \sum_{L=-N_h}^{N_h} U_I U_J U_K U_L C_{(2l-1)I} C_{(2l-1)J} C_{(2l-1)K} C_{(2l-1)L} \\ &\quad \times (\delta_{I+J+K+L,0} - \delta_{I+J+K+L,-N} - \delta_{I+J+K+L,N})\end{aligned}\quad (17)$$

ここで

$$C_\alpha = \cos \frac{\alpha\pi}{N}, \quad (18)$$

$$S_\alpha = \sin \frac{\alpha\pi}{N}, \quad (19)$$

である。

これらの式を (15) に代入して整理すると、 U_m 空間における表式

$$\begin{aligned}\phi(\mathbf{U}) &= \frac{4}{N} \sum_{I=-N_h}^{N_h} \sum_{J=-N_h}^{N_h} \sum_{K=-N_h}^{N_h} \sum_{L=-N_h}^{N_h} [C_I C_J C_K C_L b_1 + S_{2I} S_{2J} S_{2K} S_{2L} b_2 + \cdots] \\ &\quad \times U_I U_J U_K U_L \delta_{I+J+K+L,0} \\ &\quad - \frac{4}{N} \sum_{I=-N_h}^{N_h} \sum_{J=-N_h}^{N_h} \sum_{K=-N_h}^{N_h} \sum_{L=-N_h}^{N_h} [C_I C_J C_K C_L b_1 - S_{2I} S_{2J} S_{2K} S_{2L} b_2 + \cdots] \\ &\quad \times U_I U_J U_K U_L (\delta_{I+J+K+L,N} + \delta_{I+J+K+L,-N})\end{aligned}\quad (20)$$

を得る。この式の右辺第一項は変換 T_λ に対する対称項、第二項は非対称項となっている。したがって、 $I + J + K + L = N$ を満たすすべての組み合わせの (I, J, K, L) において

$$C_I C_J C_K C_L b_1 - S_{2I} S_{2J} S_{2K} S_{2L} b_2 + \cdots = 0, \quad (21)$$

となる $(b_1 = 1, b_2, b_3, \dots, b_{N/2})$ の組み合わせが存在すれば、ポテンシャル (14) は FPU- β 格子系に対応する対称ポテンシャルの一つの表現を与えることになる。このポテンシャルは FPU- β 格子の表現から直接誘導した対称格子系 (13) とは異なる式となっている。これは TASCL の定義 (7) におけるポテンシャルの付加 ϕ_s に対応すると解釈することが可能である。

4 対称格子の性質

粒子数 $N = 6$ の FPU- β 格子を例にとって考える．この場合， $-2 < I, J, K, L < 2$ であり，その範囲で $I + J + K + L = 6$ となる組み合わせは， $(I, J, K, L) = (2, 2, 2, 0), (2, 2, 1, 1)$ の二種類である．ここで数字の順番の入れ替えは等価であるので省いている．この二つの組み合わせに対応する (21) は

$$\begin{aligned}\cos^3 \frac{\pi}{3} - \frac{1}{2}b_3 &= 0, \\ \cos^2 \frac{\pi}{3} \cos^2 \frac{\pi}{6} - b_2 \sin^2 \frac{2\pi}{3} \sin^2 \frac{\pi}{3} &= 0.\end{aligned}\quad (22)$$

となる．これを解くと $(b_1, b_2, b_3) = (1, \frac{1}{3}, \frac{1}{4})$ が得られる．したがって，粒子数 $N = 6$ の FPU- β 格子系に対応する対称格子系のポテンシャルを

$$\Phi(\mathbf{q}) = \Phi_1(\mathbf{q}) + \frac{1}{3}\Phi_2(\mathbf{q}) + \frac{1}{8}\Phi_3(\mathbf{q}), \quad (23)$$

と構成できる．

N が大きくなっても数値計算によって係数 b_n を計算することが可能である．以下に計算結果の例を示す．

1. $N = 4$

$$b_1 = 1, b_2 = 0.5$$

2. $N = 6$

$$b_1 = 1, b_2 = 0.3333, b_3 = 0.25$$

3. $N = 8$

$$b_1 = 1, b_2 = 0.2929, b_3 = 0.1716, b_4 = 0.1464$$

4. $N = 16$

$$\begin{aligned}b_1 &= 1, b_2 = 0.2600, b_3 = 0.1233, b_4 = 0.0761 \\ b_5 &= 0.0551, b_6 = 0.0446, b_7 = 0.0396, b_8 = 0.0380\end{aligned}$$

図 1 に様々な N における格子間距離 d と結合強度 b_d の関係を示す．結合強度は d が大きくなるにつれて減少していることが分かる．この減少の振る舞いは， $d \ll N$ においては， $b_d = d^{-2}$ と近似することができる．一方， $d \rightarrow N/2$ においては， b_d の減少率は小さくなり，一定値に収束する．

また最も離れた格子間の結合強度 $b_{N/2}$ と N の関係を図 2 に示す． N の増大とともに $b_{N/2}$ はべき的に減少していることが分かる．この減少の振る舞いは

$$b_{N/2} = 8.016N^{-1.938} \quad (24)$$

と近似できる．

5 対称格子系における ILM の振る舞い

図3に $N = 16$ での FPU- β に対応する対称格子系における ILM の数値解析結果を示す。これは反復法を用いて移動型 ILM を計算したものである。この図からも分かるように一定速度で系をなめらかに伝播する ILM が得られていることが分かる。また、図4に

$$q_n = \frac{(-1)^n}{\sqrt{N}} \sum_{m=-N/2+1}^{N/2} Q_m \left[\cos\left(\frac{2\pi}{N}mn\right) - \sin\left(\frac{2\pi}{N}mn\right) \right] \quad (25)$$

で定義されるノーマルモード座標における軌道の時間発展を示す。各ノーマルモードのペアごとに、軌道は円周上と原点付近の往復運動及び、円周上の回転運動の合成となっていることが分かる。これらの運動は ILM の内部振動および、格子点から格子点への並進運動に対応している。回転運動の角速度が一定であることから、ILM が対称格子状で一定速度で運動していることが分かる。

6 おわりに

本研究では、ILM が系をなめらかに伝播することの出来る対称格子系について、FPU- β の拡張として物理的に意味のある格子系の導出法を示した。具体的には全粒子-全粒子結合の格子系において、対称格子となる格子間結合強度の組み合わせを求める方法を示し、数値計算によってその組み合わせを具体的に求めた。このようにして得られた格子系において ILM はなめらかに伝播することから、移動型 ILM の特性を解析するのに有用な格子系であると考えられる。

参考文献

- [1] A.J. Seivers and S. Takeno, "Intrinsic localized modes in anharmonic crystals", Phys. Rev. Lett., 61 (1988), pp. 970-973.
- [2] S. Flach and C.R. Willis, "Discrete Breathers", Phys. Rep., 295 (1998), pp. 181-264.
- [3] K. Yoshimura and Y. Doi, "Moving discrete breathers in nonlinear lattice: resonance and stability", Wave Motion, 45 (2007), pp.83-99.
- [4] Y. Doi and K. Yoshimura, "Translational asymmetry controlled lattice and numerical method for moving discrete breather in four particle system", J. Phys. Soc. Jpn., 78 (2009), 034401.

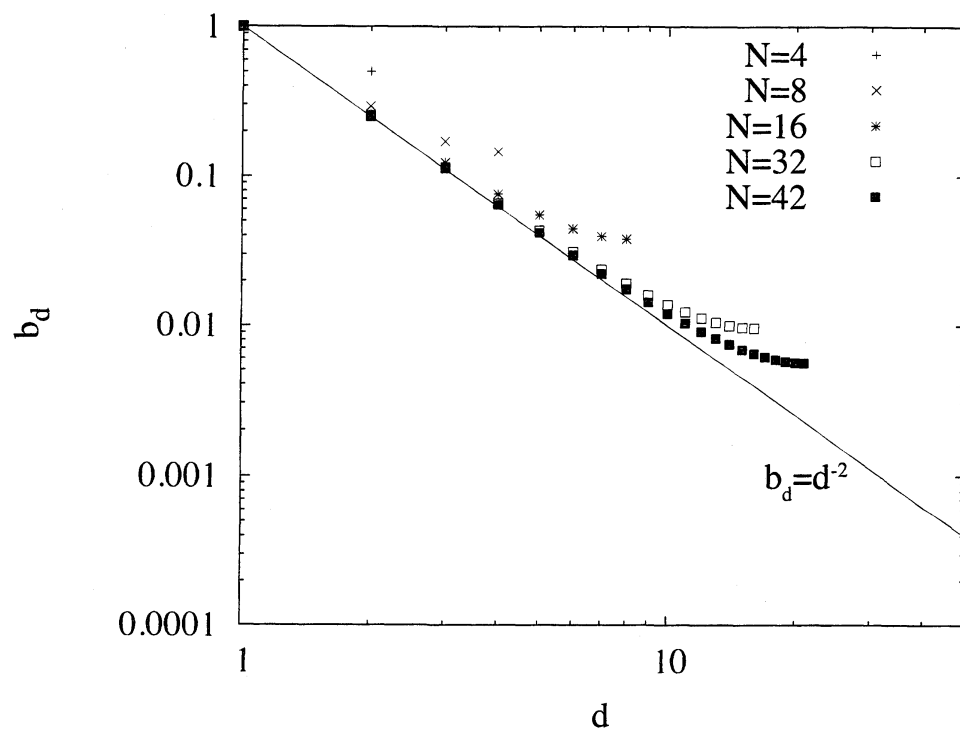


図 1: 結合強度 b_d と格子間距離 d の関係

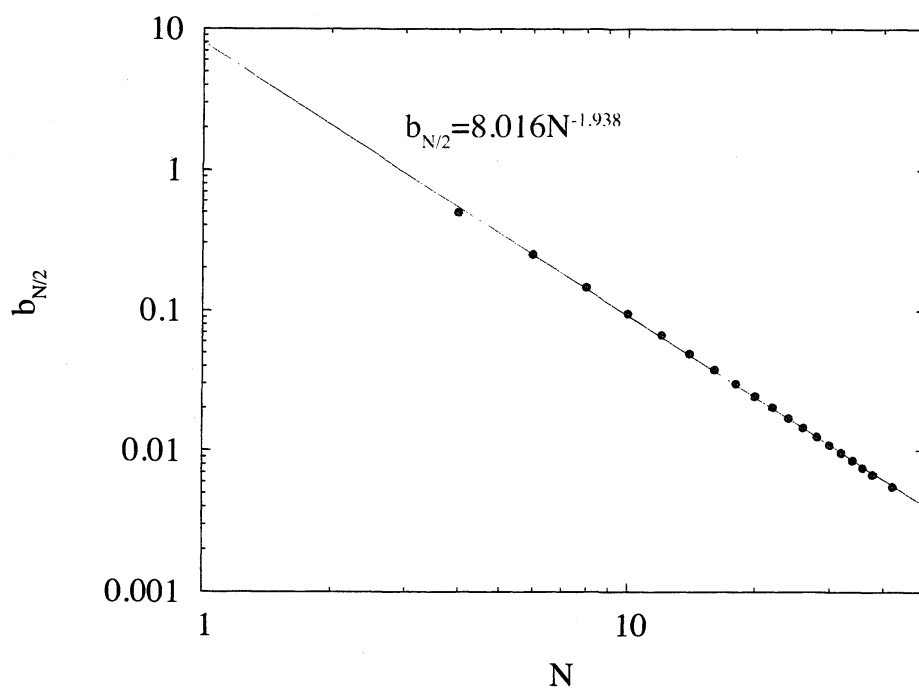


図 2: 粒子数 N と結合強度 $b_{N/2}$ の関係

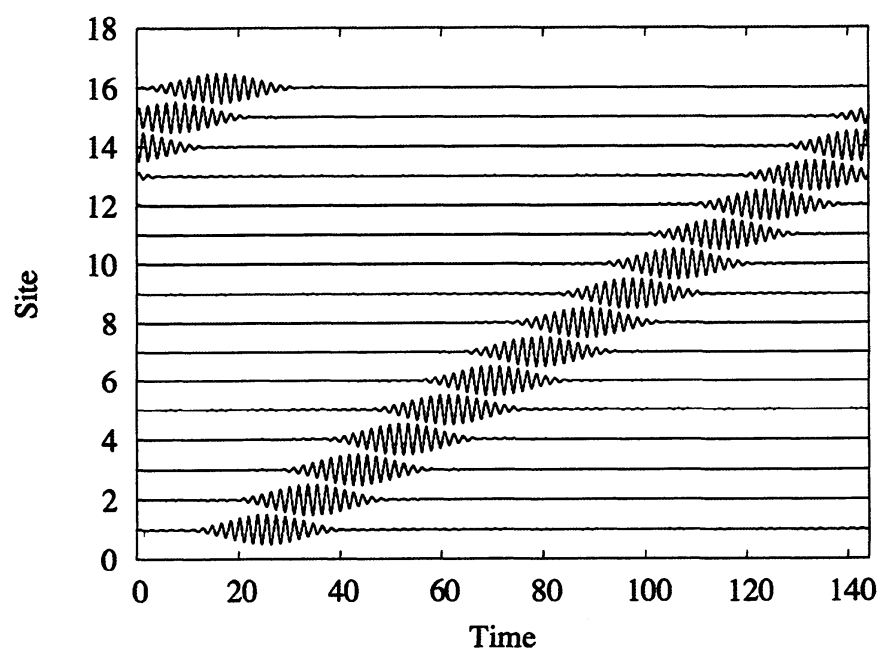


図 3: 対称格子における移動形 ILM の例

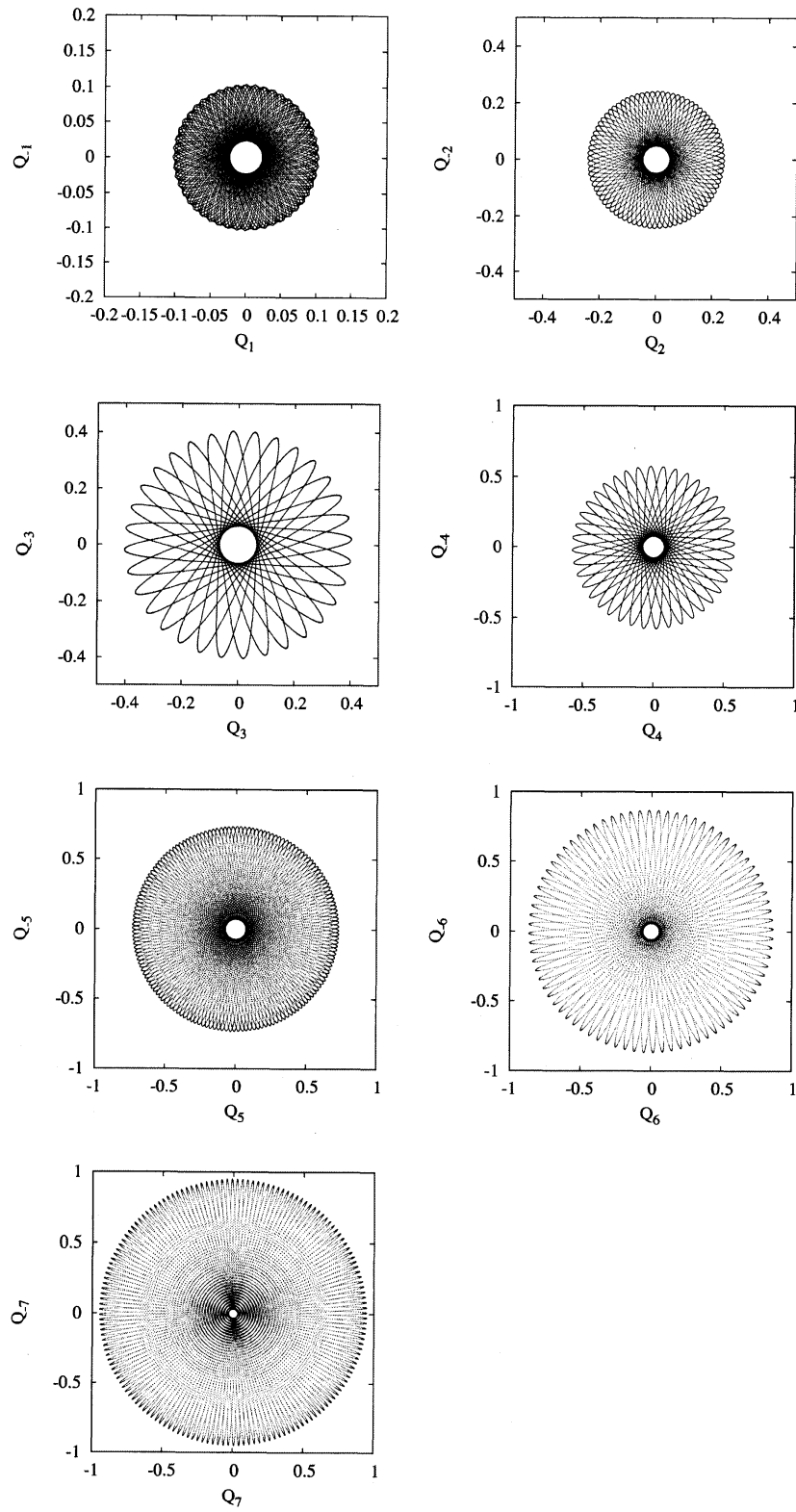


図 4: フーリエ空間での ILM の軌道