

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, いっでもノーマルモードに分けられる。ノーマルモードは独立であって, その内エネルギーの交換は行なわれないから, 一つのノーマルモードにエネルギーを与えると, いっでもそのエネルギーは, そのノーマルモードにのみとどまっている。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, すべてのノー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。

実在の系は多少とも非調和性があり, そのために熱平衡の成りが保証されるのだろうと考えられる。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

すべこの素を非線形性におしつけ、非線形こそお金の神
であると信じていた。

しかし電子計算機の発達によって事情は一変した。計算
機実験によって100%の仮定的な性検証を豫見することが出来る
ようになったからである。計算機を用いて非線形振動
子系のエネルギー中性をしるべく最初の試みは Fermi, Pasta,
Ulam^{1),2)}である。

一次元の格子の振動を考える。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。右辺の第2項が非線形項であって、3束のポテン
シャルでは $f(y) \propto y^2$, 4束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)

とかくことができる。ここで p は、3束又は4束のポテ
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
行うこともできる。その式は(2)に於て差分近似と

みなすことができる。時間について離散化した変数を y_i^j と置き、時間間隔を τ とすると

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

(差分差分方程式)

と表わすことができる。ここで δ_i^2 , δ_j^2 は空間又は時間に対する2階の差分オペレーターである。

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標準振動力は

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

である。

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

によって標準座標 x_k を導入すると、非線形方程式 (1) 式は一般に

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

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

F.P.U は $N=32$, $K/m=1$, $\lambda=1/4$, $\hbar^2=1/8$ にし、一番低い標準振動に 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っ子がもめた。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っ子が、高いモードにはほとんどうっがらず、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みんなすべてのエネルギーがかえってしまった。はじめに豫期したようなエネルギーの等分配はあこしなかった。Fermi は力を2集のときも3集のときも、また broken linear force のときもしるべ、初期条件やその他、条件をかえたが、ほぼ同一の結論であった。

その後この研究に対していろいろな考えがあこった。1961年 Tuck と Menzel³⁾ はもっと長い時間に対しての挙動をしるべた。FPUが見出したように、ある時間がたつと、再びはじめの状況にかえ子が、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、こんどは誤差が減少し、16周目には第1周目よりもっとはじめの状況に近ずいた。

一方 Hemmer⁴⁾ は (4) の ω_R の内は

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

が成るような整数 n_R の全部が0でないような組が

あるものには (共鳴条件), N が素数であるか, 2 のべき乗以外でなければならぬことを示した。FPU は $N=16, 32, 64$ の場合を計算している。このときは共鳴条件 (7) を満たさない。Fond⁵⁾ はモードの間に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 $N=6$ にすると (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 次の力であうかたれが相互作用に對し 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いが $\omega_1 = 0.4$, $\omega_2 = 0.8$, $\omega_3 = 1.2$, $\omega_4 = 1.6$, $\omega_5 = 2.0$ とおいて (7) を満たすようにするとエネルギー分配の様子は一変してそのようすは 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さいときであって、 λ の大きいときには

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

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るのは ω_k の間に (7) の条件が成りか

うばかりでなく、 Ω に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、特に干渉物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たしかめた。

調和振動子系を基準振動とみれば独立な系のあつまりであるが、粒子系のまゝ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あっ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、その速さの2乗の長時間平均をしうべると、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だけみるとこの系は一定の温度をもった熱平衡状態に達したように見える。しかし、粒子内の速さの相関をしうべると、隣り合った粒子内については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うべとみると、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ルゴード性を保証してくれなかった。(Saito, Hirooka³⁾)

粒子内、相互作用を取り上げることも重要である。Northcote and Potts⁸⁾は 2つの粒子内は 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極めてよく成り立つた。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、速さの2乗および隣りの粒子の速さとの相互作用をしうべると、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のようである。

§2. 解決法

以上のべたことで、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ないという Kolmogorov⁹⁾の主張もある。もしこのべたことは、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する基準振動へのエネルギー分配をしうべきこと(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
に解を求めよう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ブレイクが生じ、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
の起こることが ergodicity のために必要とした。

break down の起こるころは、図 3 の示したところによ
り、FPU の実験では 100 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しるべた FPU の解で
はそこで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も知れない。
もしそうなら、(1) と (3) の間にもあるかも知れない。

Zabusky のいう breakdown が (1) で起こるかどうかは不
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

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

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

$$\begin{aligned} \ddot{Q}_K + \omega_K^2 Q_K \left\{ 1 - \frac{3\beta}{4N} \omega_K^2 (2 - \omega_K^2) Q_K^2 \right\} \\ = \frac{\beta}{8N} \sum F_{Km} \cos \vartheta_{Km} \end{aligned}$$

とする。ここで右辺は外力とみなす。この解を

$$Q_K = C_K(t) \cos \vartheta_K(t), \quad \dot{\vartheta}_K = \omega'_K(t)$$

とし、

$$\dot{C}_K = \frac{\beta F_{Km}}{16 \omega'_K N} \sin \psi_{Km}, \quad \vartheta_K = \vartheta_{Km} - \psi_{Km}$$

$$\dot{\psi}_{Km} = \omega'_{Km} - \omega'_K + \frac{\beta F_{Km}}{16 C_K \omega'_K N} \cos \psi_{Km}$$

かえりながら、 $C_K(t)$ 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

$$\frac{\beta F_{Km}}{4N \omega'_K} \frac{d\vartheta_{Km}}{dC_K} \frac{1}{(\Delta\omega)^2} \ll 1$$

でよい場合はなる。 ψ_{Km} は $C_K(t)$ の振幅の frequency である。

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

な性質をもちはじめると考えた。また十分粒子数が大きければ、ほとんど一様に stochastic な領域にあり、エルゴード性が保証されるだろうと考えた。

これらの見については今後十分検討をしてみなければならぬ。

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.* Σ (1963) 1243
- 6) E.A. Jackson: J. Math. Phys. Σ (1963) 551; Σ (1963) 686.
- 7) Saito, Hirooka: J. Phys. Soc. Japan Σ (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.

