様式 C-19

科学研究費補助金研究成果報告書

平成 21 年 4 月 20 日現在

研究種目：基盤研究(C)
研究期間：2006-2008
課題番号：18540378
研究課題名（和文）　混合位相空間における古典および量子カオスに関する研究

研究課題名（英文）　Classical and quantum chaos in the system with mixed phase space

研究代表者
首藤 啓（SHUDO AKIRA）
首都大学東京・大学院理工学研究科・教授
研究者番号：60206258

研究成果の概要：
完全に規則的でも，また，全くランダムでもない系の古典動力学，ならびに量子動力学の性質を調べ，物理現象にしばしば見られる階層的なタイスケール発生機構，動力学における多様性の発現過程を力学系理論に基づいて明かにした．特に，自由度の高い物理系における量子トンネル効果の全く新しい側面を発見し，その解析手法を，新しく発展しつつある数学を用いることにより確立した．

交付額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合　計
2006 年度	1,100,000	0	1,100,000
2007 年度	1,000,000	300,000	1,300,000
2008 年度	800,000	240,000	1,040,000
年度			
年度			
総　計	2,900,000	540,000	3,440,000

研究分野：非線形物理学
科研費の分科・細目：数理物理・物性基礎
キーワード：カオス，量子カオス，ハミルトン系，非可積分系，混合位相空間，遅い緩和，量子トンネル効果，複素半古典論

１．研究開始当初の背景

ハミルトン力学系では，系の自由度に相当する個数の保存量が存在する場合，系は完全可積分となる．完全可積分系は対称性の良い可解な系ではあるが，その単純さゆえに，現実の物理現象の複雑さを表現するモデルとしては適当ではない．一方，統計力学のエルゴード問題に関連して数学者によって研究がはじめられた"双曲力学系"は，位相空間の全域をカオスが覆う，完全可積分系の対極に位置する理想カオス系である．双曲力学系はカオスのプロトタイプとして重要であり，現実の物理系の複雑さの一側面をモデル化することは確かであるが，物理・化学，さらには生物系などにしばしば見られる階層的なタイムスケールや集団的運動，遅い緩和過程など，動力学における多様性の発現過程を十分記述することはできない．完全可積分な系に摂動が加わると，位相空間にカオスが出現すると同時に，完全可積分系がもっていた可積分的な運動（KAM トーラス）も残り続ける．

現実の物理系は，ほとんどすべての場合，カオスと規則的運動が混在する "混合系" であり，位相空間内にはカオス軌道とトーラス軌道とが自己相似的に混在する "混合位相空間" が実現される．混合位相空間をもつハミルトン系に研究は，少数自由度古典力学系に関しては，過去多くの研究があり，物理の問題の中では一定の成果を収めてきた経緯がある．しかしながら，少数自由度系の成果がどこまで大自由度の系に有効か？さらには，混合位相空間をもつ量子系についての研究は未だ十分とはいえない状況であった．

２．研究の目的

本研究の大きな特徴は，混合位相空間をもつ系を，現実の分子系などの大規模分子動力学計算を行うことにより，現象論レベルでの問題を絞り込む作業と，できるだけ単純な小さな系に対して，力学系理論，微分方程式，漸近展開理論などを援用することによる厳密な解析とを並行に進めていく点にある．

(1) 大自由度ハミルトン系の遅い緩和過程の起源

異なる系の階層性の間には何らかの意味での共通点・普遍性が存在するのか？等の問題は，大自由度の力学系理論の領域に属する．本研究では，現実の分子，分子集団系が内部自由度（回転，分子内振動・・）もつ点に注目し，これまでのハミルトン力学系の研究では見落とされてきた，系のヘテロ性の存在と運動の階層性の関係を追求する．また，ガラスにおける遅い運動の起源を力学系理論の観点から研究する．ガラスに見られる遅い運動は，現在，いわゆる「エネルギーランドスケープ描像」を中心に議論されることが多いが，混合位相空間をもつハミルトン力学系としてみたとき，遅い運動発生についてはほとんどその説明がない．ガラスのアルファ緩和を特徴づける引き伸ばされた指数的緩和を発生するミニマルな力学系モデルは何か？ガラスの遅い緩和をもたらす位相空間の不変構造は多自由度固有のものか？など，動力学としての基本問題に取り組む．

(2) 少数自由度混合系の記号力学系と淀み運動

双曲力学系を解析する際有効な "記号力学系 "の手法を活用することにより，混合系に見られる遅い緩和課程を研究する．可積分領域付近に長時間留まり続ける軌道（淀み運動）の詳しい解析を行う．淀み運動は，ハミルトン系における遅い緩和を生み出すもっとも基本的なメカニズムであり，遅い運動（slow dynamics）の起源を知る上で避けて通ることはできない．ここでは，近年，数学者によって発見された，混合位相空間が実現することが厳密に証明されたビリヤード系に対する淀み運動とその発生機構の詳しい解析を実行し，遅い運動の普遍則の有無を議論する．

(3) 混合系の動的トンネル過程と両生固有状態

混合系における古典軌道は，可積分成分とカオス成分との間を行き来することができず，位相空間内の各不変構造内に閉じこめられている．しかし，対応する量子系では，その波動性により，古典的には許容されない不変構造内での遷移が可能になる．そのような位相空間中に形成された動的に障壁を越える量子遷移は「動的トンネル効果」と呼ばれ，近年のボーズ凝縮を用いた原子系をはじめとして実験的観測の対象にもなっている．動的トンネル効果は，混合系においてはじめて現れる非可積分系固有の量子現象であり，量子カオス研究の中心的課題のひとつでもある．ここでの目的は，位相空間内のカオスの強さ（不安定性，混合性の強さ）がトンネル確率にいかなる影響を及ぼすか？という点を調べることである．とくに，近年，Ketzmerick らによって発見された「両生固有状態」と呼ばれる，対応する古典系の可積分領域とカオス領域の両方にまたがる量子状態（古典的に許容されない不変構造間をまったく自由にトンネルすることができるような状態）に対する詳しい解析を進める．本研究では，両生固有状態が導く著しい大きなトンネル遷移確率が，ジュリア集合の構造からいかに導かれるか，という点を調べ，カオス系のトンネル現象の制御にまで問題を発展させる．

(4) 完全 WKB 解析にもとづく混合系の半古典論

混合系の量子動力学を理解するための道具として，非可積分系における完全 WKB 理論を開発・発展させる．また，それを用いた多自由度系，さらにはカオス系固有の純量子論的効果の発生機構解明を行う．WKB 理論が量子力学の近似理論として発展してきた経緯は既に広く知られるところであるが，近年，数学者によって提唱された完全 WKB 法は，長年，その意味が曖昧なままに放っておかれた「高次元のストークス現象」に対する厳密な解析を可能にし，ストークス幾何学，という新しい領域を拓くまでに至った．本研究では，量子カオス系の解析に完全 WKB 解析を導入することにより，ストークス幾何学の分岐理論（ストークス幾何学の pruning 理論）を確立し，混合位相空間に固有な純量子効果の特徴づけを行う．さらに，多次元系のストークス幾何においてはじめて現れる，仮想的

転回点と新しいストークス線のカオス系における積極的役割を解明することにより，これまで知られていない新しい非可積分系固有の量子相関・量子効果を呈示することを目指す．

３．研究の方法

(1) 大自由度ハミルトン系の遅い緩和過程の起源

大自由度系にしばしば観測される階層的なタイムスケールや集団的なモードは，運動のタイムスケールの分離に起因する．混合位相空間の観点から，以下の２点に関して，大自由度ハミルトン系におけるタイムスケールの分離の起源を調べる．

① 少数自由度ハミルトン系においては，位相空間の可積分成分（KAM トーラス）など局所的な不変構造が軌道を間欠的に捕捉することにより，運動を律速し長時間の相関をもった運動が現れる．一方，大自由度系では，位相空間全体に占める可積分成分の体積がほとんど無視できるほど小さくなるため，少数自由度系で有効であった "近可積分描像" に基づく遅い緩和機構は働かなくなる．そこで，ここでは，現実の分子などに回転，分子内振動などの内部自由度・内部構造が存在することに注目し，"Boltzmann-Jeans 機構"，すなわち，異なる内部自由度間のタイムスケールの分離によって大自由度ハミルトン系の遅い緩和過程をどこまで理解することができるかを探る．

② ２次元の双曲空間上の剛体粒子モデルを考える．負の曲率を持った曲がった空間である双曲空間上では，並進対称性が失われるため結晶構造が存在しない．双曲空間上の多体問題は，粒子配置に関するフラストレーションがあり，単一成分系でありながらガラスのモデルになると提案されている．このモデルの本研究における重要な側面は，淀み運動を引き起こすトーラスが存在しないことである．双曲空間上の測地流（質点の等速運動）の問題は，カオスが非常に強い場合にあたる一様双曲系のクラスに属す．粒子数が増えても剛体粒子であれば，系全体としても位相空間にトーラスが生まれることはない．そのためトーラス近傍の淀み運動による長時間相関はあり得ず，多自由度ハミルトン系の長時間相関を研究するための必要最小限のモデルとなっている．

(2) 少数自由度混合系の記号力学系と淀み運動

記号力学系の手法は，分割された位相空間の各領域に割り振られた記号列の並びによってもともとの力学系の軌道を置き換えるものであり，両者が位相共役な関係にあるような「良い分割」が見いだされたとき，その力学系の研究は記号力学を調べることに帰着される．２次元以上の力学系の場合，これまで，有限型のマルコフシフトと等価となるような双曲力学系の記号力学系の研究は盛んに行われてきたが，非双曲系の記号力学系はあまり研究がない．本研究では非双曲力学系における，記号力学系構成の可能性・不可能性それ自体を問題にしつつ，可積分・カオス領域とが共存する混合位相空間上での記号力学系の問題を調べる

混合位相空間をもつ非可積分系の難しさのひとつは，混合位相空間を自由自在に設計することができないことにある．しかし，あるクラスのビリヤード問題など，非常に単純な混合位相空間をもつ系を比較的自在に設計できることがわかってきた．本研究では，この「理想混合位相空間」をもつ力学系に対して，ハミルトン系の遅い緩和の起源を追求する．ハミルトン系の遅い運動は，可積分成分とカオス成分との境界に位置する淀み層と呼ばれる境界領域の存在に起因するが，この「理想混合位相空間」の大きな特徴は，この境界領域がきわめて単純な構造をもつことから，淀み層の精密な解析が可能となることである．

(3) 混合系の動的トンネル過程と両生固有状態

混合位相空間に存在する可積分成分（KAM 曲線）上にある古典軌道は，位相空間内のいかなるカオス領域にも遷移することはできない．古典的に許容されない領域同士の遷移は，古典論を複素空間に拡張することにより原理的には可能になるが，実際には，複素空間にまで張り出した KAM 曲線（複素 KAM 曲線）が動的障壁として遷移を妨げる．このことから，混合系においては，古典論を単純に複素化することによってはトンネル効果を記述することはできない．そのため，KAM 曲線の解析接続可能性の条件，および，その解析接続可能な限界（自然境界）の幾何学的な構造を知ることは，混合位相空間のトンネル効果を理解する上で必須の課題となってくる．そこでまず，

① 複素力学系の解析がもっとも容易な，２次元の保測写像の複素 KAM 曲線の存在条件とその上のダイナミクスに絞って詳しく調べる．とくに，KAM 曲線の自然境界とジュリア集合という，従来，数学においても，まったく別の文脈でしか議論されてこなかった問題を量子トンネル現象という物理から派生した問題として調べることにこの研究の大きな特徴がある．

② 次に，２次元保測写像にあらわれる両生固有状態を，カオス的トンネル効果の解析を

通して確立した複素半古典論の手法を用いることにより調べる．複素空間のジュリア集合と両生固有状態の出現がいかに関与しているかを詳しく検討し，いかなる条件のもとでトンネル確率の異常な増大が起こるか？という問題を明らかにする．最大の目標は，混合位相空間の KAM 曲線になぜ固有関数が局在するか？という疑問に答えることであるが，両生固有状態の発生条件を明らかにすることができれば，問題を，混合系のトンネル確率の制御にまで発展させる可能性が拓かれる．

(4) 完全 WKB 解析にもとづく混合系の半古典論

混合系のストークス幾何学を以下の順序で解析していく．(i) 馬蹄極限と呼ばれる，力学系として最も簡単な構造をもつ系のストークスグラフに対して，そのグラフ論的な特徴付けを行う．(ii) 馬蹄極限から，混合位相空間をもつような状況にパラメータを動かしていったときに出現し得るストークスグラフの分岐のパターンの分類を行う．(iii) 任意のタイムステップでの馬蹄極限でのストークスグラフのパターンを導出する．(iv) 任意ステップでの混合系のストークスグラフを馬蹄極限からの分岐を追跡することによって出現し得るグラフのパターンを解析する．すなわち，ストークスグラフの分岐理論（ないし，pruning 理論）を構築する．仮想的転回点・新しいストークス線はカオス系においてはじめて現れることから，これらがカオス系のストークス幾何学に果たす積極的な役割を明らかにすることは，カオス系固有の量子相関（複素古典軌道間の大域的な相関）を明らかにすることに直接つながる．

４．研究成果

(1) 大自由度ハミルトン系の遅い緩和過程の起源

① 剛体粒子系におけるベキ分布の指数と粒子数との関係

長方形の境界内の剛体粒子系について，中立安定な周期軌道族の近傍の性質を解析し，再帰時間分布に見られるベキ分布の指数γが粒子数Ｎに比例することを明らかにした．

長方形の境界内の剛体粒子系において，再帰時間ｔ（ある領域から出発した軌道が再度その領域に戻るまでの時間）の分布 P(t)に関して，エルゴード理論をもとにした解析を行った．この系では，各粒子が平行な境界の間で衝突を繰り返す中立安定な周期軌道族が，ベキ分布を導く間欠的な運動の原因となる．位相空間内で中立周期軌道族の近傍の構造，特にその次元を解析的に調べることにより，ベキ分布 $P(t)\sim t^{-\gamma}$ の指数γと粒子数Ｎとが $\gamma=N+2$ という関係にあることを導いた．さらに数値計算により，この解析の妥当性を確かめた．

② ガラスのシンプルなモデルの遅い運動の解析

ガラスのシンプルなモデルとして，双曲空間上の剛体粒子系のシミュレーションを行い，ガラス系に典型的な長時間の相関を持った集団運動が現れることを明らかにした．ハミルトン力学系の立場からガラス系に見られる遅い運動の起源を解明するために，双曲空間上の多体剛体粒子系の動力学を解析した．双曲空間上では並進対称性が失われていることから，単一成分系であっても結晶化せず，ガラス系の最もシンプルなモデルであると期待される．分子動力学シミュレーションを行い，ガラス系に特徴的な長時間の相関を持った運動があらわれることを，平均二乗変位を計算することにより確かめた．

(2) 少数自由度混合系の記号力学系と淀み運動

トーラスとカオス軌道との境界が単純な２次元区分線形写像において，記号力学系を導入することにより，安定な軌道の周りに不安定周期軌道が集積していることを示し，この集積する周期軌道がベキ則の起源となっていることを解析的に示した．２自由度ハミルトン系のモデルである２次元保測写像において，トーラスの近傍の性質を詳細に調べた．区分的に線形な写像を用いることにより，パラメータの変化によってトーラスがつぶれた構造である中立安定な周期軌道族が存在する位相空間を実現することできる．周期軌道族の近傍の運動を調べると，不安定周期軌道が周期軌道族に向かって集積していることが明らかになった．この不安定周期軌道は，不安定性が周期に対して代数的に変化するという性質を持つ．このような不安定周期軌道の性質から，周期軌道展開の方法を用いて，種々の統計量にベキ則が現れるということを解析的に導いた．

(2) 混合系の動的トンネル過程と両生固有状態

①カオス状態の非局在化によるトンネル確率の増加

カオス領域で起こっている動的局在を雑音印加などの方法で無効化すると，古典カオス領域で（準実）トンネル軌道間がもつ干渉が破壊され，トンネル確率が大幅に増大することが数値計算により確かめられた．通常，雑音などの外部環境と接触させると，系が古典化によりトンネル確率が減少することが知られているが，カオス的トンネル過程では全く逆のことが起こることになる．以上の結果

より，カオス領域でおこる動的局在過程と，位相空間上の規則領域とカオス領域との間の動的トンネル過程とが相互に独立な過程ではなく，非常に強く相関し合っていることがわかる．この結果を受け，１次元周期外力系が２つ結合した２次元の周期外力系に対して，同様の考察を行った結果，１次元系において雑音印加によって実現された動的局在の無効化による，カオス的トンネル効果の増大現象が，２次元結合系では，系の次元が大きくなったことによる局在長の増大効果によってそのままの状態で実現された．このことは，カオスとトーラスの混合系で従来信じられていた「半古典波動関数仮説」に再考を促す結果と言える．

(4) 完全 WKB 解析にもとづく混合系の半古典論

① カオスを発生するもっとも単純な写像系に対して，そのストークス幾何学を考察するための定式化を行い（仮想的転回点と新しいストークス線の定義），そのストークス幾何学を考察した．とくに，今年度は，「馬蹄力学」と呼ばれるカオス系としてはもっとも簡単な構造をもつ状況におけるストークス幾何学を詳しく検討し，一般の時間ステップにおける接続公式を与えるアルゴリズムを導出した．また，古典系においては，馬蹄力学が崩壊していく過程において現れるストークスグラフの分岐のタイプの分類を行うことにより，馬蹄力学が崩れた際のストークス幾何学を記述する方法論を提案した．さらに，系のパラメータ変動に対するストークスグラフの構造安定性の可能性を指摘した．

② 完全 WKB 解析に基づき，多準位の非断熱遷移の問題に取り組んだ．３準位時間依存モデルは，自明でない多準位の非断熱遷移のもっとも簡単なモデルであり，完全 WKB 解析にもとづいたストークスグラフを描くアルゴリズムを開発し，いくつかのケースについて具体的なストークス幾何の様子を考察した．時間依存の多準位の非断熱遷移の問題については，その透熱表現された準位がすべて交差するという条件のもとでは，Aoki-Kawai-Takei によって，一般の n 準位問題の S 行列の具体形が最近与えられた．Aoki-Kawai-Takei の結果は，形式的には，従来の二準位モデルの繰り返しで一般の n 準位の問題も与えられる，というものであり，表面上は，多準位特有の効果はあらわれないことになっている．われわれが調べたのは，透熱表現された準位が交差しない場合についてであり，この場合には，Aoki-Kawai-Takei の解析とは異なり，ストークス幾何の中に出てくる新しいストークス線が，最終的なＳ行列の表式を導出する際に本質的な役割を果たすことが明らかになった．

５．主な発表論文等

（研究代表者，研究分担者及び連携研究者には下線）

〔雑誌論文〕（計１３件）

1) A. Shudo and K.S. Ikeda: Stokes geometry for the quantum Henon map, Nonlinearity, 21, 1831-1880 (2008)(査読有り)

2) A. Shudo, Y. Ishii and K.S. Ikeda: Chaos Attracts Tunneling Trajectories : A Universal Mechanism of Chaotic tunneling, Europhys. Lett. 81, 50003 (5pages) (2008)(査読有り)

3) T. Onishi, A. Shudo and K.S. Ikeda: Trajectory descriptions of ionaizaton processes in laser fields “Progress in Ultrafast Intense Laser Science III" pp.33-52 (Springer, 2008)(査読有り).

4) A. Shudo: Virtual Turning Points and New Stokes Curves in Stokes Geometry of Quantum Henon map, Nonlinear Phenomena in Complex Systems, 10, 41-50 (2007) (査読有り)

5) A. Ishikawa, A. Tanaka and A. Shudo: Quantum suppression of chaotic tunneling, J. Phys. A 40, F1-F9 (2007)(査読有り).

6) A. Shudo: A Role of Virtual Turning Points and New Stokes Curves in Stokes Geometry of the Quantum Henon Map, "Algebraic analysis of differential equations"pp.251-264 (Springer, 2007)(査読有り).

7) T. Aoki, N. Honda, T. Kawai, T. Koike, S. Sasaki, A. Shudo and Y. Takei: Virtual turning points -- A gift of microlocal analysis to the exact WKB analysis --, "Algebraic analysis of differential equations" pp.29-43 (Springer, 2007)(査読有り).

8) A. Shudo, K. Ichiki and S. Saito: Origin of slow relaxation in liquid water dynamics: A possible scenario for the presence of bottleneck in phase space, Europhys. Lett. 73, 826-832 (2006)(査読有り)

9) H. Tanaka and A. Shudo: Recurrence time distribution in mushroom billiards with parabolic hat, Phys. Rev. E 74, 036211 (5 pages)(2006) (査読有り)

〔学会発表〕(計 44 件)

1) A. Shudo : A role of new Stokes curves in quantized Henon map, Foundations of exact WKB analysis and resurgence theory" 2008 12, RIMS, Kyoto

2) A. Shudo : Some aspects of classical and quantum dynamics in sharply divided phase space, Japan-Slovenia International Workshop on Nonlinear Dynamics, 2008 11, Komaba, University of Tokyo

3) A. Shudo: Chaotic Tunneling in Higher Dimensions Dynamics Days Asian Pacific" 2008 9, Nara

4) 首藤 啓: 量子カオスの諸問題と多次元トンネル効果, 多様な非線形ダイナミクスを生かした次世代制御調査研究会 2008 8, 早大

5) A. Shudo: Toward the pruning front theory of the Stokes geometry, Let's face chaos through nonlinear dynamics" 2008 7, Maribor, Slovenia

6) A. Shudo: Amphibious complex orbits and its manifestation in quantum mechanics, Let's face chaos through nonlinear dynamics" 2008 7, Maribor, Slovenia

7) A. Shudo, Ergodic problems and slow relaxation in many dimensional Hamiltonian systems, TMU/SNU Joint Seminar on Nano-Science and Related Topics, 2008 2, TMU

8) A. Shudo : Exact WKB analysis for the multilevel non-adiabatic transition problem, Japan-Slovenia International Workshop on Nonlinear Dynamics, 2007 11, Osaka

9) 首藤 啓: カオス的トンネル効果の基本仮説と未解決問題 , ハミルトン系研究集会, 2007 11, 岐阜大

10) A. Shudo: Quantum suppression of chaotic tunneling, 8th Slovenia-Japan symposium 2007 7, Maribor, Slovenia

11) 首藤 啓: 量子カオスの諸問題と半古典ゼータ関数 II, Encounter with Mathematics『力学系のゼータ関数 --古典力学と量子力学のカオス--』2007 5, 中大

12) 首藤 啓: 量子カオスの諸問題と半古典ゼータ関数 I, Encounter with Mathematics『力学系のゼータ関数 --古典力学と量子力学のカオス--』2007 5, 中大

13) 首藤 啓: ハミルトン系における遅い緩和 : その数値的検証を巡るいくつの話題, 第二回 連成シミュレーションフォーラム『階層的な時間スケールが作り出す非平衡非定常性をどうとらえるか』2007 2, 九大

14) 首藤 啓: 量子多項式写像のストークス幾何学における新しいストークス曲線の役割, 数理解析研究所研究会 『高階微分方程式の完全ストークス幾何の研究』2006 10, 京大

15) A. Shudo: Strong Enhancement of Tunneling Amplitude due to Desturction of Coherence in Chaotic Tunneling Trajectories, Novacella Autumn Conference Chaos and Complex Systems 2006" 2006 10, Novacella, Italy

16) 首藤 啓:カオス系のトンネル軌道の特性について, 特定領域研究『強レーザー光子場における分子制御』研究成果報告会 2006 9, 東大

〔その他〕
ホームページ
http://www.comp.tmu.ac.jp/nonlinear/ja/index.html

６．研究組織
(1)研究代表者
首藤 啓(SHUDO AKIRA)
首都大学東京・大学院理工学研究科・教授
研究者番号：60206258

(3)連携研究者
田中 篤司(TANAKA ATSUSHI)
首都大学東京・大学院理工学研究科・助教
研究者番号：20323264
斎藤 真司(SAITO SHINJI)
分子科学研究所・計算科学研究系・教授