

非線形格子振動子系の長時間挙動

早稲 理工 志 田 一

§1. 非線形振動子系

孤立系における平衡への接近やエルゴード性の問題は統計力学における最も重要な課題であり、熱力学ではしばしば公理と見做されてゐる。この種の公理は経験から生まれたいわゆる可逆的な力学に従う多粒子系でしかなく、平衡と達し、またいかにしてエルゴード性がある、と熱力学が保証し、統計力学に確率を導入し、その許しと、まことに古くから議論されてきた問題であるが、未だ明らかになっていない。多粒子系に対し、経験的な力学過程から統計的性質を導くことは統計力学の基礎をよび、不可逆過程、統計力学に於ける重要な問題である。

この様な立場から、非線形振動子系の力学過程についてこの研究が行われてきた。一般の運動方程式は、粒子がバネで直線上に結ばれた一次元の場合に好く、これは、

$$\ddot{q}_i = (q_{i+1} - 2q_i + q_{i-1}) + \lambda \left\{ (q_{i+1} - q_i)^{p+1} - (q_i - q_{i-1})^{p+1} \right\}, \quad (1)$$

以下をいう。右辺の第2項は非線型項で、3乗・第1項に
 3乗・第1項では $p=1$, 4乗・第1項に3乗・第1項では $p=2$, であ
 る。又連続の極限では

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

で表わされる。

これらの方程式は、 $\lambda=0$ の harmonic 近似の場合
 には、一般に厳密解が求められる。(N+1) 節の両端
 の固定された系に対して、($y_0 = y_N = 0$)、(1) の
 方程式は

$$y_k = \left(\frac{2}{N}\right)^{1/2} \sum_{i=1}^{N-1} x_i \sin \frac{ik\pi}{N} \quad (3)$$

に $F \rightarrow 2$ 基準座標へ変換すると

$$\ddot{x}_j = -\omega_j^2 x_j \quad (4)$$

$$\omega_j = 2 \sin \frac{j\pi}{2N}, \quad j=1, \dots, N-1 \quad (5)$$

とす。各2つの1-2モードは独立であり、(5)と同
 じエネルギーの交換が行われるから、各1-2モード
 のエネルギー

$$\bar{E}_j = \frac{1}{2} (\dot{x}_j^2 + \omega_j^2 x_j^2) \quad (6)$$

は一定に保たれる。1つのノーマルモードにエネルギーを
 与えても、いつまでそこのエネルギーは、他のノーマルモ
 ドにのみとどまっていける。もしこの系の超平衡に
 達したとすると古来系とみなされ限り、そのノーマル
 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、超平衡
 への接近の問題を討論するとは出来ない。

この様に、実在の系では多少とも非可逆性がある
 と、このために超平衡の成立が保証されることが期
 待できる。

2. FPD problem

非線形振動系に対しては、必ずしも非線形性
 があれば統計的性質が存在し、エルゴード性が
 保証されることが期待されているが、この問題に
 対して計算機実験から問題の質的な性格を予
 見しようとする最初の試みは、Fermi, Pasta, Ulam^{1), 2)}
 によって行われた。Fermi は非線形相互作用
 によって線形の場合の基準振動の固有エネルギー
 の交換が起き、各モードの固有エネルギーの
 等分配が実現されるのであらうと予想した。

有限計算のために、有限の時間間隔 Δt を用いて
 近似をなす。時間 t を $i \Delta t$ として高次散化
 した変数を y_i とし、時間間隔 Δt とすると

$$\frac{1}{\Delta t^2} y_i^2 y_i^2 = \left\{ 1 + \lambda (y_{i+1}^2 - y_{i-1}^2)^p \right\} y_i^2 y_i^2 \quad (7)$$

と表わすことができる。ここで y_i^2 , y_{i-1}^2 は空間
 又は時間 t に対する 2 階の差分オペレーターである。

F.P.D は $N=32$, $\lambda = \frac{1}{4}$, $\Delta t^2 = \frac{1}{8}$ にして
 初期条件として

$$y_i^0 = a \sin(i\pi/N), \quad a=1.$$

$$y_0 = y_N = 0$$

である、(7) の $p=1$ の場合はこのエネルギー
 高一次準振動にどのような移動も生じない。
 (しかし結果は期待どおり、2, 3, 4, の低い
 振動数のモードにはいくらかのエネルギーはうつる
 が、高いモードにはほとんどうつらない。しかも必ず時間
 ごと、一番最初のエネルギーを持つ最低のモードにほと
 んどすべてのエネルギーが戻り Recurrence period
 が存在し、全てのモードへのエネルギーの等分配は

同様に、 $p=1$ として示した。Figure 3 は $p=1$ の
 とき、 τ の broken linear force のときも同様、
 ほぼ同一の結論である。Tucke³⁾ は $p=1$,
 $N=16$ の場合について更に長時間をわたって
 の挙動を調べた。FPU の見出しによると、10 時間
 間がたつと、再びはじめの状態にかえり、2 回目には
 その誤差が少し増え、3, 4 周毎に誤差が少し増え
 目には 8% ほどになる。これは更に長時間をわた
 ると、今度は誤差が減少し、14 回目には 1 回目
 よりももっとはじめの状態に近づく。

この様に、一次元非線形格子振動子系に対する種々の
 実験は基準振動の固有エネルギーの mixing は必ず
 あり、quasi-periodic な性質の存在を示して
 示し、この意味で非線形性がある、これは non-ergodic
 な挙動の存在を示している。この様な結果は
 Kolmogorov⁴⁾ や Arnold⁵⁾ により示され
 たり、しかし finite な摂動でも、力学系には quasi-
 periodic な性質の存在するという主張にも一致す
 る。又同様の結果は、^{最近} τ 周を τ と非線形格
 子振動系に於いて、ポテンシャル $\phi(r)$ の、

$$p(r) = \frac{\alpha}{b} e^{-br} + \alpha r$$

でも、場合 normal mode の値をもつ解は見出し
 $u_t = 0$, Korteweg-de Vries

(KdV) の方程式

$$u_t + u u_x + \beta u_{xxx} = 0$$

について、独立にみつけた解 (soliton) が見
 出されたと Zabusky⁷⁾ の結果から分かった。

これらの結果は非線形系に存在する normal -
 coordinate の存在を示している。

と、二次非線形格子振動子系。

しかし、非線形性がある場合に一般に基準振動の
 存在し、非エルゴード的であることは、更に非線形性
 の入った基準振動の間の変換条件についての考察を行
 わなければならぬ。非線形性のある場合と、
 Northcott & Potts⁸⁾ は一次元の調和振動子系で調和
 条件をもつ場合には、モード間のエネルギーの再分配は見
 出され、ergodic な挙動を示すことを計算機実験に
 行なった。又 Ford⁹⁾ はモード間の

のエネルギーに交換してはならない、 ω_k の分配

$$\sum n_k \omega_k = 0 \quad (8)$$

が成り立つような整数 n_k の全部が 0 になるような組はない
(要項条件) ^{必要} であることを見せし、 $\omega_k = k\pi/N$ として
「(8) を満たすような n_k とエネルギーの分配」
がより容易に行われることを見せた。 Jackson⁽¹⁰⁾
は (8) の要項条件は非可換性入 α によって与えられ
て、 λ の大さによって与えられる

$$\sum n_k \Omega_k(\lambda) = 0 \quad (9)$$

と示されることを見せた。 Ω_k は λ の関数であり
 ω_k から導出した振動数である。 又、結晶の不
完全性のエネルギー交換で与えられると指摘した。

2次元の振動子系として $(N+2) \times (N+2)$ 個の周囲が
固定された正方形格子で4束のポテンシャルエネルギーを
考へる。 運動方程式は

$$\ddot{u}_{l,m} = \left(u_{l+1,m} - 2u_{l,m} + u_{l-1,m} \right) \\ + \lambda \left\{ \left(u_{l+1,m} - u_{l,m} \right)^3 - \left(u_{l,m} - u_{l-1,m} \right)^3 \right\}$$

7±

$$+ \gamma (q_{l,m+1} - 2q_{l,m} + q_{l,m-1}) + \lambda \gamma \{ (q_{l,m+1} - q_{l,m})^3 - (q_{l,m} - q_{l,m-1})^3 \} \quad (10)$$

$$q_{l,m} = v_{l,m} \quad q_{0,m} = q_{N+1,m} = q_{l,0} = q_{l,N+1} = 0$$

で表わされ、 γ は非中力バネ定数であり、 λ は非線形項の大きさを表わす。この場合には調和振動子 ($\lambda = 0$) に近づく基準振動は

$$\omega_{lj} = 2 \left(\sin^2 \frac{j\pi}{2(N+1)} + \gamma \sin^2 \frac{j\pi}{2(N+1)} \right)^{1/2} \quad (11)$$

で与えられる。この場合には一次元の場合と異なり、 γ を適当に選ぶことにより、可なり任意に基準振動スペクトルを作ること出来る。として数少ない場合には、 γ を基準振動の間隔を任意に小さくし、振動数をほぼ等しい

いく、かの基準振動をつくること出来る。例えは、 $N=3$, $\gamma=0.9$ のときには Table に示されるように、 $(1,3)$, $(2,2)$, $(3,1)$ モードはほぼ 1.9 に等しい振動数をもつことが見られる。

Mode	(1, 1),	(1, 2),	(1, 3),	(2, 1),	(2, 2),	(2, 3),	(3, 1),	(3, 2),	(3, 3)
ω_{lj}	1.06	1.54	1.91	1.59	1.95	2.25	1.99	2.28	2.55

この様な系に対しては, 1 の基準振動を固定した
時に他の基準振動へのエネルギーの移動は行われずと予想さ
れる。数値実験の結果は実際にはどうであることが示された。

そこで, 数値計算は (10) の方程式で Runge-Kutta-
Gill 法を用い, 計算の consistency check は

total energy conservation law から与えられる。
この計算では total energy の誤差は 0.01%
以下で与えられる。Total energy E , 及 ω 各モードの
エネルギー ϵ_{ij}

$$\begin{aligned} E &= E_k + E_h + E_a \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i,m=1}^N v_{i,m}^2 + \frac{1}{2} \sum_{i,m=1}^N \left[(y_{i+1,m} - y_{i,m})^2 + r (y_{i,m+1} - y_{i,m})^2 \right. \\ &\quad \left. + \frac{\lambda}{4} \sum_{i,m=1}^N \left[(y_{i+1,m} - y_{i,m})^4 + r (y_{i,m+1} - y_{i,m})^4 \right] \right] \end{aligned}$$

$$\epsilon_{ij} = \frac{1}{2} (\dot{x}_{ij}^2 + \omega_{ij}^2 x_{ij}^2) \quad (12)$$

である。

$$x_{ij} = \frac{2}{N+1} \sum_{i,m=1}^N y_{i,m} \sin \frac{i\pi}{N+1} \sin \frac{jm\pi}{N+1}$$

である。 $N=3, 5$ について主に計算を行なった。

その主な結果は次の様である。

- (1) 基準振動の周期, $\omega_0 = 2\pi/\tau_0$, ω は ω_0 に
ある固有値が存在し, ω が ω_0 より小さい入射エネルギー
エネルギー分配は余り起らず, 非エルゴード的振動
を示す。
- (2) ω の固有値より大きい時には, エネルギー分配は
ある時間 (induction period) の後に急激に
おこり, 始めに励起した振動数に近い振動数をも
たモードの間に最初エネルギーがうつり, 次に
他のモードに移っていく。
- (3) induction period は初期条件として励起す
る以外のモードにも $1/100$ 程度のエネルギーを分
け与えることになり短かく済むことが出来る。
- (4) ω が小さいときには induction period
は長くなり, ω の固有値に近づくとき無限に長くな
る。
- (5) エネルギー分配が行われる系では, 粒子の運動
エネルギー, 粒子間の速度の相関時間 τ の長時間
平均 τ にも平衡に達する 傾向がみら
れる。

こゝでは, 2次元非線形格子振動系では判明容易に,

各モードの間のエネルギーの再分配の傾向がみられ、これはモード的挙動でも、 ω_{ij} と表示されるが、これらの結果は2次元の場合の特徴とは考えられたい。2次元の場合にエルゴード的と行った条件の意味して、適当な条件の下では一次元と同様の結論が得られることが示される。

§4. 結論

上に述べた結果は非線形格子振動子系では、共鳴条件

$$\omega_{ij} - \omega_{i'j'} \leq \alpha(\lambda)$$

が成り立つ様な適当な条件の下では、モード間のエネルギーの sharing が成り立ち、超平衡に近づく傾向がみられることが示された。このような結果は Fermi の最も近い振動モードを励起した場合には、

超平衡に達するためには、より大なる非線形性が必要となる

ことが示されている。又閾値 λ_0 が存在するとして、

chirikov¹¹⁾ や Sagdeev¹²⁾ は非線形性や mode number にある 2つの領域が存在し、一方は統計的領域 (ergodic) であり、他は Kalmogorov 領域 (non-ergodic) であるという主張と一致している。

参考文献

- 1) Fermi, Pasta, Ulam; Los Alamos Scientific Laboratory Report LA-1940 (1955)
- 2) Fermi: Collected Papers vol 2. p. 977
- 3) 2) E & I
- 4) A. N. Kolmogorov: Proc. Intern. Congr. Mathematicians Amsterdam (North Holland, 1957) 1, 315.
A. N. Kolmogorov: Dokl. Akad. Nauk. SSSR (1954) 527.
- 5) V. I. Arnold: Usp. Math. Nauk 18 (1963) 91.
V. I. Arnold and A. Avez; Ergodic problem of classical mechanics (Benjamin, New York, 1968) Chap. 4. p. 81.
- 6) M. Toda: J. Phys. Soc. Japan 22 (1967) 431, 22 (1968) 501
- 7) N. J. Zabusky; Nonlinear partial differential equations (Academic Press, 1967)
N. J. Zabusky and M. D. Kruskal; Phys. Rev. Letters 15 (1965) 241.
- 8) R. S. Northcote and R. B. Potts; J. Math. Phys. 5 (1964) 323.

- 9) J. Ford ; J. math. phys. 2 (1961) 387
J. Ford and J. Waters ; *ibid* 4 (1963) 1273.
- 10) F. A. Jackson ; J. math. phys. 4 (1963) 551.
- 11) F. M. Israiliev and B. V. Chirikov ; Soviet physics - Doklady 11 (1966) 30.
- 12) G. M. Zaslavsky and R. Z. Sagdeev ; Soviet physics - JETP 25 (1967), 718.