数理解析研究所講究録
第 1989 巻 2016 年 1-7

Fermi-Pasta-Ulam 格子における Discrete Breather 解の存在と安定性

NTT コミュニケーション科学基礎研究所　吉村 和之 (Kazuyuki Yoshimura)
NTT Communication Science Laboratories

概 要

Discrete Breather とは，非線形格子系における空間的に局在した周期解である．1次元 Fermi-Pasta-Ulam 格子に関し，空間対称性の異なる2種類の Discrete Breather 解（Sievers-Takeno モード，および，Page モード）の存在を証明した．さらに，それらの解の安定性解析を行い，Sievers-Takeno モードのスペクトル不安定性，および，Page モードのスペクトル安定性を証明した．

1 はじめに

空間的離散性を有する非線形力学系において，空間的に局在した振動モードが存在し得ることが Takeno らにより最初に指摘された [1, 2]．この局在モードは，系の運動方程式の局在周期解であり，Discrete Breather (DB)，または，Intrinsic Localized Mode と呼ばれている．DB は，現実の物理系における普遍的な励起構造の一つであると考えられており，ジョセフソン結合素子系 [3, 4]，非線形光導波路アレイ [5]，カンチレバーアレイ [6, 7] 等において実験的にも観測されている．DB に関して詳しくは，例えば，解説 [8, 9, 10, 11, 12, 13] を参照されたい．

数理的な観点からは，DB 解の存在証明と安定性解析が基本的な問題である．これらの問題を扱う際に有用な概念として，anti-integrable limit と呼ばれる概念が知られている [14, 15]．この概念に基づき，非線形 Klein-Gordon 格子 [15] や2原子 Fermi-Pasta-Ulam (FPU) 格子 [16] など種々の格子モデルに対して，DB 解の存在証明が成されている．また，anti-integrable limit を定義できる種々の格子モデルに対し，DB 解の anti-integrable limit 近傍での安定性に関する結果も得られている [17, 18, 19, 20, 21, 22, 23]．

物理学における重要な格子モデルの一つとして FPU 格子が挙げられる．Sievers-Takeno (ST) モード [1, 2]，および，Page (P) モード [24] と呼ばれる空間的対称性の異なる2種類の DB 解が存在し得ることが知られている．1次元 FPU 格子において，強く局在した ST モードと P モードの規格化された波形は，それぞれ，近似的に $(\ldots, 0, -1/2, 1, -1/2, 0, \ldots)$，および，$(\ldots, 0, -1, 1, 0, \ldots)$ により与えられる．これら2種類のモードの存在は，近似的な解析計算により指摘され，その後，多くの数値計算により確認されている．

FPU 格子は anti-integrable limit を利用した解析手法を適用できない系である．ST モード解と P モード解の最初の存在証明は，特殊な場合である同次ポテンシャル FPU 格子に対して与えられた [25]．同次ポテンシャル格子の場合，DB 解の存在証明は，系に付随する2次元写像力学系のホモクリニック軌道の存在証明の問題に帰着される．文献 [25] では，このアプローチによる存在証

明がなされている．一方，より一般の非同次ポテンシャルを持つ FPU 格子に関しては，周期関数の空間における写像力学系の中心多様体縮約に基づき，局在性が弱く振幅が十分小さな場合に限って，ST モード解と P モード解の存在証明が与えられている [26]．局在性の強い場合については，ST モード解と P モード解の存在証明は未だ与えられていない．また，ST モード解と P モード解の安定性に関しては，数値計算による結果 [27] は在るものの厳密な結果は未だ無い．

本研究では，非同次ポテンシャルを持つ 1 次元 FPU 格子を周期境界条件下で考え，局在性が強い場合の ST モード解と P モード解の存在定理を与える．加えて，ST モード解と P モード解が，それぞれ，スペクトル不安定/安定であることを示す．以下では，2 節で，FPU 格子モデルと DB 解の空間対称性について説明する．3 節で，準備事項を述べた後，ST モード解と P モード解の存在および安定性に関する定理を述べる．証明については，別の機会に報告する．

2 FPU 格子と解の対称性

本研究では，以下のハミルトニアンで定義される 1 次元 FPU 格子系を考える．

$$H = \sum_{i=-N}^{N} \frac{1}{2} p_i^2 + \sum_{i=-N}^{N} V(q_{i+1} - q_i) \tag{1}$$

ここで，$q_i \in \mathbb{R}$, $p_i \in \mathbb{R}$ である．さらに，周期境界条件 $q_{-(N+1)} = q_N$，$q_{N+1} = q_{-N}$ を仮定する．系の自由度 N_0 は，$N_0 = 2N+1$ である．ハミルトニアン (1) は，直線上に並んだ単位質量粒子が最隣接粒子と非線形相互作用する系を記述している．(1) 式において，q_i と p_i は i 番目粒子の位置と運動量を表す変数である．

$X \in \mathbb{R}$，$\mu \in \mathbb{R}^l$ をパラメータ，$O \subset \mathbb{R}^l$ を $\mu = 0$ の近傍とする．相互作用ポテンシャル V として，次の関数形を仮定する．

$$V(X) = W(X, \mu) + \frac{1}{k} X^k \tag{2}$$

以下の (P1)-(P4) を仮定する:

- (P1) $k \geq 4$ は偶数;
- (P2) $W(X,\mu) : \mathbb{R} \times O \to \mathbb{R}$ は X と μ に関して C^2 級;
- (P3) ${}^\forall X \in \mathbb{R}$ に対し $W(X,0) = 0$;
- (P4) ${}^\forall X \in \mathbb{R}, {}^\forall \mu \in O$ に対し $W(X,\mu) = W(-X,\mu)$.

Example. 代表的な非同次相互作用ポテンシャルの一つとして多項式ポテンシャルがある．(2) 式は，例として $W(X,\mu) = \sum_{r=2}^{k-1} \mu_r X^r$, $\mu = (\mu_2, \ldots, \mu_{k-1})$ の場合を含む.

ハミルトニアン (1) より導出される運動方程式は，次式で与えられる．

$$\dot{q}_i = p_i, \quad \dot{p}_i = V'(q_{i+1} - q_i) - V'(q_i - q_{i-1}), \quad i = -N, \ldots, N \tag{3}$$

$\Gamma(t) = (q_{-N}(t), \ldots, q_N(t), p_{-N}(t), \ldots, p_N(t)) \in \mathbb{R}^{2N_0}$ を (3) 式の周期解とする．周期解 $\Gamma(t)$ に関して (3) 式を線形化すると，以下の変分方程式が得られる．

$$\dot{\xi}_i = \eta_i \tag{4}$$

$$\dot{\eta}_i = V''(q_{i+1} - q_i)\xi_{i+1} - \left\{ V''(q_{i+1} - q_i) + V''(q_i - q_{i-1}) \right\} \xi_i + V''(q_i - q_{i-1})\xi_{i-1} \tag{5}$$

ここで，ξ_i, η_i は変数 q_i, p_i の変分を表す．(4), (5) 式に対して $2N_0 \times 2N_0$ モノドロミー行列が定義される．その固有値は，特性乗数と呼ばれる．周期解 $\Gamma(t)$ のスペクトル安定性は，特性乗数を用いて以下のように定義される．

定義 1. $\rho_j,\ j = 1, \ldots, 2N_0$ を周期解 $\Gamma(t)$ の特性乗数とする．周期解 $\Gamma(t)$ は，$|\rho_j| > 1$ となる ρ_j が存在するときスペクトル不安定，それ以外のときスペクトル安定であると言われる．

ST モード解，および，P モード解の対称性を定義する．以後，単に ST 対称性，P 対称性と呼ぶ．空間 $\mathbb{R}^{N_0}$ 内の点を $x = (x_{-N}, \ldots, x_N) \in \mathbb{R}^{N_0}$ と表す．線形変換 $S_1, S_2 : \mathbb{R}^{N_0} \to \mathbb{R}^{N_0}$ を，それぞれ以下のように定義する．

$$S_1 :\ (S_1 x)_i = x_{-i}, \quad i = -N, \ldots, N$$
$$S_2 :\ (S_2 x)_i = -x_{-i-1}, \quad i = -N, \ldots, N$$

ただし，周期境界条件に対応して $x_{-N-1} = x_N$ と解釈する．運動方程式 (3) に周期解が存在する場合を考え，その解を $\Gamma(t) = (q(t), p(t)) \in \mathbb{R}^{2N_0}$ で表すものとする．ただし，$q(t) = (q_{-N}(t), \ldots, q_N(t))$, $p(t) = (p_{-N}(t), \ldots, p_N(t))$. 周期解 $\Gamma(t)$ の ST 対称性とは，以下の関係式 (6) を満たすことと定義する．

$$S_1 q(t) = q(t),\ S_1 p(t) = p(t), \quad {}^\forall t \in \mathbb{R} \tag{6}$$

一方，周期解 $q(t)$ の P 対称性は，関係式 (7) を満たすことと定義する．

$$S_2 q(t) = q(t),\ S_2 p(t) = p(t), \quad {}^\forall t \in \mathbb{R} \tag{7}$$

(6) 式はサイト $i = 0$ を対称中心とする変位パターンを表し，(7) 式は 2 個のサイト $i = -1, 0$ の中点を対称中心とする変位パターンを表している．

3 主結果

定理を述べる準備として，いくつかの定義を行う．まず，次の常微分方程式を考える．

$$\ddot{\phi} + \phi^{k-1} = 0 \tag{8}$$

$\phi(t) \in \mathbb{R}$ を，初期条件 $\phi(0) = A > 0,\ \dot{\phi}(0) = 0$ を満たす (8) 式の解とする．方程式 (8) は，以下の第一積分を持つ．

$$\frac{1}{2}\dot{\phi}^2 + \frac{1}{k}\phi^k = h \tag{9}$$

式中の $h > 0$ は積分定数である．$h > 0$ を任意に固定したとき，(9) 式は相平面で 1 つの閉軌道を表す．したがって，任意の $h > 0$ の値に対し (9) 式を満たす (8) 式の周期解 $\phi(t)$ が存在する．解 $\phi(t)$ の周期 T は，定数 h $(=A^k/k)$ に依存し，(9) 式を用いて次式で与えられる．

$$T = 2\sqrt{2}\, h^{-(1/2-1/k)} \int_0^{k^{1/k}} \frac{1}{\sqrt{1 - x^k/k}}\, dx \tag{10}$$

式中の積分値は h に依存しないので $T \propto h^{-(1/2-1/k)}$ が得られ，h が 0 から $+\infty$ まで変化するとき，周期 T は $+\infty$ から 0 まで連続的に変化する．これより，任意に与えられた $T > 0$ に対し，(10)

を満たす h が唯一つ定まる．この h に対し，$A=(hk)^{1/k}$ を初期値とする (8) 式の周期解 $\phi(t)$ は，T を周期に持つ．この T 周期解を $\phi(t;T)$ と表す．

次に，$x=(x_{-N},\ldots,x_N)$ とし，空間 $\mathbb{R}^{N_0}$ の部分空間 Π_{ST}, Π_{P} を以下のように定義する．

$$\Pi_{\mathrm{ST}} = \left\{x\in\mathbb{R}^{N_0}\ ;\ S_1x=x\right\} \tag{11}$$
$$\Pi_{\mathrm{P}} = \left\{x\in\mathbb{R}^{N_0}\ ;\ S_2x=x\right\} \tag{12}$$

部分空間 Π_{ST}, Π_{P} は，それぞれ，ST 対称性 (6) および P 対称性 (7) を満たす点からなる $\mathbb{R}^{N_0}$ の部分空間である．

さらに，空間 $\mathbb{R}^{N_0}$ の閉凸部分集合 $B_{m,c,r}\subset\mathbb{R}^{N_0}$ を以下のように定義する．

$$B_{m,c,r}=\left\{x\in\mathbb{R}^{N_0}\ ;\ |x_i|\le c \text{ for } 0\le i\le m,\ |x_i|\le cr^{(k-1)^{i-m}}\text{for } m+1\le i\le N\right\} \tag{13}$$

ここで，m,c,r は $B_{m,c,r}$ を規定するパラメータであり，$m\in\mathbb{N}$, $c>0$, $0<r<1$ とする．(13) 式の定義より，i の増加に従い $|x_i|$ が急激に減少することがわかる．

ハミルトン力学系 (1) の位相空間 $\mathbb{R}^{2N_0}$ を考える．系の位置ベクトルと運動量ベクトルについて $q=(q_{-N},\ldots,q_N)$，$p=(p_{-N},\ldots,p_N)$ と表記する．部分空間 $\Pi_0\subset\mathbb{R}^{2N_0}$ を以下のように定義する．

$$\Pi_0=\left\{(q,p)\in\mathbb{R}^{2N_0};\ \textstyle\sum_{i=-N}^{N}q_i=0,\ \sum_{i=-N}^{N}p_i=0\right\}. \tag{14}$$

これは，系の重心座標と全運動量が共にゼロとなる部分空間であり，系 (1) の不変部分空間である．

以上の準備の下に，ST モード解と P モード解の存在とスペクトル安定性に関する以下の定理が得られる．

定理 1． ポテンシャル関数の条件 (P1)-(P4) を仮定する．$\{a_i\}_{i=-N}^{N}$ と (m,c,r) は，各 k に対して Table 1 に与えられている定数とする．任意の $N\ge 4$，および，任意の $T>0$ に対して，$x\in B_{m,c,r}\cap\Pi_{\mathrm{ST}}$ が唯一存在して $\Gamma^0_{\mathrm{ST}}(t;T)=(u\phi(t;T),u\dot{\phi}(t;T))\in\mathbb{R}^{2N_0}$ が $\mu=0$ なる FPU 格子 (1) の T 周期解となる．ただし $u=a+x$, $a=(a_{-N},\ldots,a_N)$ である．さらに，$\mu=0$ の近傍 $U\subset\mathbb{R}^l$ が存在し，$\mu\in U$ のとき，FPU 格子 (1) の T 周期解の族 $\Gamma_{\mathrm{ST}}(t;T,\mu)\in\mathbb{R}^{2N_0}$ で μ と t について C^1 級，$\Gamma_{\mathrm{ST}}(t;T,\mu)\in\Pi_0$，$\Gamma_{\mathrm{ST}}(t;T,0)=\Gamma^0_{\mathrm{ST}}(t;T)$，かつ，ST 対称性 (6) を満たすものが唯一存在する．$\Gamma_{\mathrm{ST}}(t;T,\mu)$ は 1 個の不安定特性乗数を持ちスペクトル不安定である．

$k=4$	$a_0=0.3762$, $a_{\pm1}=-0.1968$, $a_{\pm2}=8.67\times10^{-3}$, $a_i=0$ (otherwise) $(m,c,r)=(3,\ 9\times10^{-5},\ 3\times10^{-3})$
$k=6$	$a_0=0.5057$, $a_{\pm1}=-0.2539$, $a_{\pm2}=1.1\times10^{-3}$, $a_i=0$ (otherwise) $(m,c,r)=(3,\ 8\times10^{-5},\ 7\times10^{-4})$
$k\ge 8$	$a_0=2\times3^{-(k-1)/(k-2)}$, $a_{\pm1}=-3^{-(k-1)/(k-2)}$, $a_i=0$ (otherwise) $(m,c,r)=(2,\ 2.02\times3^{-(k-1)^2/(k-2)},\ 5\times10^{-3})$

Table 1

定理２．ポテンシャル関数の条件 (P1)-(P4) を仮定する．$\{a_i\}_{i=-N}^{N}$ と (m, c, r) は，各 k に対して Table 2 に与えられている定数とする．任意の $N \geq 4$，および，任意の $T > 0$ に対して，$x \in B_{m,c,r} \cap \Pi_{\mathrm{P}}$ が唯一存在して $\Gamma_{\mathrm{P}}^0(t;T) = (u\phi(t;T), u\dot{\phi}(t;T)) \in \mathbb{R}^{2N_0}$ が $\mu = 0$ なる FPU 格子 (1) の T 周期解となる．ただし $u = a + x$, $a = (a_{-N}, \ldots, a_N)$ である．さらに，$\mu = 0$ の近傍 $U \subset \mathbb{R}^l$ が存在し，$\mu \in U$ のとき，FPU 格子 (1) の T 周期解の族 $\Gamma_{\mathrm{P}}(t;T,\mu) \in \mathbb{R}^{2N_0}$ で μ と t について C^1 級，$\Gamma_{\mathrm{P}}(t;T,\mu) \in \Pi_0$，$\Gamma_{\mathrm{P}}(t;T,0) = \Gamma_{\mathrm{P}}^0(t;T)$，かつ，P 対称性 (7) を満たすものが唯一存在する．$\Gamma_{\mathrm{P}}(t;T,\mu)$ はスペクトル安定である．

$k = 4$	$a_0 = -a_{-1} = 0.323$, $a_1 = -a_{-2} = -0.0535$, $a_i = 0$ (otherwise) $(m, c, r) = (2,\ 3 \times 10^{-4},\ 6 \times 10^{-3})$
$k = 6$	$a_0 = -a_{-1} = 0.4166$, $a_1 = -a_{-2} = -0.015$, $a_i = 0$ (otherwise) $(m, c, r) = (2,\ 9 \times 10^{-5},\ 7 \times 10^{-4})$
$k = 8$	$a_0 = -a_{-1} = 0.44484$, $a_1 = -a_{-2} = -3.65 \times 10^{-3}$, $a_i = 0$ (otherwise) $(m, c, r) = (2,\ 2 \times 10^{-5},\ 2 \times 10^{-4})$
$k = 10$	$a_0 = -a_{-1} = 0.45839$, $a_1 = -a_{-2} = -9.1 \times 10^{-4}$, $a_i = 0$ (otherwise) $(m, c, r) = (2,\ 2 \times 10^{-5},\ 8 \times 10^{-5})$
$k \geq 12$	$a_0 = -a_{-1} = (1 + 2^{k-1})^{-1/(k-2)}$, $a_i = 0$ (otherwise) $(m, c, r) = (1,\ 2.02\,(1 + 2^{k-1})^{-(k-1)/(k-2)},\ 2 \times 10^{-3})$

Table 2

定理 1 において，近似解 a は，$-m < i < m$ なる少数のサイトにおいてのみ非ゼロ成分を持つ強く局在した変位を表している．定理の前半は，$\Gamma_{\mathrm{ST}}^0(t;T)$ の変位 u が近似解 a に近く，その各成分は

$$|u_i - a_i| \leq \begin{cases} c & \text{if } |i| \leq m \\ c\, r^{(k-1)^{|i|-m}} & \text{otherwise} \end{cases}$$

を満たすことを示している．さらに，$a_i = 0$, $|i| \geq m$ なので，下段の不等式は $|u_i| \leq c\, r^{(k-1)^{|i|-m}}$ と等価であり，$|i|$ の増加と共に $|u_i|$ が急激に減少することを示している．これらより，$\Gamma_{\mathrm{ST}}^0(t;T)$ は局在性の強い解であることが分かる．また，μ に関する連続性より，μ が十分小さいとき $\Gamma_{\mathrm{ST}}(t;T,\mu)$ も局在性の強い解となる．同様にして，定理 2 は，$\Gamma_{\mathrm{P}}^0(t;T)$ と $\Gamma_{\mathrm{P}}(t;T,\mu)$ が局在性の強い解であることを示している．

参考文献

[1] S. Takeno, K. Kisoda, and A. J. Sievers, "Intrinsic localized vibrational modes in anharmonic crystals: stationary modes," Prog. Theor. Phys. Suppl. **94**, 242–269 (1988).

[2] A. J. Sievers and S. Takeno, "Intrinsic localized modes in anharmonic crystals," Phys. Rev. Lett. **61**, 970–973 (1988).

[3] E. Trias, J. J. Mazo, and T. P. Orlando, "Discrete breathers in nonlinear lattices: Experimental detection in a Josephson array," Phys. Rev. Lett. **84**, 741–744 (2000).

[4] P. Binder, D. Abraimov, A. V. Ustinov, S. Flach, and Y. Zolotaryuk, "Observation of breathers in Josephson ladders," Phys. Rev. Lett. **84**, 745–748 (2000).

[5] H. S. Eisenberg, Y. Silberberg, R. Morandotti, A. R. Boyd, and J. S. Aitchison, "Discrete spatial optical solitons in waveguide arrays," Phys. Rev. Lett. **81**, 3383-3386 (1998).

[6] M. Sato, B. E. Hubbard, A. J. Sievers, B. Ilic, D.A. Czaplewski, and H. G. Craighead, "Observation of locked intrinsic localized vibrational modes in a micromechanical oscillator array," Phys. Rev. Lett. **90**, 044102 (2003).

[7] M. Kimura and T. Hikihara, "Coupled cantilever array with tunable on-site nonlinearity and observation of localized oscillations," Phys. Lett. A **373**, 1257–1260 (2009).

[8] 武野 正三, "格子力学と非線形波動," 数理科学 No. 387, 54–61 (1995).

[9] S. Aubry, "Breathers in nonlinear lattices: Existence, linear stability and quantization," Physica D **103**, 201–250 (1997).

[10] S. Flach and C. Willis, "Discrete breathers," Phys. Rep. **295**, 181–264 (1998).

[11] S. Aubry, "Discrete breathers: localization and transfer of energy in discrete Hamiltonian nonlinear systems," Physica D **216**, 1–30 (2006).

[12] S. Flach and A. V. Gorbach, "Discrete breathers - Advances in theory and applications," Phys. Rep. **467**, 1–116 (2008).

[13] K. Yoshimura, Y. Doi, and M. Kimura, "Localized modes in nonlinear discrete systems," in M. Ohtsu and T. Yatsui (eds.) *Progress in Nanophotonics 3* (New York: Springer-Verlag, 2014).

[14] S. Aubry and G. Abramovich, 1990 "Chaotic trajectories in the standard map: the concept of anti-integrability," Physica D **43**, 199–219 (1990).

[15] R. S. MacKay and S. Aubry, "Proof of existence of breathers for time-reversible or Hamiltonian networks of weakly coupled oscillators," Nonlinearity **7**, 1623–1643 (1994).

[16] R. Livi, M. Spicci, and R. S. MacKay, "Breathers on a diatomic FPU chain," Nonlinearity **10**, 1421–1434 (1997).

[17] J. F. R. Archilla, J. Cuevas, B. Sánchez-Rey, and A. Alvarez, "Demonstration of the stability or instability of multibreathers at low coupling," Physica D **180**, 235–255 (2003).

[18] D. E. Pelinovsky, P. G. Kevrekidis, and D. J. Frantzeskakis, "Stability of discrete solitons in nonlinear Schrödinger lattices," Physica D **212**, 1–19 (2005).

[19] V. Koukouloyannis and P. G. Kevrekidis, "On the stability of multibreathers in Klein-Gordon chains," Nonlinearity **22**, 2269-2285 (2009).

[20] K. Yoshimura, "Existence and stability of discrete breathers in diatomic Fermi-Pasta-Ulam type lattices," Nonlinearity **24**, 293–317 (2011).

[21] K. Yoshimura, "Stability of discrete breathers in diatomic nonlinear oscillator chains," Nonlinear Theory and Its Applications, IEICE **3**, 52–66 (2012).

[22] K. Yoshimura, "Stability of discrete breathers in nonlinear Klein-Gordon type lattices with pure anharmonic couplings," Journal of Mathematical Physics **53**, 102701 (2012).

[23] D. Pelinovsky and A. Sakovich, "Multi-site breathers in Klein-Gordon lattices: stability, resonances, and bifurcations," Nonlinearity **25**, 3423–3451 (2012).

[24] J. B. Page, "Asymptotic solutions for localized vibrational modes in strongly anharmonic periodic systems," Phys. Rev. B **41**, 7835–7838 (1990).

[25] S. Flach, "Existence of localized excitations in nonlinear Hamiltonian lattices," Phys. Rev. E 51, 1503–1507 (1995).

[26] G. James, "Centre Manifold reduction for quasilinear discrete systems," J. Nonlinear Sci. 13, 27–63 (2003).

[27] K. W. Sandusky, J. B. Page, and K. E. Schmidt, "Stability and motion of intrinsic localized modes in nonlinear periodic lattices," Phys. Rev. B **46**, 6161–6168 (1992).