数理解析研究所講究録
第69巻 1969年 67-79

非線形格子振動子系の長時間挙動

早大 理工　広岡 一

§1. 非線形振動子系

孤立系における熱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第0法則といわれている。この種の法則は経験から生まれたわけであるが、可逆的な力学に従う多粒子系でいかにして熱平衡に達し、またいかにしてエルゴード性があって熱力学が保証され、統計力学に確率が導入されるのを許しているかについては古くから議論されてきた問題であるが未だ明らかにされていない。多粒子系に対して純粋に力学過程から統計的性質を導くことは統計力学の基礎および不可逆過程の統計力学に対して重要な問題である。

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

$$\ddot{y}_i = (y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}) + \lambda\left\{(y_{i+1} - y_i)^{p+1} - (y_i - y_{i-1})^{p+1}\right\}, \quad (1)$$

で与えられる。右辺の第2項が非線型項で，3乗のポテンシャルでは $p=1$，4乗のポテンシャルでは $p=2$，である。又連続の極限では

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

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。$(N+1)$ 個の両端が固定された系に対して（$y_0 = y_N = 0$），(1) の方程式は

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

によって基準座標に変換すると

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

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

となり，各々のノーマルモードは独立であって，その間にエネルギーの交換は行われないから，各ノーマルモードのエネルギー

$$E_j = \frac{1}{2} \left(\dot{x}_j^2 + \omega_j^2 x_j^2 \right) \qquad (6)$$

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。　もしこの系が熱平衡に達した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討論することは出来ない。

この様に，実在の系では多少とも非調和性があって，そのために熱平衡の成立が保証されていると期待できる。

§2. FPU problem

非線形振動系においては，わずかで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たが，この問題につい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が，Fermi, Pasta, Ulam[1,2] によって行われた。　Fermi らは非線形相互作用によって線形の場合の基準振動の間にエネルギーの交換がおこり，各モードの間のエネルギーの等分配が実現されるのであろうと予想した。

数値計算のために(1)の左辺の時間微分を差分でおきかえた近似をつかう。時間について離散化した変数を y_i^j とし時間間隔を t とすると

$$\frac{1}{t^2}\delta_j^2 y_i^j = \left\{1+\lambda\left(y_{i+1}^j - y_{i-1}^j\right)^p\right\}\delta_i^2 y_i^j \tag{7}$$

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。

F.P.U は $N=32$, $\lambda=\frac{1}{4}$, $t^2=\frac{1}{8}$ において初期条件として

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

$$y_0 = y_N = 0$$

を与え、(7)の $p=1$ の場合にそのエネルギーが高い規準振動にどの様に移るかをしらべた。しかし結果は期待に反して、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ほとんどすべてのエネルギーが戻る recurrence period が存在し、全てのモードへのエネルギーの等分配の

おこらないことを示した。Fermi 等は p [illegible] のときも、また broken linear force のときもしらべ、ほぼ同一の結論であった。Tuck[3] は $p=1$, $N=16$ の場合について更に長い時間にわたってその挙動をしらべた。FPU が見出したように、ある時間がたつと、再びはじめの状態にかえるが、2周目にはその誤差が少し増え、3，4 周毎に誤差がふえ、7周目には 8% ほどになった。ところが更に時間をかけると、こんどは誤差が減少し、14 周目には第1周目よりもっとはじめの状態に近ずいた。

この様な、一次元非線形格子振動系における種々の実験は基準振動の間のエネルギーの mixing はあまりおこらず quasi-periodic な性質の存在することを示し、この意味で非線形性があっても non-ergodic な挙動の得られることを示した。この様な結果は Kolmogorov[4] や Arnold[5] による充分に小さな、しかし finite な摂動をもった力学系では quasi-periodic な性質が保存されるという主張にも一致する。又同様な結果は、最近戸田[6]によって非線形格子振動系において、ポテンシャル $\Phi(r)$ が、

$$P(r) = \frac{a}{b} e^{-br} + ar$$

をもつ場合 normal mode の性質をもつ解の見出されることや，'Korteweg-de Vries (KdV) の方程式'

$$u_t + uu_x + \beta u_{xxx} = 0$$

について，独立にふるまう様な解（soliton）の見出されるという Zabusky[7] の結果からも示される。これらの結果は非線形な系における normal-coordinate の存在を示している。

§3. 二次元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が存在し，非エルゴード的であるかについては，更に非線形性の大きさや　基準振動の間の共鳴条件についての考察を行わなければならない。非線形性の大きな場合として，Northcote と Potts[8] は一次元の調和振動子系で剛体斥力をもった場合に，モード間のエネルギーの等分配が見出され，ergodic な挙動を示すことを計算機実験で行なった。又 Ford[9] はモードの間

に充分なエネルギー交換をおこすためには，ω_k の間に

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

が成り立つような整数 n_k の全部が0にならないような組がある(共鳴条件)ことが必要であることを示し，$\omega_k = k\pi/N$ よりずらして(8)を満たすようにするとエネルギーの分配がより容易に行われることを示した。Jackson[10] は(8)の共鳴条件は非調和性 λ の小さいときであって，λ の大きいときには

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

でなければならないことを示した。Ω_k は λ があるために ω_k からシフトした振動数である。又結晶の不完全性がエネルギー交換を助けることを指摘した。

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格子で4乗のポテンシャルをもった系を考える。運動方程式は

$$\ddot{y}_{l,m} = (y_{l+1,m} - 2y_{l,m} + y_{l-1,m}) + \lambda\{(y_{l+1,m} - y_{l,m})^3 - (y_{l,m} - y_{l-1,m})^3\}$$

$$+\gamma\left(y_{l,m+1}-2y_{l,m}+y_{l,m-1}\right)$$

$$+\lambda\gamma\left\{\left(y_{l,m+1}-y_{l,m}\right)^3-\left(y_{l,m}-y_{l,m-1}\right)^3\right\} \qquad (10)$$

$$\dot{y}_{l,m}=v_{l,m} \qquad y_{0,m}=y_{N+1,m}=y_{l,0}=y_{l,N+1}=0$$

で表わされ，ここで γ は非中心力のバネ定数であり，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（$\lambda=0$）に対する基準振動は

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

で与えられる。この場合には一次元の場合と異り，γ を適当に選ぶことによって，可成り任意に基準振動スペクトルを作ることが出来る。そして粒子数の少ない場合においても基準振動の間隔を任意に小さくし，振動数がほぼ等しいいくつかの基準振動をつくることができる。例えば，$N=3$，$\gamma=0.9$ 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 の等しい振動数をもつことが見出される。

Mode	(1, 1)	(1, 2)	(1, 3)	(2, 1)	(2, 2)	(2, 3)	(3, 1)	(3, 2)	(3, 3)
ω_{ij}	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つの基準振動を励起した時に他の基準振動へのエネルギーの移動が行われると予想される。数値実験の結果は実際にそうであることが示された。ここで，数値計算は (10) の方程式を Runge-Kutta-Gill 法を用い，計算の consistency の check は total energy conservation law から与えられる。これらの計算では total energy の誤差は 0.01% 以下で与えられる。Total energy E，及び各モードのエネルギー ε_{ij} は

$$E = E_k + E_h + E_a$$

$$= \frac{1}{2}\sum_{l,m=1}^{N} v_{l,m}^2 + \frac{1}{2}\sum_{l,m=1}^{N}\left[(y_{l+1,m} - y_{l,m})^2 + r(y_{l,m+1} - y_{l,m})^2 \right]$$

$$+ \frac{\lambda}{4}\sum_{l,m=1}^{N}\left[(y_{l+1,m} - y_{l,m})^4 + r(y_{l,m+1} - y_{l,m})^4 \right],$$

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2}\left(\dot{x}_{ij}^2 + \omega_{ij}^2 x_{ij}^2 \right) \qquad (12)$$

ここで

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

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) 基準振動の間隔，$\omega_{j+1}-\omega_j$，に依存するλのある閾値が存在し，それより小さいλではエネルギーの分配は余り起らず，非エルゴード的な挙動を示す。

(2) λが閾値より大きな時には，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つたモードの間に最初エネルギーがうつり，次第に他のモードに移ってゆく。

(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与えておくことによって短かくすることが出来る。

(4) λが小さくなるにつれて induction period は長くなり，λが閾値に近ずくと無限に長くなる。

(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についての長時間平均についても熱平衡に達する傾向がみられる。

この様に，2次元非線形格子振動子系ではより容易に，

各モードの間のエネルギーの等分配の傾向がみられ，エルゴード的挙動をもつことが示されるが，これらの結果は2次元の場合の特徴とは考えられない。2次元の場合にエルゴード的となった条件を吟味して，適当な条件の下では一次元と同様な結論の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

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

が成り立つ様な適当な条件の下では，モードの間のエネルギーの sharing がおこり，熱平衡に近ずく傾向へなることを示した。この様な結果は Fermi らの最も低い振動モードを励起した場合には，

熱平衡に達するためには，より大きな非線形性を必要とすることを示している。又閾値 λ_0 が存在することは，

chirikov[11] や Sagdeev[12] による非線形性や mode number による2つの領域が存在し，一方は統計的領域（ergodic）であり，他は Kolmogorov 領域（non-ergodic）

であるという主張と一致している。

文献

1) Fermi, Pasta, Ulam; Los Alamos Scientific Laboratory Report LA-1940 (1955)

2) Fermi: Collected Papers vol 2. p. 977

3) 2) を見よ

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 (Benjamine, New York, 1968) chap. 4. p. 81.

6) M. Toda: J. Phys. Soc. Japan 22 (1967) 431, 23 (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) 383.

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.