数理解析研究所講究録
第 1543 巻 2007 年 220-226

非線形格子の積分不可能性

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 Laboratorics

概要

非同次多項式で与えられるオンサイトポテンシャルと最隣接間相互作用ポテンシャルを持つ広いクラスの一次元非線形格子系に対し，Ziglin の補題を利用して非完全可積分性を証明した結果を示す．さらに，ハミルトニアン以外の解析的積分が存在しないという強い意味の非可積分性についても論じる．

1　はじめに

N 自由度ハミルトン系 $H(q_1,\ldots,q_N,p_1,\ldots,p_N)$ が，N 個の関数的に独立な第一積分 $f_1=H$, f_2, $\ldots,f_N$ で包合的 ($\{f_i,f_j\}=0,\ i,j=1,\ldots,N$) なものを持つとき，系は完全可積分であると言われる．ただし，$\{f,g\}$ はポアソン括弧で，$\{f,g\}=\sum_{k=1}^{N}(\partial f/\partial q_k)(\partial g/\partial p_k)-(\partial f/\partial p_k)(\partial g/\partial q_k)$ と定義される．系に包合的かつ関数的に独立な N 個の第一積分が存在しない，仮に積分が存在しても $N-1$ 個以下である場合を，非完全可積分と呼ぶことにする．完全可積分な場合，系の時間発展は周期的もしくは準周期的となる．一方，非完全可積分の場合には，系はカオス的な振舞いを示すと予想される．ハミルトン系の解の性質を特徴づける上で，完全可積分性の判定は基本的な問題の一つである．

本研究で対象とする非線形格子系は，Fermi 達による数値実験 [1] に始まる非平衡初期状態から平衡状態への緩和過程の研究と関連して，大自由度ハミルトン力学系の一つとして重要な位置を占めるモデルである．また，Intrinsic Localized Mode，または，Discrete Breather と呼ばれる局在波動 [2] の研究に関連しても重要なモデルである．戸田格子 [3] 等の特殊な例を除く種々の非線形格子について，カオス的な解の挙動が数値的に観測されており，その非完全可積分性が予想される．同次ポテンシャルを持つ非線形格子 [4]，および，2 次と 4 次のポテンシャルを持つ Fermi-Pasta-Ulam (FPU) β 格子 [5] に対しては，非完全可積分性が証明がされている．しかしながら，大自由度の非線形格子に関して，非完全可積分性の厳密な証明は充分には成されていない．本稿では，より広いクラスの非同次多項式で与えられるポテンシャル関数を持つ非線形格子に対し，非完全可積分性に関する定理を述べる．以下のハミルトニアンで定義される非線形格子を扱う．

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

上式の U, V は以下の様な非同次多項式ポテンシャルとする．

$$U(X) \;=\; \sum_{k=2}^{2m}\frac{\mu_k}{k}X^k \tag{2}$$

$$V(X) \;=\; \sum_{k=2}^{2m}\frac{\kappa_k}{k}X^k \tag{3}$$

ただし，奇数の k に対しては $\mu_k=0$ と仮定する．すなわち，オンサイトポテンシャル U に対し，対称性 $U(X)=U(-X)$ を仮定する．

系 (1) については，全系の包合的な N 個の解析的積分 f_i, $i=1,\ldots,N$ で，ある低次元部分空間の一点で df_i, $i=1,\ldots,N$ が一次独立となるようなものは，存在しないことが証明されている [6]．すなわち，文献 [6] の定理では，df_i, $i=1,\ldots,N$ の一次独立性について付加条件が満たされる範囲内で，N 個の解析的積分の非存在が示されている．本稿では，Ziglin による補題 [4] を利用して，一次独立性に関する付加条件の無い非完全可積分性定理を述べる．さらに，系にハミルトニアン以外の解析的積分が存在しないという意味の強い非可積分性についても議論する．

本稿の構成は，以下の通りである．2 節で，Ziglin による補題 [4] を説明する．3 節で，定理を述べるために必要な特殊解，直交変分方程式について述べる．4 節で，非線形格子の非完全可積分定理を示す．5 節で，非線形格子の強い非可積分性について議論する．

2 Ziglin の補題

ハミルトン系の運動方程式は通常は実数領域で扱われるが，ここでは，座標 q_i，運動量 p_i，時間 t の各変数は複素数として扱う．ハミルトン系の解析的な積分の非存在を証明する方法として，Ziglin 解析 [4, 7, 8] が知られている．系に積分が存在する場合，多重周期解に沿った直交変分方程式は積分を持ち，そのモノドロミー群には制約が課される．Ziglin 解析とは，モノドロミー群が制約を満足するか否かを調べて系の積分可能性を判定する方法である．本節では，Ziglin の補題を説明する．

複素位相空間 $\mathcal{M}=\mathbf{C}^{2N}$ を考え，その座標を $(q_1,\ldots,q_N,p_1,\ldots,p_N)$ とする．解析的ハミルトニアン $H:\mathcal{M}\to\mathbf{C}$ で定義される N 自由度ハミルトン系

$$\frac{dq_i}{dt}=\frac{\partial H}{\partial p_i},\quad \frac{dp_i}{dt}=-\frac{\partial H}{\partial q_i},\qquad i=1,2,\ldots,N \tag{4}$$

を考える．(4) 式は，$q_i(t)=0$, $(i=1,\ldots,N-1)$, $q_N(t)=\varphi(t)$ なる形をした特殊解を持つと仮定する．解 φ が定める点集合を，$\Gamma=\{(q_1,\ldots,q_N,p_1,\ldots,p_N)\in\mathcal{M}|t\in\mathbf{C}\}$ とする．解 φ に沿った変分方程式は，以下のように得られる．

$$\frac{d^2\boldsymbol{\xi}}{dt^2}+D^2H(t)\cdot\boldsymbol{\xi}=0 \tag{5}$$

ここで，$\boldsymbol{\xi}=(\xi_1,\ldots,\xi_N)$ であり，ξ_i は座標変数 q_i に関する変分を表す．式中の D^2H は解 φ に沿うヘッシアン行列であり，その i 行 j 列成分は $\partial^2H/\partial q_i\partial q_j$ で与えられる．ヘッシアン行列 D^2H が，以下のような構造を持つと仮定する．

$$D^2H=\begin{pmatrix} A(t) & 0 & 0\\ 0 & B(t) & 0\\ 0 & 0 & C(t)\end{pmatrix} \tag{6}$$

ここで，$A(t)$, $C(t)$ はスカラー，$B(t)$ は $N-2\times N-2$ 行列である．すなわち，成分 ξ_1 に関する変分方程式が，$(\xi_2,\ldots,\xi_{N-1})$ に関する変分方程式から分離されていると仮定する．一般には，このような分離は出来ないが，以下に述べる Ziglin の補題では，この分離ができる系を仮定する．成分 ξ_1 に関する変分方程式を，孤立した直交変分方程式と呼ぶことにする．また，この方程式に関するモノドロミー群を G で表す．G の要素であるモノドロミー行列 g は 2 行 2 列の行列であり，その固有値は ρ と ρ^{-1} で与えられる．任意の整数 $k(\neq 0)$ に対して $\rho^k\neq 1$ となるとき，モノドロミー行列 g は非共鳴であると定義す

る．Ziglin の補題は，以下の様に述べられる．

補題 1 [4]. ハミルトン系 (4) が，Γ の連結な近傍 U で定義される関数的に独立かつ包合的な N 個の解析的第一積分 $f_1 = H, f_2, \dots, f_N$ を持つと仮定する．さらに，非共鳴なモノドロミー行列 $g_1 \in G$ が存在すると仮定する．このとき，他の任意のモノドロミー行列 $g_2 \in G$ に対して，(i) g_1 と g_2 は可換であるか，もしくは，(ii) $\mathrm{tr}\, g_2 = 0$ である．

上記の補題は，系が完全可積分である場合の必要条件を与えている．したがって，その対偶をとり，モノドロミー群が必要条件を満たさないことを示せば，系の非完全可積分性が示されたことになる．本稿では，上記補題を用いて示される非線形格子の完全非可積分性定理に関して，結果のみを簡単に記述する．

3　特殊解と孤立した直交変分方程式

複素位相空間 $\mathcal{M} = \mathbf{C}^{2N}$ 上で定義された格子ハミルトニアン (1) を考える．オンサイトポテンシャル $U(X)$ に対して，対称性 $U(X) = U(-X)$ を仮定する．すなわち，奇数の k に対し $\mu_k = 0$．境界条件としては周期境界を仮定し，格子のサイズ N は 4 の倍数とする．すなわち，

$$q_0 = q_N,\ q_{N+1} = q_1, \quad N = 4n\ (n \in \mathbf{N}) \tag{7}$$

とする．格子の運動方程式は，次式となる．

$$\frac{d^2 q_i}{dt^2} + U'(q_i) - V'(q_{i+1} - q_i) + V'(q_i - q_{i-1}) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, N. \tag{8}$$

正準変換 $(q_1, \dots, q_N, p_1 \dots, p_N) \mapsto (Q_0, \dots, Q_{N-1}, P_0, \dots, P_{N-1})$ を次式で定義する．

$$q_i = \sum_{k=0}^{N-1} Q_k \left[\sin\left(\frac{2\pi k}{N} i\right) + \cos\left(\frac{2\pi k}{N} i\right) \right] \tag{9}$$

$$p_i = \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} P_k \left[\sin\left(\frac{2\pi k}{N} i\right) + \cos\left(\frac{2\pi k}{N} i\right) \right] \tag{10}$$

ただし，$i = 1, 2, \dots, N$. 新座標 $\{Q_k, P_k\}$ は，ノーマルモード座標と呼ばれる．

非線形格子 (1) は，$Q_{N/2}(t) = \varphi(t), Q_k(t) = 0, (k \neq N/2)$ なる形をした特殊解を持つことが，運動方程式 (8) を用いて示される．解 φ は，次の微分方程式を満たす．

$$\frac{d^2\varphi}{dt^2} + \sum_{r=1}^{m} \left(\mu_{2r} + 2^{2r}\kappa_{2r} \right) \varphi^{2r-1} = 0 \tag{11}$$

運動方程式 (11) は，次のエネルギー積分を持つ．

$$\frac{1}{2}\left(\frac{d\varphi}{dt}\right)^2 + W_1(\varphi) = h \tag{12}$$

ここで，次式で定義される実効ポテンシャル $W_1(X)$ を導入した．

$$W_1(X) = \sum_{r=1}^{m} \frac{1}{2r} \left(\mu_{2r} + 2^{2r}\kappa_{2r} \right) X^{2r}. \tag{13}$$

(12) 式における定数 h は1粒子当たりのエネルギーと見なせ，全系 (1) のエネルギー H とは，$h = H/N$ で関係づけられる．

上記の特殊解に沿う変分方程式を考えると，座標 $Q_{N/4}$ に関する方程式は分離されることが示される．孤立した直交変分方程式は，

$$\frac{d^2\xi}{dt^2} + \left[\sum_{k=2}^{2m}(k-1)\left(\mu_k + 2^{k-1}\kappa_k\right)\varphi(t)^{k-2} \right]\xi = 0 \tag{14}$$

となる．ただし，ξ は $Q_{N/4}$ 方向の変分を表す．

4 非完全可積分性定理

解 φ は，点集合 $\Gamma_h = \{(q_1, \ldots, q_N, p_1, \ldots, p_N) \in H^{-1}(Nh) |\ q_i = (-1)^i\varphi(t),\ p_i = (-1)^i\dot{\varphi}(t),\ t \in \mathbf{C},\ i = 1, 2, \ldots, N\ \} \subseteq \mathcal{M} = \mathbf{C}^{2N}$ を定める．ただし，$h \in (0, \infty)$ である．直交変分方程式 (14) のモノドロミー群を調べることにより，周期非線形格子 (1) の非完全可積分性に関する次の定理が得られる．

定理 1． $N = 4n\ (n \in \mathbf{N}),\ m \geq 2$ とする．パラメータ $\mu_k,\ \kappa_k,\ k = 2, \ldots, 2m$ は，以下の条件を満たすものとする：(i) 奇数の k に対し $\mu_k = 0$, (ii) $\min\{\mu_2 + 2\kappa_2, \mu_2 + 4\kappa_2\} > 0$, $\mu_{2m} \geq 0$, $\kappa_{2m} > 0$, (iii) 任意の実数 $h \in (0, \infty)$ に対し，代数方程式 $W_1(X) - h = 0$ の解は全て異なる．このとき，ほとんど全ての $h \in (0, \infty)$ に対し，Γ_h の連結な近傍 U で定義される系 (1) の関数的に独立かつ包合的な N 個の解析的第一積分 $f_1 = H, f_2, \ldots, f_N$ は存在しない．

低次のポテンシャル ($m = 2, 3, 4$) の場合について，定理1を適用した例を示す．これらの場合については，任意の $h > 0$ に対し方程式 $W_1(X) - h = 0$ が $2m$ 個の異なる解を持つための係数 μ_k，κ_k に対する十分条件を，陽に求めることができる．

実効ポテンシャル (13) には，X の偶数次の項しか現れないので，変数 $Y = X^2$ を導入する．変数 Y を用いると，方程式 $W_1(X) - h = 0$ は，

$$\mathcal{F}_m(Y) = \sum_{r=1}^{m} A_r Y^r - h = 0 \tag{15}$$

と書き換えられる．ここで，係数 A_r は，次式で定義した．

$$A_r = \frac{1}{2r}\left(\ \mu_{2r} + 2^{2r}\kappa_{2r}\ \right) \tag{16}$$

明らかに，方程式 $\mathcal{F}_m(Y) = 0$ が任意の $h > 0$ に対して m 個の異なる解を持つ場合に限り，元の方程式 $W_1(X) - h = 0$ が任意の $h > 0$ に対して $2m$ 個の異なる解を持つ．したがって，任意の $h > 0$ に対し $\mathcal{F}_m(Y) = 0$ が m 個の異なる解を持つ様な係数 μ_k，κ_k に対する条件を求めればよい．ポテンシャルが低次の場合，この係数条件は，$\mathcal{F}_m(Y) = 0$ の判別式を利用して求めることができる．

1) $m = 2$ の場合．

ポテンシャル係数 μ_k, κ_k，$k = 2, 3, 4$ が，条件 $\min\{\mu_2 + 2\kappa_2, \mu_2 + 4\kappa_2\} > 0$, $\mu_4 \geq 0$, $\kappa_4 > 0$, $\mu_3 = 0$ を満たすとする．このとき，$N = 4n\ (n \in \mathbf{N})$ なる周期格子 (1) は，定理1の意味で非完全可積分である．FPU 格子は，オンサイトポテンシャルが無い場合 $\mu_2 = \mu_3 = \mu_4 = 0$ に対応する．よって，$\kappa_2, \kappa_4 > 0$

ならば，FPU 格子は積分不可能である．

2) $m=3$ **の場合．**

ポテンシャル係数 μ_k, κ_k, $k=2,3,\ldots,6$ が，条件 $\min\{\mu_2+2\kappa_2, \mu_2+4\kappa_2\}>0$, $\mu_6\geq 0$, $\kappa_6>0$, $\mu_3=\mu_5=0$, $-\sqrt{3A_1A_3}<A_2\leq 2\sqrt{A_1A_3}$ を満たすとする．このとき，$N=4n$ $(n\in\mathbf{N})$ なる周期格子 (1) は，定理 1 の意味で非完全可積分である．

3) $m=4$ **の場合．**

ポテンシャル係数 μ_k, κ_k, $k=2,3,\ldots,8$ が，条件 $\min\{\mu_2+2\kappa_2, \mu_2+4\kappa_2\}>0$, $\mu_8\geq 0$, $\kappa_8>0$, $\mu_3=\mu_5=\mu_7=0$, $108{A_1}^2{A_4}^2+27({A_3}^2-4A_2A_4)A_1A_3+(32A_2A_4-9{A_3}^2){A_2}^2>0$ を満たすとする．このとき，$N=4n$ $(n\in\mathbf{N})$ なる周期格子 (1) は，定理 1 の意味で非完全可積分である．

5　強い非可積分性について

系にハミルトニアン以外の解析的積分が存在しないという意味の強い非可積分性について，是迄に知られている結果を整理し，未解決問題について述べる．$\mathcal{M}=\mathbf{C}^{2(N-1)}$ 上で定義された以下の同次ポテンシャルを持つ非線形格子を考える．

$$H=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}p_i^2+\frac{1}{k}\sum_{i=1}^{N}(\,q_i-q_{i-1})^k \tag{17}$$

ポテンシャル次数 k は偶数と仮定する．境界条件としては固定端境界条件を仮定し，格子のサイズ N は偶数とする．すなわち，

$$q_0=q_N=0,\quad N=2n\ (n\in\mathbf{N}) \tag{18}$$

とする．固定端境界条件を課しているので，系の自由度は $N-1$ である．

同次非線形格子 (17) の強い非可積分性に関して，以下の定理が知られている．

定理 2 [9]. $\Delta\rho_m$, $m=1,2,\ldots,N-1$ を次式で定義する．

$$\Delta\rho_m=\sqrt{1+\frac{16k(k-1)}{(k-2)^2}\sin^2\left(\frac{\pi m}{2N}\right)},\quad m=1,2,\ldots,N-1 \tag{19}$$

もし $\Delta\rho_m$, $m=1,2,\ldots,N-1$ が有理数体上一次独立ならば，系 (17) において，ハミルトニアン以外の解析的積分は存在しない．

ここで，$\Delta\rho_m$ の有理数体の上一次独立性は，$c_m\in\mathbf{Q}$, $m=1,2,\ldots,N-1$ を有理数としたとき，関係式 $c_1\Delta\rho_1+c_2\Delta\rho_2+\cdots+c_{N-1}\Delta\rho_{N-1}=0$ が成立するのは $c_1=\cdots=c_{N-1}=0$ の場合に限ることと定義される．しかしながら，自由度が大きな場合については，$\Delta\rho_m$ の有理数体上の一次独立性をチェックすることは非常に困難な問題となる．

文献 [9] では，ポテンシャル次数 $k=4$ で，系の自由度 $N-1=3$, 5 の場合に対して，$\Delta\rho_m$, $m=1,2,\ldots,N-1$ の有理数体上の一次独立性が示されている．すなわち，自由度 3 と 5 の場合については，4 次の同次非線形格子 (17) の強い非可積分性は証明されている．また，文献 [5] では，$\Delta\rho_m$ の有理数体上一次独立性を仮定すれば，2 次と 4 次の非同次ポテンシャルを持つ FPU-β 格子が，系のエネルギーが充分小さい領域で強い非可積分性を持つことが示されている．$\Delta\rho_m$ の有理数体上一次独立性は，自由度

3と5の場合については示されている [9] ので，自由度3と5のFPU-β格子については，エネルギーが充分小さい領域で強い非可積分性が証明されたことになる．

任意に大きな奇数自由度$N-1$，および，任意の4以上の偶数ポテンシャル次数kに対して，同次非線形格子 (17) は強い非可積分性を有すると強く予想される．この点に関して，「任意の偶数Nと$k\geq 4$に対して，$\Delta\rho_m$, $m=1,2,\ldots,N-1$は有理数体上一次独立である.」という予想が，吉田により与えられている [9]．この予想が正しければ，定理2に基づき，任意大自由度の同次非線形格子の強い非可積分性が証明されたことになる．しかしながら，以下に示すような反例を見出した．$k=16$, $N=6$の場合を考える．この場合に対して，$\Delta\rho_m$を計算すると以下の結果が得られる．

$$\Delta\rho_1=\frac{1}{7}\sqrt{529-240\sqrt{3}},\ \Delta\rho_2=\frac{17}{7},\ \Delta\rho_3=\frac{23}{7},\ \Delta\rho_4=\frac{1}{7}\sqrt{769},\ \Delta\rho_5=\frac{1}{7}\sqrt{529+240\sqrt{3}} \tag{20}$$

$\Delta\rho_2$と$\Delta\rho_3$が共に有理数であるので，$\Delta\rho_m$, $m=1,2,\ldots,5$は，有理数体上一次従属となる．すなわち，吉田の予想は，そのままの形では成立しないことが明らかになった．吉田の予想が正しいことを証明したと主張する論文も存在するが，上記の反例より，その証明は完全ではないと思われる．したがって，任意大自由度の同次非線形格子の強い非可積分性の証明は，未だ解決していないと考えられる．

以上をまとめると，現在のところ，強い非可積分性が証明されている系は，自由度3と5の4次の同次非線形格子，および，非同次非線形格子として，自由度3と5のFPU-β格子のみであると言える．今後の課題としては，(i) より一般の非同次多項式で与えられるポテンシャル関数を持つ非線形格子に対し，強い非完全可積分性を証明すること，および，(ii) 任意の大自由度非線形格子に対して，強い非完全可積分性を証明すること，以上の2点が挙げられる．

参考文献

[1] E. Fermi, J. Pasta, and S. Ulam, *Collected Papers of E. Fermi*, edited by E. Segré (University of Chicago, 1965).

[2] S. Takeno, K. Kisoda, and A. J. Sievers, Intrinsic localized vibrational modes in anharmonic crystals: stationary modes, Prog. Theor. Phys. Suppl. **94** (1988) 242–269); A. J. Sivers and S. Takeno, Intrinsic localized modes in anharmonic crystals, Phys. Rev. Lett. **61** (1988) 970–973.

[3] M. Toda, *Theory of nonlinear lattice* (Springer, 1981).

[4] S. L. Ziglin, Integrals in involution for groups of linear symplectic transformations and natural mechanical systems with homogeneous potential, Functional Anal. Appl. **34** (2000) 179-187.

[5] K. Umeno, Singularity analysis towards nonintegrability of non-homogeneous nonlinear lattices, *Hamiltonian systems with three or more degrees of freedom*, edited by C. Simo (Kluwer, 1999) 614-617.

[6] K. Yoshimura and K. Umeno, Nonintegrability of nonhomogeneous nonlinear lattices, J. Math. Phys. **45** (2004) 4628-4639.

[7] S. L. Ziglin, Branching of solutions and non-existence of first integrals in Hamitonian mechanics I, Functional Anal. Appl. **16** (1983) 181-189.

[8] S. L. Ziglin, Branching of solutions and non-existence of first integrals in Hamitonian mechanics II, Functional Anal. Appl. **17** (1983) 6-17.

[9] H. Yoshida, A criterion for the non-existence of an additional integral in Hamiltonian systems with n degrees of freedom, Phys. Lett. A **141** (1989) 108-112.

[10] K. Umeno, Non-perturbative non-integrability of non-homogeneous nonlinear lattice induced by non-resonance hypothesis, Physica D **94** (1996) 116-134.