

2 原子 FPU 型格子における Discrete Breather の安定性

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振動解である。1 次元 2 原子 Fermi-Pasta-Ulam 型格子に関し、anti-continuous limit 近傍において種々の Discrete Breather 解の存在を証明し、それらの線形安定性解析を行った。Discrete Breather 解の線形安定性の波形に対する依存性を明らかにした。

1 はじめに

非線形格子系においては、系の離散性と非線形性に起因して、空間的に局在した振動モードが存在し得ることが知られている。この局在モードは、Discrete Breather (DB), または, Intrinsic Localized Mode (ILM) と呼ばれている。DB の存在は、武野らにより最初に指摘され [1, 2], 以来, DB に関する多数の研究がなされている (例えば, 解説記事 [3] やレビュー論文 [4, 5, 6, 7] 参照)。DB の存在は、非線形性と空間的離散性を有する力学系において普遍的な現象と考えられており、実際に種々の系において実験的にも観測されている。例えば、ジョセフソン結合素子系 [8, 9], 非線形光導路アレイ [10], カンチレバーアレイ [11, 12] 等で定在型 DB が観測されている。進行波型 DB については、雲母結晶においてその存在を示す実験結果が報告されている [13]。また、進行波型 DB の存在を許す格子構造を持つことが、高温超伝導が生じるための必要条件であるという興味深い示唆もなされている [14]。

数理的な観点からは、DB は運動方程式の空間的に局在した周期解として特徴付けられる。これまでに、DB を表す局在周期解の厳密な存在証明が、種々の手法により与えられている。最初の存在証明は、MacKay と Aubry により、各粒子がオンサイトポテンシャルと弱い相互作用ポテンシャルを持つような非線形格子系のクラスに対して与えられた [15]。例えば、非線形 Klein-Gordon 格子モデルなどが、このクラスに含まれる。anti-integrable limit, もしくは、anti-continuous limit と呼ばれる相互作用が無い極限では、系は各粒子がオンサイトポテンシャル中を独立に振動する振動子集団となる。この極限では、1 個の粒子だけが周期振動し他の粒子が静止しているような自明な DB 解が存在する。MacKay と Aubry は、周期関数の空間で陰関数定理を用いて、自明な DB 解が弱い相互作用が在る場合に延長可能であることを証明している。anti-continuous limit にて複数個の粒子が振動するような自明な DB 解の延長に関する証明も与えられている [16]。文献 [17] では、2 原子 Fermi-Pasta-Ulam (FPU) 型格子に関して、上記とは異なるタイプの anti-continuous limit が提案されている。2 原子 FPU 型格子とは、異なる質量を持つ粒子が交互に並び、最隣接粒

子が非線形相互作用する格子である。この系において、質量比がゼロとなる極限が anti-continuous limit となり、重い粒子が静止した状態で軽い粒子のみが独立に振動する。この極限では、1 個の軽い粒子のみ振動し他の粒子が静止状態であるような自明な DB 解が存在する。Livi らは、この DB 解が質量比がゼロでない場合に延長可能であることを証明している。上記以外の anti-continuous limit を持たないような格子系に対しても、異なる手法により、DB 解の存在証明が与えられている [18, 19, 20, 21].

上述のように、DB 解の存在については、種々の格子系において証明がなされている。一方、DB に関する他の重要な問題として、その安定性評価が挙げられる。しかしながら、DB 解の線形安定性に関する厳密な結果はいまだ十分ではない。これまでのところ、オンサイトポテンシャルと弱相互作用ポテンシャルを持つ格子系について、single-site DB (anti-continuous limit で 1 格子点のみ励起している周期解からの延長により得られる DB 解) が線形安定であることが示されている [4]. また、非線形 Klein-Gordon 格子については、multi-site DB (anti-continuous limit で複数個の格子点が励起している周期解からの延長により得られる DB 解) について、励起格子点が連続している場合に、線形安定性を判別するための条件が明らかにされている [22, 23, 24]. しかしながら、他の格子系、FPU 型格子などについては、DB 解の安定性は十分には明らかにされていない。本研究では、2 原子 FPU 型格子について、様々な multi-site DB 解の存在証明と線形安定性解析を行う。先行研究 [25, 26] で、2 原子 FPU 型格子の anti-continuous limit での自明な周期解からの延長による multi-site DB 解の存在証明、および、励起格子点が連続している場合の線形安定性評価が与えられている。本研究では、その結果を一般化し、anti-continuous limit での励起格子点の分布が任意の場合について、multi-site DB 解の存在証明と線形安定性解析を行う。以下では、2 節で 2 原子 FPU 型格子モデルを説明し、3 節で主結果を示す。4 節で若干の準備事項を述べた後、5 節で証明のアウトラインを述べる。

2 2 原子 FPU 型格子モデル

本研究では、直線上で交互に並んだ 2 つの異なる質量を持つ粒子が最隣接粒子と非線形相互作用するような 1 次元 2 原子 FPU 型格子系を考える。系のハミルトニアンは次式で与えられる。

$$H = \sum_{n=1}^{N-1} \frac{1}{2m_n} P_n^2 + \sum_{n=1}^N V(Q_n - Q_{n-1}) \quad (1)$$

ここで $Q_n \in \mathbb{R}$, $P_n \in \mathbb{R}$ は、それぞれ、粒子の座標と運動量を表す。 m_n は、 n 番目の粒子の質量を表し、 $m_{2j-1} = 1$, $m_{2j} = \bar{m}$, $j = 1, 2, \dots, N/2$, ただし、 $\bar{m} > 1$ とする。境界条件としては、固定端条件 $Q_0 = Q_N = 0$ を仮定する。したがって、系の自由度は $N - 1$ である。 N は偶数と仮定しておく。相互作用ポテンシャル V として、以下の形を仮定する。

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

上式で、 $k \geq 4$ は偶数とする。 $\mu \in \mathbb{R}^l$ はパラメータであり、 $O \subseteq \mathbb{R}^l$ を $\mu = 0$ の近傍とする。関数 $W(X, \mu) : \mathbb{R} \times O \rightarrow \mathbb{R}$ は、 X と μ に関して C^2 級で $W(X, 0) = 0$ を満たすと仮定する。

本稿で示す結果は、充分大きな $\bar{m}$ に対して成立するものである。極限 $\bar{m} \rightarrow \infty$ には、特異性があるかのように見えるが、実際には、以下で定義するパラメータ ε を導入すれば、この極限に特異性は無いことが分かる [17].

$$\varepsilon = \frac{1}{\sqrt{\bar{m}}} \quad (3)$$

パラメータ ε を用いて、新座標変数 q_n を以下のように定義する.

$$q_n = \begin{cases} Q_n & \text{if } n = 2j - 1, \\ \varepsilon^{-1} Q_n & \text{if } n = 2j, \end{cases} \quad j = 1, 2, \dots, N/2 \quad (4)$$

ハミルトニアン (1) は、新変数では以下のように変換される.

$$H = \sum_{n=1}^{N-1} \frac{1}{2} p_n^2 + \sum_{j=1}^{N/2} \left[V(\varepsilon q_{2j} - q_{2j-1}) + V(q_{2j-1} - \varepsilon q_{2j-2}) \right] \quad (5)$$

ただし、 p_n は q_n に共役な運動量であり、 $p_{2j-1} = P_{2j-1}$, $p_{2j} = \varepsilon P_{2j}$ のように定義される。境界条件は、 $q_0 = q_N = 0$ である。ハミルトニアン (5) より導出される運動方程式は、次式で与えられる。

$$\ddot{q}_{2j-1} = V'(\varepsilon q_{2j} - q_{2j-1}) - V'(q_{2j-1} - \varepsilon q_{2j-2}) \quad (6)$$

$$\ddot{q}_{2j} = \varepsilon V'(q_{2j+1} - \varepsilon q_{2j}) - \varepsilon V'(\varepsilon q_{2j} - q_{2j-1}) \quad (7)$$

これらの運動方程式は、 $\varepsilon = 0$ において互いに分離することが分かる。以下では、変数 q_n, p_n を用い、ハミルトニアン (5) に対して結果の記述を行うものとする。

3 主結果

同次ポテンシャル系の anti-continuous limit, すなわち、 $\varepsilon = 0$ かつ $\mu = 0$ の場合を考える。この場合、運動方程式 (6), (7) に対し、以下の形をした周期解が存在する。

$$q_{2j-1} = 2^{-1/(k-2)} \sigma_{2j-1} \varphi(t), \quad q_{2j} = 0, \quad j = 1, \dots, N/2 \quad (8)$$

ここで、 $\sigma_{2j-1} \in \{-1, 0, 1\}$ である。 $\varphi(t)$ は以下の微分方程式の周期解を表す。

$$\ddot{\varphi} + \varphi^{k-1} = 0 \quad (9)$$

方程式 (9) は、以下の第一積分を持つ。

$$\frac{1}{2} \dot{\varphi}^2 + \frac{1}{k} \varphi^k = h \quad (10)$$

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、(10) 式は、相平面で 1 つの閉軌道を表す。したがって、任意の h の値に対し、(10) 式を満たすような (9) 式の周期解 $\varphi(t)$ が存在する。解 $\varphi(t)$ の周期 T は、定数 h に依存し、次式で与えられる。

$$T = 2\sqrt{2} h^{-(1/2-1/k)} \int_0^{k^{1/k}} \frac{1}{\sqrt{1-x^k/k}} dx \quad (11)$$

(11) 式中の積分値は h に依存しないので, 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. このことは, 任意に与えられた $T > 0$ に対し, T を周期に持つような (9) 式の周期解 $\varphi(t)$ が存在することを意味している. したがって, 任意に与えられたコード列 $\sigma = (\sigma_1, \sigma_3, \dots, \sigma_{2j-1}, \dots, \sigma_{N-1}) \in \{-1, 0, 1\}^{N/2}$ と $T > 0$ に対し, (8) 式で与えられる周期 T の運動方程式の解が存在する. この周期解を, $\Gamma(t; \sigma, T)$ と表すことにする. すなわち, (8) 式で与えられる q_n と $p_n = \dot{q}_n$ を用いて, $\Gamma(t; \sigma, T) = (q_1(t), \dots, q_{N-1}(t), p_1(t), \dots, p_{N-1}(t))$ である.

コード列 σ が少数の非ゼロ成分からなる場合, 周期解 (8) は, DB 解, もしくは, いくつかの DB 解の重ね合わせ状態を表すものと解釈できる. 例えば, $\sigma = (\dots, 0, 1, 0, \dots)$ は single-site DB 解を表し, $\sigma = (\dots, 0, 1, 0, 0, -1, 0, \dots)$ は離れて存在する 2 つの single-site DB 解の重ね合わせ状態を表すと解釈できる. 本稿では, より一般に, それらを含む任意のコード列 σ を扱う.

集合 A を $A = \{1, 2, \dots, N/2\}$ とする. また, A_σ を σ の非ゼロ成分の添字の集合, すなわち, $A_\sigma = \{j; \sigma_{2j-1} \neq 0\} \subseteq A$ と定義する. コード列 σ が, m 個の励起格子点を含み, $A_\sigma = \{j_1, j_2, \dots, j_m\}$, $j_1 < j_2 < \dots < j_m$ であるとする. σ の成分 σ_{2j_i-1} と $\sigma_{2j_{i+1}-1}$ に対応する $\Gamma(t; \sigma, T)$ の隣接する 2 つの励起格子点を考える. これら格子点ペアについて, $\sigma_{2j_i-1} = \sigma_{2j_{i+1}-1}$ のとき同位相であると言い, $\sigma_{2j_i-1} = -\sigma_{2j_{i+1}-1}$ のとき反位相であるということにする. σ の関数 $N_{\text{in}}(\sigma)$ を次式で定義する.

$$N_{\text{in}}(\sigma) = \begin{cases} 0 & \text{if } m = 1 \\ \sum_{i=1}^{m-1} \frac{1}{2} |\sigma_{2j_i-1} + \sigma_{2j_{i+1}-1}| & \text{if } m \geq 2 \end{cases} \quad (12)$$

$N_{\text{in}}(\sigma)$ は, 解 $\Gamma(t; \sigma, T)$ に含まれる同位相の隣接励起格子点ペアの数を与える関数である. したがって, 1 格子点のみ励起される $m = 1$ の場合, もしくは, $m \geq 2$ で全ての隣接格子点ペアが反位相である場合に限り, $N_{\text{in}}(\sigma) = 0$ となる. 以上の準備の下, DB 解の存在と線形安定性に関する主結果は, 以下の如く述べられる. 証明の詳細については, 文献 [27] を参照されたし.

定理 1 任意の $\sigma \neq 0$, $T > 0$ に対して, 定数 $\varepsilon_c > 0$ が存在し, $0 \leq \varepsilon < \varepsilon_c$, かつ, $\mu = 0$ のとき, 格子系 (5) の T -周期解の族 $\Gamma_\varepsilon(t; \sigma, T)$ で ε と t について解析的, かつ, $\Gamma_0(t; \sigma, T) = \Gamma(t; \sigma, T)$ を満たすものが存在する. 各 $\varepsilon \in (0, \varepsilon_c)$ に対し, $\mu = 0$ の近傍 $U_\varepsilon(0) \subseteq \mathbb{R}^l$ が存在し, $\mu \in U_\varepsilon(0)$ のとき, 格子系 (5) の周期解の族 $\Gamma_{\varepsilon, \mu}(t; \sigma, T)$ で μ と t について C^1 級, $\Gamma_{\varepsilon, 0}(t; \sigma, T) = \Gamma_\varepsilon(t; \sigma, T)$, 周期 $T_\varepsilon(\mu)$ は $T_\varepsilon(0) = T$ を満たす C^1 級関数であるものが存在する. さらに, $\Gamma_{\varepsilon, \mu}(t; \sigma, T)$ は, $N_{\text{in}}(\sigma) = 0$ の場合に限り線形安定であり, $N_{\text{in}}(\sigma) \geq 1$ の場合は線形不安定で $N_{\text{in}}(\sigma)$ 個の不安定特性乗数が存在する.

Remark 1 非線形格子の代表的な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) 式の関数は, 多項式ポテンシャルの場合も含んでいる: $W(X, \mu) = \sum_{r=2}^{k-1} (\mu_r/r) X^r$.

Remark 2 本稿では FPU 型格子系のみを議論の対象としたため, ポテンシャルの μ 依存部分 W としては最隣接相互作用を仮定した. しかしながら, この仮定は本質的ではない. 定理 1 の主張は, (1) の代わりにより一般的なハミルトニアン $H = \sum_{n=1}^{N-1} P_n^2/2m_n + \sum_{n=1}^N (Q_n - Q_{n-1})^k/k +$

$W(Q_1, \dots, Q_{N-1}, \mu)$ に対しても成立する. ただし, $W(Q_1, \dots, Q_{N-1}, \mu)$ は C^2 級で, かつ, $\mu = 0$ のとき $W = 0$ を満たすとする.

4 準備

定理 1 の証明では, ハミルトン系 (5) に付随する同次ポテンシャル系 ($\mu = 0$ の系) を利用して, 周期解の延長と安定性解析を行う. 本節では, その準備として, 一般の同次ポテンシャル系に対して, 直線解と呼ばれるクラスの周期解の定義, 直線解に関する変分方程式に現れる Hill 方程式の特性乗数, および, 直線解の非同次ポテンシャル系への延長に関して成り立つ命題について述べる.

4.1 同次ポテンシャル系の直線解

次式のハミルトニアンで定義される自由度 n の力学系を考える.

$$H = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n p_i^2 + V_k(q) \quad (13)$$

ここで, $q = (q_1, \dots, q_n) \in \mathbb{R}^n$ であり, V_k は偶数次 $k \geq 4$ の同次多項式とする. この系の運動方程式は,

$$\ddot{q} = -\nabla V_k(q) \quad (14)$$

で与えられる. 代数方程式 $x = \nabla V_k(x)$ が, 実数解 $x = c \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}$ を持つと仮定する. このとき, V_k は同次式なので, 運動方程式 (14) は, 以下のような周期解を持つ.

$$q(t) = c \varphi(t) \quad (15)$$

ただし, $\varphi(t)$ は微分方程式 (9) の周期解とする. (15) 式の形の解は, 直線解と呼ばれる.

(14) 式を周期解 (15) に沿って線形化すると, 以下の変分方程式が得られる.

$$\ddot{\xi} + \varphi(t)^{k-2} G \cdot \xi = 0 \quad (16)$$

ここで, $\xi = (\xi_1, \dots, \xi_n)^t$ であり, 各成分 ξ_i は座標 q_i に関する変分を表す. ξ ベクトルの上付き添え字 t は転置を意味する. (16) 式において, G は $n \times n$ 定数行列であり, 点 $q = c$ で評価した $V_k(q)$ のヘッセ行列で与えられる. すなわち,

$$G = \left(\frac{\partial^2 V_k}{\partial q_i \partial q_j} \right)_{q=c} \quad (17)$$

である. 行列 G の固有値を, λ_i , $i = 1, \dots, n$ とする. G は実対称なので, 全ての i について $\lambda_i \in \mathbb{R}$ であり, かつ, G を対角化する直交行列 T_G が存在する. 新しい座標 $\zeta = (\zeta_1, \dots, \zeta_n)^t$ を $\xi = T_G \cdot \zeta$

により定義すると, (16) 式は以下のように分離される.

$$\ddot{\zeta} + \varphi(t)^{k-2} \begin{pmatrix} \lambda_1 & & & \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_n \end{pmatrix} \cdot \zeta = 0 \quad (18)$$

(18) 式の各成分の方程式は次式となる.

$$\ddot{\zeta}_i + \lambda_i \varphi(t)^{k-2} \zeta_i = 0, \quad i = 1, \dots, n \quad (19)$$

(19) 式のモノドロミー行列を $M(\lambda_i)$ と表すことにする. $M(\lambda_i)$ は, 2×2 の定数行列である. 方程式の各成分が分離しているため, 変分方程式系 (18) のモノドロミー行列 $\mathcal{M}$ は, 以下のようなブロック対角行列で与えられる.

$$\mathcal{M} = \begin{pmatrix} M(\lambda_1) & & & \\ & M(\lambda_2) & & \\ & & \ddots & \\ & & & M(\lambda_n) \end{pmatrix}. \quad (20)$$

したがって, 行列 $M(\lambda_i)$ の固有値を ρ_i, ρ_i^{-1} と表すと, $\mathcal{M}$ の固有値 (特性乗数) は, $\text{spec} \mathcal{M} = \{\rho_1, \rho_1^{-1}, \rho_2, \rho_2^{-1}, \dots, \rho_n, \rho_n^{-1}\}$ のように与えられる.

4.2 同次ポテンシャル系に現れる Hill 方程式

直線解に沿った変分方程式 (18) の成分として現れる以下の形の Hill 方程式を考える.

$$\frac{d^2 y}{dt^2} + \lambda \varphi(t)^{k-2} y = 0 \quad (21)$$

ここで, $y \in \mathbb{R}$, $\lambda \in \mathbb{R}$ はパラメータ, $k \geq 4$ は偶数, $\varphi(t)$ は (9) 式の T -周期解とする. 本節では, Hill 方程式 (21) の特性乗数に関する結果を記述する.

$\{y_1(t), y_2(t)\}$ を, $t = 0$ の近傍で定義された (21) 式の基本解とする. $M(\lambda)$ を, y_1 と y_2 の 1 周期 T に渡る時間発展を記述するモノドロミー行列とする. すなわち, $M(\lambda)$ は次式を満たす 2×2 行列である.

$$(y_1(t+T), y_2(t+T)) = (y_1(t), y_2(t)) \cdot M(\lambda) \quad (22)$$

与えられた Hill 方程式に対してモノドロミー行列を解析的に計算することは, 一般にはできない. しかしながら, (21) 式の形をした Hill 方程式の場合には, 独立変数の変換により超幾何微分方程式に帰着できることが示されている [28]. この事実により, モノドロミー行列 $M(\lambda)$ の計算が可能である.

(21) 式はハミルトン系なので, $M(\lambda) \in \text{SL}(2, \mathbb{C})$ であり, その固有値 (特性乗数) は ρ, ρ^{-1} のようなペアをなす. したがって, $\text{tr} M(\lambda)$ の値に依存して以下の 4 通りの場合があり得る: (i)

$|\operatorname{tr} M(\lambda)| < 2$ のとき, $\rho = e^{i\theta}$, $\rho^{-1} = e^{-i\theta}$ ($0 < \theta < \pi$), (ii) $\operatorname{tr} M(\lambda) > 2$ のとき, $0 < \rho^{-1} < 1 < \rho$, (iii) $\operatorname{tr} M(\lambda) = 2$ のとき, $\rho = \rho^{-1} = +1$, (iv) $\operatorname{tr} M(\lambda) = -2$ のとき, $\rho = \rho^{-1} = -1$. 実軸上の集合 S_k , $\mathcal{U}_k$, $\mathcal{D}_{k,+}$, $\mathcal{D}_{k,-}$ を以下のように定義する.

$$S_k = \left\{ \lambda \in \mathbb{R}; 0 < \lambda < 1 \text{ or } k-1 < \lambda < k+2 \text{ or } \dots \right. \\ \left. \text{or } j(j-1)k/2 - j + 1 < \lambda < j(j-1)k/2 + j \text{ or } \dots \right\} \setminus \mathcal{D}_{k,-} \quad (23)$$

$$\mathcal{U}_k = \left\{ \lambda \in \mathbb{R}; \lambda < 0 \text{ or } 1 < \lambda < k-1 \text{ or } k+2 < \lambda < 3k-2 \text{ or } \dots \right. \\ \left. \text{or } j(j-1)k/2 + j < \lambda < j(j+1)k/2 - j \text{ or } \dots \right\} \quad (24)$$

$$\mathcal{D}_{k,+} = \{0, 1, k-1, \dots, j(j-1)k/2 + j, j(j+1)k/2 - j, \dots; j \in \mathbb{N}\} \quad (25)$$

$$\mathcal{D}_{k,-} = \{j(j-1)k/2 + (1-1/k)/2; j \in \mathbb{N}\} \quad (26)$$

集合 S_k , $\mathcal{U}_k$, $\mathcal{D}_{k,+}$, $\mathcal{D}_{k,-}$ は, (i)-(iv) の分類に対応しており, 次の補題が成立する [28].

補題 1 モノドロミー行列 $M(\lambda)$ の固有値について (i)-(iv) が成立する. (i) $\lambda \in S_k$ のとき $\rho = e^{i\theta}$, $\rho^{-1} = e^{-i\theta}$ ($0 < \theta < \pi$), (ii) $\lambda \in \mathcal{U}_k$ のとき $0 < \rho^{-1} < 1 < \rho$, (iii) $\lambda \in \mathcal{D}_{k,+}$ のとき $\rho = \rho^{-1} = +1$, (iv) $\lambda \in \mathcal{D}_{k,-}$ のとき $\rho = \rho^{-1} = -1$.

補題 1 により, (20) 式における各 $M(\lambda_i)$ の固有値 ρ_i , ρ_i^{-1} の複素平面上での位置は, パラメータ λ_i より定めることができる. したがって, 行列 M の固有値を評価する問題は, 変分方程式の係数行列 G の固有値 $\lambda_i \in \mathbb{R}$, $i = 1, \dots, n$ を評価する問題に帰着することができる. 一般には周期係数を持つ線形微分方程式の特性乗数評価は困難な問題であるが, 今の場合には, それが定数行列 G の固有値評価という比較的容易な問題に帰着される. この点が, 同次ポテンシャル系を利用して周期解の延長と安定性解析を行うことの利点となる. なお, 行列 G の 1 つの固有値と固有ベクトルに関して, 以下の補題が成り立つ.

補題 2 G の固有値の 1 つは $k-1$ であり, 対応する固有ベクトルは c で与えられる. M は, G の固有値 $k-1$ に対応する固有値の組として $\{+1, +1\}$ を有する.

4.3 直線解の延長

(13) 式に摂動を加えた次式のハミルトニアンで定義される自由度 n の力学系を考える.

$$H = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n p_i^2 + V_k(q) + W(q, \mu), \quad (27)$$

ここで, $q = (q_1, \dots, q_n) \in \mathbb{R}^n$, V_k は偶数次 $k \geq 4$ の同次多項式, $\mu \in \mathbb{R}^l$ はパラメータ, $W(q, \mu)$ は μ に依存する摂動ポテンシャルで q と μ に関して C^2 級, かつ, $W(q, 0) = 0$ を満たすとする. 系 (15) は, $\mu = 0$ のとき直線解 $\phi_0(t) = (c\varphi(t), c\dot{\varphi}(t)) \in \mathbb{R}^{2n}$ を持つものと仮定する. 直線解の延長と, 延長により得られる周期解の安定性について, 以下の命題 1 が成り立つ. 命題の証明にお

いて、直線解の延長可能性は、簡約ポアンカレ写像に対する陰関数定理を用いて示される。また、延長により得られる周期解の安定性評価には、補題 1 と Krein 符号理論 [29] が用いられる。

命題 1 $\phi_0(t)$ を $\mu = 0$ のときの系 (27) の周期 T_0 を持つ直線解とし、 $\phi_0(t)$ に関する変分方程式の (17) 式で定義される係数行列 G の固有値を $\lambda_i, i = 1, \dots, n$ とする。固有値 λ_i が、 $\lambda_i \notin \mathcal{D}_{k,+}, i = 1, \dots, n-1$, かつ、 $\lambda_n = k-1$ を満たすと仮定する。このとき、 $\mu = 0$ の近傍 $U(0) \subseteq \mathbb{R}^l$ が存在し、 $\mu \in U(0)$ のとき、系 (27) の周期解の族 $\phi(t, \mu)$ で μ と t について C^1 級、 $\phi(t, 0) = \phi_0(t)$, 周期 $T(\mu)$ は μ の C^1 級関数で $T(0) = T_0$ なるものが存在する。さらに、もし固有値が $\lambda_i \in \mathcal{U}_k, i = 1, \dots, n_0$, かつ、 $\lambda_i \in (0, \delta_1) \cup (k-1, k-1 + \delta_2) \subset \mathcal{S}_k, i = n_0 + 1, \dots, n-1$, ただし $\delta_1 = (1 - 1/k)/2$, $\delta_2 = (3 - 1/k)/2$, を満たすならば、 $\phi(t, \mu)$ は $n_0 = 0$ の場合に限り線形安定であり、 $n_0 \geq 1$ の場合は n_0 個の不安定特性乗数を伴い線形不安定である。

5 証明の概略

定理 1 の証明は、 $\varepsilon = 0, \mu = 0$ における自明な周期解の 2 段階の延長により成される。第 1 段階では、 $\varepsilon = 0, \mu = 0$ における自明な周期解を、同次ポテンシャル系 ($\mu = 0$) に保ったまま $\varepsilon > 0$ に延長する。第 2 段階では、第 1 段階で得られた周期解を、 $\varepsilon > 0$ を固定して $\mu \neq 0$ に延長する。

5.1 同次ポテンシャル系における anti-continuous limit からの周期解の延長

系 (5) で $\mu = 0$ の場合を考える。このとき、ハミルトニアンは次式で与えられる。

$$H = \sum_{n=1}^{N-1} \frac{1}{2} p_n^2 + \sum_{j=1}^{N/2} \frac{1}{k} \left[(\varepsilon q_{2j} - q_{2j-1})^k + (q_{2j-1} - \varepsilon q_{2j-2})^k \right] \quad (28)$$

境界条件は、 $q_0 = q_N = 0$ である。この系の運動方程式は、次式で与えられる。

$$\ddot{q}_{2j-1} = (\varepsilon q_{2j} - q_{2j-1})^{k-1} - (q_{2j-1} - \varepsilon q_{2j-2})^{k-1} \quad (29)$$

$$\ddot{q}_{2j} = \varepsilon (q_{2j+1} - \varepsilon q_{2j})^{k-1} - \varepsilon (\varepsilon q_{2j} - q_{2j-1})^{k-1} \quad (30)$$

ただし、(29) では $j = 1, \dots, N/2$, (30) では $j = 1, \dots, N/2 - 1$ である。これらの運動方程式の周期解を、以下のような直線解の形で探す。

$$q_n(t) = u_n \varphi(t) \quad (31)$$

$u_n \in \mathbb{R}, n = 1, \dots, N-1$ は定数、 $\varphi(t)$ は時間変数 t の関数とする。(31) 式を運動方程式 (29), (30) に代入すると、 $\varphi(t)$ に関する微分方程式 (9) と、 u_n に関する以下の $N-1$ 個の連立代数方程式を得る。

$$u_{2j-1} + (\varepsilon u_{2j} - u_{2j-1})^{k-1} - (u_{2j-1} - \varepsilon u_{2j-2})^{k-1} = 0 \quad (32)$$

$$u_{2j} + \varepsilon (u_{2j+1} - \varepsilon u_{2j})^{k-1} - \varepsilon (\varepsilon u_{2j} - u_{2j-1})^{k-1} = 0 \quad (33)$$

(32) では $j = 1, \dots, N/2$, (33) では $j = 1, \dots, N/2 - 1$ である. 固定端境界条件に対応して, $u_0 = u_N = 0$ である. 3 節で述べたように, 任意の $T > 0$ に対し, (9) 式の T -周期解 $\varphi(t)$ が存在する. したがって, (32), (33) の解 $u = (u_1, \dots, u_{N-1})$ の存在が示されれば, 運動方程式 (29), (30) に対して T -周期解の存在が示されたことになる.

まず, 連立代数方程式 (32), (33) で $\varepsilon = 0$ の場合を考える. このとき, 方程式は分離して次式のようになる.

$$u_{2j-1} - 2u_{2j-1}^{k-1} = 0, \quad u_{2j} = 0 \quad (34)$$

これらが以下のような解を持つことは容易に分かる.

$$u_{2j-1} = 2^{-1/(k-2)} \sigma_{2j-1}, \quad u_{2j} = 0 \quad (35)$$

ただし, $\sigma_{2j-1} \in \{-1, 0, 1\}$ である. 任意のコード列 $\sigma = (\sigma_1, \sigma_3, \dots, \sigma_{2j-1}, \dots, \sigma_{N-1}) \in \{-1, 0, 1\}^{N/2}$ に対し, (35) 式は方程式 (34) の解を与える. コード列 $\sigma \in \{-1, 0, 1\}^{N/2}$ を定めたときの解 (35) を, $u_\sigma \in \mathbb{R}^{N-1}$ と表記する. 定数ベクトル u_σ と (9) 式の T -周期解 $\varphi(t)$ を組み合わせて, 運動方程式 (29), (30) の周期解 (8) が得られる. この周期解を, $\Gamma(t; \sigma, T)$ で表す.

連立代数方程式 (32), (33) において, $\varepsilon = 0$ に対する解 u_σ の $\varepsilon > 0$ への延長に関し以下の補題が成り立つ.

補題 3 任意の $\sigma \in \{-1, 0, 1\}^{N/2}$ に対し, 定数 $\varepsilon_0 > 0$ が存在し, $\varepsilon \in (-\varepsilon_0, \varepsilon_0)$ に対して以下のような C^ω 級関数 $u_n(\varepsilon; \sigma)$, $n = 1, \dots, N-1$ が唯一存在する: $(u_1(0; \sigma), \dots, u_{N-1}(0; \sigma)) = u_\sigma$, かつ, $(u_1(\varepsilon; \sigma), \dots, u_{N-1}(\varepsilon; \sigma))$ は $\varepsilon \in (-\varepsilon_0, \varepsilon_0)$ のとき (32), (33) 式を満たす.

この補題により, 任意の $\sigma \neq 0$ に対し, 周期解 $\Gamma(t; \sigma, T)$ の $\varepsilon \neq 0$ への延長が可能である. すなわち, $\varepsilon \in [0, \varepsilon_0)$ に対し, $q_n(t) = u_n(\varepsilon; \sigma)\varphi(t)$, $n = 1, \dots, N-1$ で与えられる運動方程式 (29), (30) の T -周期解が存在する. (物理的に意味の無い $\varepsilon < 0$ の場合は除外した.) この周期解を, $\Gamma_\varepsilon(t; \sigma, T)$ と表す.

次に, 上で存在を示した解ベクトル $u(\varepsilon; \sigma) = (u_1(\varepsilon; \sigma), \dots, u_{N-1}(\varepsilon; \sigma))$ の形状に関係する 2 つの補題を述べる. これらの補題は, 行列 G の固有値分布を評価するために後で用いる. 補題 3 より $u_n(\varepsilon; \sigma)$ は C^ω 級であるので, 次式の如く ε の級数に展開できる.

$$u_n(\varepsilon; \sigma) = \sum_{i=0}^{\infty} u_{n,i} \varepsilon^i \quad (36)$$

ここで, $u_{n,i} \in \mathbb{R}$ は定数である. d_n を, $0 \leq i \leq d_n - 1$ のとき $u_{n,i} = 0$, かつ, $i = d_n$ のとき $u_{n,i} \neq 0$ となるような整数とする. 全ての $i \geq 0$ に対し $u_{n,i} = 0$ の場合は, $d_n = +\infty$ と定義する. すなわち, d_n は $u_n(\varepsilon; \sigma)$ のオーダーを表す整数である. (35) 式より, $\sigma_n \neq 0$ のときは, $u_n(\varepsilon; \sigma) = 2^{-1/(k-2)} \sigma_n + \text{h.o.t.}$ であるので $d_n = 0$ である. 補題を述べるために, 関数 I_k , J_k を次式で定義しておく.

$$I_k(d) = (k-1)d + 1, \quad J_k(d) = (k-1)(d+1). \quad (37)$$

以下の2つの補題は、小さな ε に対し、解ベクトル $u(\varepsilon; \sigma)$ が局在していることを示している。実際、 $\sigma_n \neq 0$ なる格子点からの距離が増加するに従い、オーダー d_n の増加により $|u_n(\varepsilon; \sigma)|$ が急激に減少することを示している。

補題4 n_1, n_2 を、 $1 < n_1 \leq n_2 < N-1$ を満たす奇数とする。 $\sigma_{n_1}, \sigma_{n_2} \neq 0$ 、かつ、 $1 \leq n < n_1$ または $n_2 < n \leq N-1$ のとき $\sigma_n = 0$ と仮定する。このとき、十分小さな $\varepsilon > 0$ に対し、 $\text{sgn}[u_{n+1}(\varepsilon; \sigma)] = -\text{sgn}[u_n(\varepsilon; \sigma)]$ 、 $n = 1, \dots, n_1-1, n_2, \dots, N-2$ が成り立つ。さらに、 $u_n(\varepsilon; \sigma)$ のオーダー d_n は、 $i \geq 1$ に対し次式で与えられる。

$$d_{n_1-i} = d_{n_2+i} = \begin{cases} I_k \circ (J_k \circ I_k)^{(i-1)/2}(0) & \text{for odd } i \\ (J_k \circ I_k)^{i/2}(0) & \text{for even } i \end{cases} \quad (38)$$

補題5 n_1, n_2 を、 $1 \leq n_1 < n_2 \leq N-1$ を満たす奇数とする。 $\sigma_{n_1}, \sigma_{n_2} \neq 0$ 、かつ、 $n_1 < n < n_2$ のとき $\sigma_n = 0$ と仮定する。このとき、 $\sigma_{n_1} = \sigma_{n_2}$ ならば、十分小さな $\varepsilon > 0$ に対し、 $\text{sgn}[u_{n+1}(\varepsilon; \sigma)] = -\text{sgn}[u_n(\varepsilon; \sigma)]$ 、 $n = n_1, \dots, n_2-1$ が成り立つ。さらに、 $u_n(\varepsilon; \sigma)$ のオーダー d_n は、 $i = 1, \dots, L$ に対し次式により与えられる。

$$d_{n_1+i} = d_{n_2-i} = \begin{cases} I_k \circ (J_k \circ I_k)^{(i-1)/2}(0) & \text{for odd } i \\ (J_k \circ I_k)^{i/2}(0) & \text{for even } i \end{cases} \quad (39)$$

ただし、 $L = (n_2 - n_1)/2$ である。一方、 $\sigma_{n_1} = -\sigma_{n_2}$ ならば、十分小さな $\varepsilon > 0$ に対し、 $\text{sgn}[u_{n+1}(\varepsilon; \sigma)] = -\text{sgn}[u_n(\varepsilon; \sigma)]$ 、 $n = n_1, \dots, n_c-2, n_c+1, \dots, n_2-1$ と $\text{sgn}[u_{n_c+1}(\varepsilon; \sigma)] = -\text{sgn}[u_{n_c-1}(\varepsilon; \sigma)]$ が成り立つ。ただし、 $n_c = (n_1 + n_2)/2$ である。さらに、 $u_n(\varepsilon; \sigma)$ のオーダー d_n は、 $i = 1, \dots, L-1$ に対しては(39)式で与えられ、 d_{n_c} は、 n_c が偶数または奇数の場合、それぞれ、 $d_{n_c} \geq I_k(d_{n_c \pm 1})$ または $d_{n_c} \geq J_k(d_{n_c \pm 1})$ を満たす。

補題5は、ゼロでないコード列成分 σ_{n_1} と σ_{n_2} に対応する2つの格子点に挟まれた区間における解ベクトル $u(\varepsilon; \sigma)$ の形状に関する結果を与えている。図1は、この結果を図示している。 σ_{n_1} と σ_{n_2} が同位相の場合は、図1(a)に示すように、 $u_n(\varepsilon; \sigma)$ は交互に反対の符号を持つ。したがって、区間 $n_1 \leq n \leq n_2$ における解ベクトルの符号変化数は、 $n_2 - n_1$ に等しい。一方、 σ_{n_1} と σ_{n_2} が反位相の場合は、図1(b)に示すように、中心の格子点を除いて $u_n(\varepsilon; \sigma)$ は交互に反対の符号を持ち、かつ、中心の両隣の格子点では $u_n(\varepsilon; \sigma)$ は反対符号を持つ。したがって、区間 $n_1 \leq n \leq n_2$ における解ベクトルの符号変化数は、 $n_2 - n_1 - 1$ に等しい。この符号変化数の違いが、延長により得られる周期解の安定性に影響する。

5.2 同次ポテンシャル系における周期解の安定性

補題3により存在が示された周期解 $\Gamma_\varepsilon(t; \sigma, T) : q_n(t) = u_n(\varepsilon; \sigma)\varphi(t)$ 、 $n = 1, \dots, N-1$ に関して運動方程式(29)、(30)を線形化すると、以下の変分方程式が得られる。

$$\ddot{\xi} + \varphi(t)^{k-2} G \cdot \xi = 0 \quad (40)$$

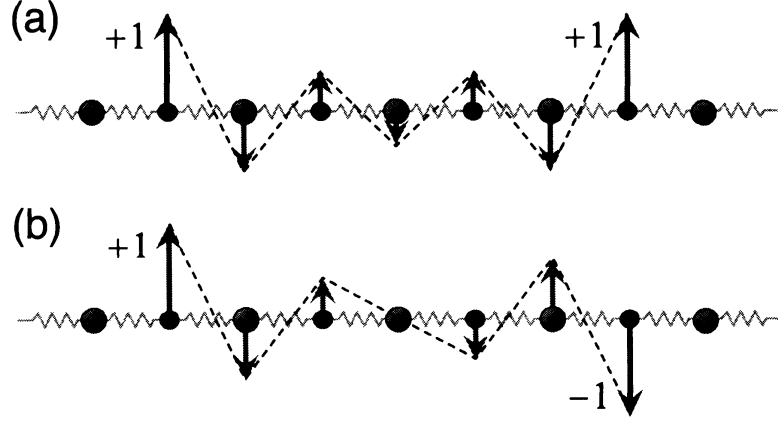


図 1: ベクトル $u(\varepsilon; \sigma)$ の形状. 矢印はベクトルの成分 $u_n(\varepsilon; \sigma)$ を表す. (a) 同位相の場合 ($\sigma_{n_1} = \sigma_{n_2} = +1$), (b) 反位相の場合 ($\sigma_{n_1} = +1, \sigma_{n_2} = -1$).

ここで, $\xi = (\xi_1, \dots, \xi_{N-1})^t \in \mathbb{R}^{N-1}$ であり, 各 ξ_n は座標 q_n に関する変分を表す. (40) 式において, G は次式で与えられる $(N-1) \times (N-1)$ の実対称 3 重対角行列である.

$$G = (k-1) \cdot \begin{pmatrix} c_1 + c_2 & -\varepsilon c_2 & & & \\ -\varepsilon c_2 & \varepsilon^2(c_2 + c_3) & -\varepsilon c_3 & & \\ & -\varepsilon c_3 & c_3 + c_4 & -\varepsilon c_4 & \\ & & \dots & \dots & \dots \\ & & & -\varepsilon c_{N-2} & \varepsilon^2(c_{N-2} + c_{N-1}) & -\varepsilon c_{N-1} \\ & & & & -\varepsilon c_{N-1} & c_{N-1} + c_N \end{pmatrix} \quad (41)$$

ここで, c_n は次式で定義される.

$$c_n = \begin{cases} (u_n(\varepsilon; \sigma) - \varepsilon u_{n-1}(\varepsilon; \sigma))^{k-2} & \text{if } n = 2j - 1 \\ (\varepsilon u_n(\varepsilon; \sigma) - u_{n-1}(\varepsilon; \sigma))^{k-2} & \text{if } n = 2j \end{cases} \quad (42)$$

上式で, $j = 1, \dots, N/2$ である. 行列 G は対称なので, 全ての固有値 $\lambda_i, i = 1, \dots, N-1$ は実数となる. また, G の成分は ε と σ に依存しているので, 固有値 λ_i もそれらに依存する.

変分方程式 (40) は (16) 式と同一形であり, (41) 式で与えられる行列 G が (16) 式における G に対応する. 4.2 節で述べたように, 変分方程式 (40) の特性乗数の評価は, 係数行列 G の固有値 λ_i を評価する問題に帰着される. コード列 σ のゼロでない成分の数を m とすると, $\varepsilon = 0$ のときは, G の固有値の内 m 個が $k-1$ に等しく, 他の $N-1-m$ 個は 0 となる. さて, 十分小さな $\varepsilon > 0$ の場合に, これらの固有値がどのように実軸上に分布するかを知ることが必要である. まず, 補題 4, 5 を用いて, $\lambda_i > 0, i = 1, \dots, N-1$ を示すことができる. 次に, $k-1$ より小さい固有値の数を, Sturm の定理を用いて評価することができる (文献 [27] Appendix D 参照). 補題 2 より, (41) 式で与えられる G は固有値 $k-1$ を持ち, 対応する固有ベクトルが $u(\varepsilon; \sigma)$ で与えられる

ことが分かる。Sturm の定理によれば、 G の $k-1$ より小さい固有値の数は、対応する固有ベクトル $u(\varepsilon; \sigma)$ の符号変化数に等しく、かつ、すべての固有値は単純固有値であることが知られる。 $u(\varepsilon; \sigma)$ の符号変化数は、補題 4, 5 に基づいて求めることができる。以上の事柄と固有値の ε に関する連続性より、固有値分布に関する次の補題 6 を示すことができる。

補題 6 $\lambda_i \in \mathbb{R}$, $i = 1, \dots, N-1$ を, (41) 式の行列 G の固有値とする。 $\sigma \neq 0$, かつ, $N_{\text{in}}(\sigma) = n_0$ と仮定する。このとき, 正定数 $\varepsilon_c \in (0, \varepsilon_0]$ が存在し, $\varepsilon \in (0, \varepsilon_c)$ のとき G の固有値は以下のように分布する。 $i = 1, \dots, n_0$ に対し $\lambda_i \in \mathcal{U}_k$, かつ, $i = n_0 + 1, \dots, N-2$ に対し $\lambda_i \in (0, \delta_1) \cup (k-1, k-1 + \delta_2) \subset \mathcal{S}_k$, かつ, $\lambda_{N-1} = k-1$. ただし, $\delta_1 = (1 - 1/k)/2$, $\delta_2 = (3 - 1/k)/2$ とする。

5.3 非同次ポテンシャル系への周期解の延長と安定性

補題 3 により, $0 \leq \varepsilon < \varepsilon_c$ に対し, 同次ポテンシャル系において延長された周期解 $\Gamma_\varepsilon(t; \sigma, T)$ の存在が示された。さらに, 補題 6 により, $\Gamma_\varepsilon(t; \sigma, T)$ に関する変分方程式 (40) の係数行列 G の固有値分布に関する評価が与えられた。これらに基づいて命題 1 を適用すると, 非同次ポテンシャル系の周期解 $\Gamma_{\varepsilon, \mu}(t; \sigma, T)$ の存在と安定性に関する結果が得られ, 定理 1 の証明が完了する。

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] 武野 正三, "格子力学と非線形波動," 数理科学 9, 54–61 (1995).
- [4] S. Aubry, "Breathers in nonlinear lattices: Existence, linear stability and quantization," Physica D 103, 201–250 (1997).
- [5] S. Flach and C. Willis, "Discrete breathers," Phys. Rep. 295, 181–264 (1998).
- [6] S. Aubry, "Discrete breathers: localization and transfer of energy in discrete Hamiltonian nonlinear systems," Physica D 216, 1–30 (2006).
- [7] S. Flach and A. V. Gorbach, "Discrete breathers - Advances in theory and applications," Phys. Rep. 467, 1–116 (2008).
- [8] 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).

- [9] 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).
- [10] 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).
- [11] 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).
- [12] 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).
- [13] F. M. Russell and J. C. Eilbeck, "Evidence for moving breathers in a layered crystal insulator at 300 K," *Europhysics Lett.* 78, 10004 (2007).
- [14] F. M. Russell and D. R. Collins, "Anharmonic excitations in high T_c materials," *Phys. Lett. A* 216 197–202 (1996).
- [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] V. Koukouloyannis and S. Ichtiaoglou, "Existence of multibreathers in chains of coupled one-dimensional Hamiltonian oscillators," *Phys. Rev. E* 66, 066602 (2002).
- [17] R. Livi, M. Spicci, and R. S. MacKay, "Breathers on a diatomic FPU chain," *Nonlinearity* 10, 1421–1434 (1997).
- [18] S. Flach, "Existence of localized excitations in nonlinear Hamiltonian lattices," *Phys. Rev. E* 51, 1503–1507 (1995).
- [19] S. Aubry, G. Kopidakis, and V. Kadelburg, "Variational proof for hard discrete breathers in some classes of Hamiltonian dynamical systems," *Discrete and Continuous Dynamical Systems B* 1, 271–298 (2001).
- [20] G. James, "Centre Manifold reduction for quasilinear discrete systems," *J. Nonlinear Sci.* 13, 27–63 (2003).
- [21] G. James and P. Noble, "Breathers on diatomic Fermi-Pasta-Ulam lattices," *Physica D* 196, 124–171 (2004).
- [22] 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).

- [23] J. Cuevas, J. F. R. Archilla, F. R. Romero, "Effect of the introduction of impurities on the stability properties multibreathers at low coupling," *Nonlinearity* 18, 769-790 (2005).
- [24] V. Koukouloyannis and P. G. Kevrekidis, "On the stability of multibreathers in Klein-Gordon chains," *Nonlinearity* 22, 2269-2285 (2009).
- [25] 吉村 和之, "2 原子非線形格子における Discrete Breather の存在と安定性," 数理解析研究所講究録 1645 「非線形波動現象の数理と応用」, 72-79 (2009).
- [26] 吉村 和之, "2 原子非線形格子における multi-site Discrete Breather の存在と安定性," 数理解析研究所講究録 1701 「非線形波動現象の数理と応用」, 169-179 (2010).
- [27] K. Yoshimura, "Existence and stability of discrete breathers in diatomic Fermi-Pasta-Ulam type lattices," *Nonlinearity* 24, 293-317 (2011).
- [28] H. Yoshida, "Existence of exponentially unstable periodic solutions and the non-integrability of homogeneous Hamiltonian systems," *Physica D* 21, 163-170 (1986).
- [29] V. I. Arnold and A. Avez, *Ergodic problem of classical mechanics* (Benjamin, New York, 1968). [吉田耕作訳：古典力学のエルゴード問題 (吉岡書店, 1976).]