

非線型格子振動とエルゴード性

早大 理工 斎藤 信彦
 広岡 一

§1 非調和性とエルゴード性

格子振動を harmonic 近似で取扱う限り, いつでも 1-マルモードに分けられる。1-マルモードは独立であるから, その内エネルギーの交換は行なわれないから, 1つの 1-マルモードにエネルギーを与えると, いつでもそのエネルギーは, その 1-マルモードにのみとどまっていける。もしこの系が熱力学的であって, 熱平衡に達することができるとすると古典系とみなされる限り, すべての 1-マルモードにエネルギーは等分配されていなければならない。したがって harmonic oscillator の近似では, 熱平衡への接近の問題を議論することは出来ない。

実際の系は多少とも非調和性があるから, その内での熱平衡の成否が保証されるのどうかと考えられる。非線形の多自由度の振動の問題は数学的に難しいために, 具体的に解いてこれを示すことが出来ず, 物理学者は

すべこの責を非線形性におしつけ、非線形こそ故の神
ごありと信じていた。

しかし電子計算機の発達によって事情は一変した。計算
機実験による2)句歌の仮的な性検証を豫見するところがある
よりにまゝだからである。計算機をつかって非線形振動
子系のエネルギー中性をいへる最初の試みは Fermi, Pasta,
Ulam^{1), 2)}である。

一次元の格子の振動を考へる。i番目の粒子の運動は

$$m \ddot{y}_i = K(y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}) + \lambda \{f(y_{i+1} - y_i) - f(y_i - y_{i-1})\} \quad (1)$$

(微分差分方程式)

である。右辺の非線形項が非線形項であり、3葉のポテン
シャルでは $f(y) \propto y^2$ 、4葉のポテンシャルでは
 $f(y) \propto y^3$ である。連続の極限では

$$m y_{tt} = K [1 + \lambda' (y_x)^p] y_{xx} \quad (2)$$

(微分微分方程式)

とかくことができた。ここで p は、3葉又は4葉のポテ
ンシャルに依りて 1 又は 2 である。

(1)の左辺の時間微分を差分でおきかえた近似を
かきこくとできる。その式は(2)に於ては差分近似と

みちがきとよむ。時間について離散化した変数を y_i^j とかき、時間間隔を h とすると

$$\frac{m}{h^2} \delta_j^2 y_i^j = K \left(1 + \lambda (y_{i+1}^j - y_{i-1}^j)^p \right) \delta_i^2 y_i^j \quad (3)$$

(差分差分方程式)

と表わすことが出来る。こゝで δ_i^2 , δ_j^2 は空間又は時間について2階の差分オペレータである。

粒子は $i=0, 1, 2, \dots, N$ とし、 $i=0$ と $i=N$ とは固定する。(1)の系の調和振動子近似における規準振動力は

$$\omega_k = 2 \left(\frac{K}{m} \right)^{1/2} \sin \frac{k\pi}{2N}, \quad k=1, 2, \dots, N-1. \quad (4)$$

である。

$$y_i = \left(\frac{2}{N} \right)^{1/2} \sum_{k=1}^{N-1} x_k \sin \frac{ik\pi}{N} \quad (5)$$

によつて規準座標 x_k を導入すると、非線形方程式 (1) は一般に

$$x_k = -\omega_k^2 x_k + \lambda \sum A_{krs} x_r x_s \quad (6)$$

とかき直せる。但しこゝでは $p=1$ としたか、 $p=2$ のときは右辺の第2次は3次の式となる。

F.P.U は $N=32$, $K/m=1$, $\lambda=1/4$, $h^2=1/8$ に就き一帯性の規準振動に sine の形を与え、そのエネ

エネルギーが高い超導振動にどのようなうつりかを見つけた。ところが意外なことに、2, 3, 4, ... の低いモードにはいくらかのエネルギーはうつりか、高いモードにはほとんどうつりかず、しかもある時間がたつと、一番最初にエネルギーを与えた最低のモードに強んだすべてのエネルギーがかえりこしまった。はじめに豫期したようなエネルギーの等分配はあこぎなかつた。Fermi は力を2集のときと3集のときと、また broken linear force のときもしりべ、初期条件やその他の条件をかえたが、ほぼ同一の結論であつた。

その後この研究に対していろいろな考案があつた。1961年 Tuck と Menzel³⁾ はこれと長い時間に対する挙動をしりべた。FPUが見出したように、ある時間がたつと、再びはじめの状態でかえりか、2周目にはその誤差が少し増え、3, 4, ... 周毎に誤差は小え8周目には8%ほどになつた。ところが更に時間をかけると、今度は誤差が減少し、16周目には第1周目よりたつとはじめの状態に迎ふいた。

一方 Hemmer⁴⁾ は (4) の ω_R の内は

$$\sum n_R \omega_R = 0 \quad (7)$$

が成り立つような整数 n_R の全部が0でないような組が

ありたのには (共鳴条件), N が素数であるか, 2 のべき乗以外ではなければならぬことを示した。FPU は $N=16, 32, 64$ の場合を計算してゐる。このときは共鳴条件 (7) を満たさぬ。Ford⁵⁾ は モードの内は十分なエネルギー交換をおこなうには (4) の条件が必要であることを示し, 計算機でそのいくつかの例を示した。たとえば $N=6$ に与する (4) の振動数 $\omega_1 = (2-\sqrt{3})^{\frac{1}{2}}, \omega_2 = 1.0, \omega_3 = \sqrt{2}, \omega_4 = \sqrt{3}, \omega_5 = (2+\sqrt{3})^{\frac{1}{2}}$ で, ある 3 次の力であつたとき相互作用に与し 1 のモードにエネルギーを与えても 4, 5 のモードにはあまりエネルギーはうつりなぬが $\omega_1 = 0.4, \omega_2 = 0.8, \omega_3 = 1.2, \omega_4 = 1.6, \omega_5 = 2.0$ と少しずらして (7) を満たすようにするとエネルギー分配の様子は一瞬と違つてその後は dramatic であることを示した。

Jackson⁶⁾ は (7) の共鳴条件は非調和性入りの小たぬときであつて, λ の大きくなるときは

$$\sum n_k \Omega_k(\lambda) = 0$$

でなければならぬことを示した。 Ω_k は λ があるために ω_k から引いた振動数である。Jackson は エルゴード性がえられぬのは ω_k の内は (7) の条件が互ひか

らばかりでなく、 Ω による影響を与えるモード内の相互作用や初期条件も重要であることを示し、特に粒子数保存があればエネルギー交換が行われやすいことを計算機実験で確かめた。

調和振動子系を基準振動子とみれば独立な系のおよびであるが、粒子系のみとみれば強い相互作用をしい系である。それ故、見方を変えれば調和振動子系でも不可逆性を示したり、熱平衡に接近するようにみえたりする。たとえば力学的平衡において静止している系に、一つの粒子にある時刻から一定の力を加える。この系についてすべての粒子につき、その速度の2乗の長時間平均をしらべると、十分長い間には、かつ十分粒子の数が多いと、粒子の番号によらず一定になることがわかる。これを²けみ子とこの系は一定の温度をもつ熱平衡状態に達したようにみえる。しかし、粒子間の速度の相関をしらべると、隣り合った粒子間については0にならない。このことは系が完全に熱平衡に達したことを意味しない。そこで非調和性を入れこの性質がどのようにかわるかをしらべてみると、定性的には調和振動子のばあいと同じであることがわかった。ここでも非調和性はエネルギー性を保証してくれなかった。(Saito, Hirooka²⁾)

粒子間の相互作用を取り上げることは重要である。Northcote and Potts⁸⁾は 2つの粒子間には harmonic + hard core の力を仮定した。計算機による実験ではエネルギーの各モードへの等分配が程よく成り立つ。second neighborの相互作用を入れた試みもある。前述の粒子系としての見方において、同様な条件下に、運動の2集および隣りの粒子の運動との相互作用をしらべると、前者は一定の値に近づくが、後者は0にならない。

粒子数が少ないときには、エネルギー-等分配や熱平衡への接近を可能にするには、hard core ポテンシャルのような大きな非線形性が必要であろう。

§2. 解決法

以上の述べたことで、非調和性だけがエルゴード性がえられるという単純な期待をもつことが出来ないことがわかりと思う。一次元の力学系ではエルゴード性は無いというKolmogorov⁹⁾の主張もある。しかしこの述べたことは、しかしながら、むしろむしろ一次元系の特徴ではない。粒子数は必然的に小さくなるが、二次元の振動子系に近似的な基礎振動へのエネルギー分配をしらべると(Hirooka, Saito)一次元系とほとんど同じであることがわかる。

そこで (1) ~ (3) の方程式の解の不安定性や break down
 に解法をみよと いう考えが有力になった。たとえば
 Zabusky, Kruskal¹⁰⁾ は (2) の微分微分方程式を変形
 して非線形流体力学の式

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -u u_x$$

の類似からあるところでは break down が生じ、それ以上は
 解の一意性が失われると考えた。このような break down
 のおこることが ergodicity のために必要なこととした。
 break down のおこるところは、従前の示したところによ
 り、FPU の実験では一つの周期¹² に対して余程小さいこ
 ろである。(3) の差分差分方程式で示した FPU の解は
 ほどこは何の異常も生じていない。(3) はしばしば (2)
 の解のために使われ、ある条件下に (3) の解は (2) の解
 に近づくことがわがっている。しかし差分が有限であるとき、
 (2) と (3) とは解の安定性に大きな差があるのかは未知な
 い。もしそうなら、(1) と (3) の間にもあるかも知れない。

Zabusky のような break down が (1) のおこるかどうかは不
 明である。

一方、Chirikov¹¹⁾ は 4 次のポテンシャルをもつ系に
 対し、基準振動になおして

$$\ddot{Q}_R + \omega_R^2 Q_R = -\frac{\beta}{8N} \sum_{p,q,s} B_{pq,s} Q_p Q_q Q_s$$

の方程式の解の性質を述べた。右辺の項のうち、適当なものを
左辺に移して近似的に

$$\begin{aligned} \ddot{Q}_R + \omega_R^2 Q_R \left\{ 1 - \frac{3\beta}{4N} \omega_R^2 (2 - \omega_R^2) Q_R^2 \right\} \\ = \frac{\beta}{8N} \sum F_{km} \cos \vartheta_{km} \end{aligned}$$

とする。ここで右辺は外力とみなす。この解を

$$Q_R = C_R(t) \cos \vartheta_R(t), \quad \dot{\vartheta}_R = \omega'_R(t)$$

とすると、

$$\dot{C}_R = \frac{\beta F_{km}}{16 \omega'_R N} \sin \psi_{km}, \quad \dot{\vartheta}_R = \Omega_{km} - \psi_{km}$$

$$\dot{\psi}_{km} = \omega'_{km} - \omega_R + \frac{\beta F_{km}}{16 C_R \omega'_R N} \cos \psi_{km}$$

かえりか、 $C_R(t)$ の振幅がゆるやかに変化するならば

$$X = \frac{|\dot{\psi}_{km}|_{\max}^2}{(\Delta\omega)^2} \ll 1,$$

又は

$$\frac{\beta F_{km}}{4N \omega'_R} \frac{d\Omega_{km}}{dC_R} \frac{1}{(\Delta\omega)^2} \ll 1$$

であるならば、 ψ_{km} は $C_R(t)$ の振幅の frequency である。

$X > 1$ 時は振幅の modulation が乱雑になり、stochastic

至性度をもちはじめると考えた。また十分粒子数が大きければ、ほとんどつねに stochastic 領域¹⁾にあり、エルゴード性が保証される²⁾と考えた。

これらの見解については今後十分検討をしに行かなければならない。

文 献

- 1) Fermi, Pasta, Ulam: Los Alamos Scientific Laboratory Report LA-1940 (1955)
- 2) Fermi: Collected Papers vol 2. p.977
- 3) 2) をみよ
- 4) P.C. Hemmer: Dynamic and stochastic type of motion in the linear chain, thesis, Trondheim, 1959.
- 5) J. Ford: J. Math. Phys. Σ (1961) 387. Ford, Waters: *ibid.* Ξ (1963) 1293
- 6) E.A. Jackson: J. Math. Phys Ξ (1963) 551; Ξ (1963) 686.
- 7) Saito, Hirooka: J. Phys. Soc. Japan Ξ (1967) 157, 167.
- 8) R.S. Northcote, R.B. Potts: J. Math. Phys, Σ (1964) 399
- 9) A. N. Kolmogorov; Proceedings of the International Congress of mathematicians, Amsterdam, (North-Holland Publishing Co., Amsterdam, 1957), Vol. 1, pp. 315-333. (文献 5) から引用)

- 10) N. Zabusky ; J. Math. Phys. 3 (1962) 1028
M. K. Kruskal , N. J. Zabusky ; J. Math. Phys 5 (1964) 231
- 11) F.M. Israelijev, B.V. Chirikov ; "The statistical properties
of nonlinear string", Novosibirsk, 1965.

