

令和元年11月1日現在

機関番号：12608

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2012～2015

課題番号：24540394

研究課題名(和文) 多変数超幾何関数によるランダム行列理論の新展開と量子エンタングルメントの解明

研究課題名(英文) a novel development of random matrix theory by means of multivariate hypergeometric functions and elucidation of quantum entanglement

研究代表者

足立 聡 (Adachi, Satoshi)

東京工業大学・理工学研究科・助教

研究者番号：90211698

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,800,000円

研究成果の概要(和文)：結合量子系で動力学による時間発展により生成される量子エンタングルメントは動力学が強くカオス的である場合には系の詳細によらない強い普遍性を示す。量子エンタングルメントを計量する特性量はシュミット固有値に関する種々の分布関数である。我々はシュミット固有値の1体分布関数と最大シュミット固有値の分布関数について解析的な公式を理論予想として導出することに成功した。1体分布関数の理論公式を計算する主要な道具は我々が定義したシンプレックス型セルバーク-金子積分を表す多変数超幾何関数である。最大固有値の理論公式を計算する主要な道具は多変数超幾何関数の特別な場合から導かれるパンルヴェ系のタウ関数である。

研究成果の学術的意義や社会的意義

高い社会的関心を持つ量子計算と量子通信を可能にする本質的な資源は量子エンタングルメントである。その量子エンタングルメントの持つ統計的普遍性を解析計算と数値実験により明らかにした。統計的普遍性は固定跡集団という乱雑行列モデルから導かれる。量子エンタングルメントを特徴付ける最も重要な物理量として、シュミット固有値の1体分布関数と最大固有値の分布関数が厳密に解析計算された。その計算では多変数超幾何関数の特別な場合からパンルヴェ関数が直接現れることが新たに発見されて、計算を可能にする鍵として利用された。解析計算による数値的予言は蹴られたコマモデルにおける数値実験における測定と極めて高い精度での一致を見た。

研究成果の概要(英文)：In coupled quantum system, quantum entanglement generated by its dynamical time-evolution exhibits a strong universality irrespective of details of the system when the dynamics is strongly chaotic. The characteristic quantities to measure quantum entanglement are various distribution functions concerning Schmidt eigenvalues. We have succeeded in deriving analytical formulae for the one-body distribution function and the distribution function of largest Schmidt eigenvalue as theoretical predictions. The main tool to calculate the theoretical formula for the one-body distribution is a multivariate hypergeometric function that represents the simplex type Selberg-Kaneko integral, which is introduced by us. The main tool to calculate the theoretical formula for the distribution of largest Schmidt eigenvalue is a Painleve tau function that is derived from a particular case of the multivariate hypergeometric function.

研究分野：非線形物理学

キーワード：量子エンタングルメント 量子カオス 乱雑行列理論 多変数超幾何関数 セルバーク-金子積分 パンルヴェ関数 固定跡アンサンブル

1. 研究開始当初の背景

結合量子系における部分系の間で動力学的により生成される量子エンタングルメントを深く理解することは、統計力学の基礎、量子力学の観測の問題、量子計算理論にとって重要な課題の一つである。特に、量子エンタングルメントの統計的性質を定量化すること、定量的な理論予想を提出することが求められていた。一方で、現代数学の一分野で発展して来た多変数超幾何関数の理論は物理学での重要な応用を未だ見出せないでいた。

2. 研究の目的

量子エンタングルメントの統計的性質はシュミット固有値の種々の分布関数により計量される。どれが重要な分布関数を特定して、その理論予想を計算する。この計算は現代数学のテーマでもある多変数超幾何関数を利用することにより可能になる。これは物理学の視点から多変数超幾何関数の理論への新しい発展をもたらす。加えて、適切なモデルで数値実験を行い、理論予想と比較する。

3. 研究の方法

(1) 量子エンタングルメントの統計的性質の定量的な理論予想のためには、まず、必要な多変数超幾何関数の理論を整備する必要がある。そのために、セルバーグ-金子積分の理論を拡張する。

(2) 比較のための数値実験のモデルとして、結合蹴られたこまモデルを利用する。この系に対して、量子力学による時間発展の大規模数値シミュレーションを行い、量子エンタングルメントを測定する。

(3) 量子エンタングルメントに関する種々の分布関数について、理論予想と数値実験の結果を比較する。結合系の動力学的性質(規則的か、カオス的か)を敏感に反映する分布関数はどれか、そして、それがどのように反映されるのかを明らかにする。

4. 研究成果

(1) 結合量子系におけるシュミット固有値の1体分布関数と最大固有値の分布関数が量子エンタングルメントを効果的に定量化する。この2つの分布関数に系の動力学的性質が敏感に反映されることを以下で説明する。

(2) シュミット固有値の1体分布関数と最大固有値の理論分布関数は多変数超幾何関数の理論を知られていた範囲を超えて拡張することにより初めて可能になる。多変数超幾何関数の積分表示であるセルバーグ-金子積分に新しい2つのタイプである合流型とシンプレックス型を導入した。そして、新しい2つのタイプのセルバーグ-金子積分が多変数超幾何関数のジャック多項式による級数展開どのように結びつくかを明らかにした。

(3) 理論分布関数の計算では、乱雑行列のためのアンサンブルとして固定跡アンサンブルが用いられた。固定跡アンサンブルは量

子系での確率の保存を完全に満足するアンサンブルである。従来、量子エンタングルメントを記述するためには計算が容易になるラゲールアンサンブルが用いられていた。ラゲールアンサンブルでは確率の保存が平均でしか満たされない。以下で説明する数値実験との比較の結果、数値実験と驚異的な精度で定量的に一致する理論予想を得るためには、ラゲールアンサンブルではなくて、固定跡アンサンブルを採用することが本質的であることが判明した。物理学では対称性と保存則が完全に尊重されなければならないことがここにも現れたわけである。

(4) 固定跡アンサンブルの元で拡張された多変数超幾何関数の理論を用いて、量子エンタングルメントの統計性を記述するシュミット固有値の1体分布関数と最大固有値の分布関数に対する解析的公式が我々により初めて計算された。

(5) 1体分布関数と最大固有値の分布関数の理論予想が、結合蹴られたこまモデルにおける大規模数値実験により計測された2つの分布関数と比較された。比較の結果、系の動力学的性質が規則的か、カオス的かは2つの分布関数に敏感に反映されることが明らかになった。固定跡アンサンブルによる理論予想が数値実験の結果と合致するためには、系の動力学的性質がカオス的であることが必要である。系の位相空間にある不変トーラスに由来する規則性が動力学的に残っていれば、実測される分布関数は固定跡アンサンブルによる理論分布関数からずれる。さらに、ずれの程度から、動力学的にどの程度の規則性が残っているのかが逆に推定できる。

(6) 結合量子系の動力学的性質が十分にカオス的である場合には、実測されたシュミット固有値の1体分布関数と最大固有値の分布関数は、固定跡アンサンブルと多変数超幾何関数による2つの理論分布関数と驚異的な精度で一致する。肉眼でグラフを見ると両者の差異は全く見出せないほどである。これは、十分に強いカオス的な動力学的性質により結合量子系に生成される量子エンタングルメントが系の詳細によらない強い普遍性を持ち、その普遍性が固定跡アンサンブルにより捉えられることを意味する。

(7) 固定跡アンサンブルによるシュミット固有値の分布関数の理論予想は、測定データのサンプルの有限性に由来する統計揺らぎの精度まで、強いカオス的な動力学的性質を持つ結合量子系の数値実験において測定された分布関数に厳密に一致することが発見された。将来、理論予想が本物の実験により測定されたシュミット固有値の分布関数と比較されるときが到来するだろう。本物の実験との比較は新しい量子力学の根本テストになる。我々の研究により、「動力学的に生成される量子エンタングルメントの統計を通じての量子力学の根本的テスト」と言う新しい量子力学の根本的テストが見つかったのである。

(8) 最大固有値の理論分布関数を計算するための多変数超幾何関数の調査によって、多変数超幾何関数の特別な場合から非線形特殊関数であるパウルヴェ系のタウ関数が直接出現することが発見された。これは数学において今まで別々に研究されてきた多変数超幾何関数とパウルヴェ関数という2つの分野が実は深く繋がっていることを意味する。数学におけるこの新しいつながりは我々による物理学の研究を通じて明らかになった。このつながりは下記の雑誌論文(10)において説明されている。

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12件)

原著論文(査読付き、謝辞あり)

(1) M.Kubotani, S.Adachi and M.Toda, "Measuring dynamical randomness of quantum chaos by statistics of Schmidt eigenvalues", *Physical Review E* 87(2013)062921(16pages)
doi:10.1103/PhysRevE.87.062921

(2) Mechanism and Experimental Observability of Global Switching Between Reactive and Nonreactive Coordinates at High Total Energies, *Physical Review Letters*, 115 093003(5 pages), 2015, H. Teramoto, M.Toda, H.Kono, M.Takahashi, T.Komatsuzaki,
<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.115.093003>

(3) Breakdown Mechanisms of Normally Hyperbolic Invariant Manifolds in terms of unstable periodic orbits and homoclinic/heteroclinic orbits in Hamiltonian Systems, *Nonlinearity*, 28 pp.2677-2698, 2015 H. Teramoto, M.Toda, T.Komatsuzaki
<http://dx.doi.org/10.1088/09517715/28/8/2677>

(4) A new method to improve validity range of Lie canonical perturbation theory with a central focus on a concept of non-blow-up region, Hiroshi Teramoto, Mikito Toda, Tamiki Komatsuzaki *Theoretical Chemistry Account*, (2014) Vol.133.1571(15pages) 10.1007/s00214-014-1571-9

(5) "Spatio-temporal hierarchy in the dynamics of a minimalist protein model", Y. Matsunaga, A.Baba, C.Lie, J.E. Straub, M. Toda, T.Komatsuzaki, R.S.Berry, *J. Chem. Phys.* 139, 215101 (13 pages) (2013)
<http://dx.doi.org/10.1063/1.4834415>

(6) "Fluctuations of healthy and unhealthy heartbeat intervals", BL.Lan, M. Toda, *Europhysics Lett.* 102, 18002 (6 pages) (2013), <http://dx.doi.org/10.1209/0295-5075/102/18002>
国際会議 proceeding (査読付き、謝辞あり)

(7) A coarse graining method to extract cooperative modes of water molecules, *Advances in Science, Technology and Environmentology*,

special issue Vol.11, pp.7-11, 2015, H. Teramoto, M.Toda, T.Komatsuzaki DOI は無し

(8) A network structure of emotional interactions in an electronic bulletin board, *Proceeding of Social Modeling and Simulations + Econophysics Colloquium*, Springer, pp.311-322, 2015 H.Adachi, M.Toda
10.1007/978-3-319-20591-5_28 オープンアクセス

(9) Understandings of Chemical Reaction Dynamics in terms of Dynamical System Theory, *Proceeding of Computational Chemistry (CC) Symposium in ICCMSE 2015*, AIP Conference Proc., Vol. 1702 090042 (4 pages), 2015, H. Teramoto, M.Toda, T.Komatsuzaki
<http://dx.doi.org/10.1063/1.4938850>

(10) S.Adachi, H.Kubotani and M.Toda, "Exact distribution of largest Schmidt eigenvalue for quantum entanglement", *J.Phys.A:Math.Theor.*52(2019)4 05304(12 pages)

解説(査読付き、招待あり、謝辞あり)

(11) タンパク質分子の構造ダイナミクス: ウェーブレット変換による解析 統計数理、6 2 巻、第2号、203-220 ページ(2014年) 鎌田真由美、戸田幹人 DOI はなし、オープンアクセス

会議報告(査読なし、謝辞あり)

(12) 大自由度系の集団運動抽出に向けた問題提起: 化学反応力学の観点から、数理解析研究所講究録、1827, pp.154-170, 2013 寺本 央、戸田幹人、小松崎民樹

[学会発表](計50件)

国際学会(招待講演)

(1) Dynamical Reaction Theory Beyond Conventional Statistical Reaction Theory, Workshop on "Theory of Gas Phase Scattering and Reactivity for Astrophysics", Max-Planck Institute for Extraterrestrial Physics, Munchen, Germany, 2015/11/27, M. Toda

(2) Geometry and Dynamics in systems of more than 2 dof., Workshop on "Geometry of Chemical Reaction Dynamics in Gas and Condensed Phases", Telluride Science Research Center, 2015/08/05, Telluride, Colorado, USA, M.Toda

(3) Dynamical reaction theory from micro to macro through mesoscopic levels, R. Stephen Berry Tribute Symposium, Telluride Science Research Center, 2015/06/25, Telluride, Colorado, USA, M.Toda

(4) Time-frequency approach to molecular

dynamics simulation of proteins, Workshop on "The Complexity of Dynamics and Kinetics from Single Molecules to Cells", Telluride Science Research Center、 2015/06/18, Telluride, Colorado, USA, M.Toda

(5)Time series analysis using wavelets to extract collective motion of proteins, Spectroscopy and Dynamics of Molecules and Clusters 2015 (SDMC2015), 22/Feb/2015, Nainital, India, Mikito Toda

(6)Reaction Coordinate Switching Mechanism, on the Possibility of Its Experimental Verification and Its Quantum Manifestation, The 10th AIMS Conference on Dynamical Systems, Differential Equations and Applications, 8/July/2014, Madrid, Spain, Hiroshi Teramoto, Mikito Toda and Tamiki Komatsuzaki

(7)Time Series Analysis using Wavelet To Extract Collective Behavior of Proteins Let's face chaos through nonlinear science, 4th July 2014, Maribor, Slovenia Mikito Toda

(8)Dimensional reduction for molecular dynamics of proteins、 Workshop on Lagrangian Coherent Structures and Dynamical Systems, 2014/03/06, Mikito Toda

(9)Analysis of motion features using wavelet for molecular dynamics simulation of proteins、 Telluride Summer workshop "The Complexity of Dynamics and Kinetics in Many Dimensions ", 2013/06/17, Telluride, Colorado, USA, Mikito Toda, Mayumi Kamada

(10)Future prospects of the dynamical theory of reactions、 Telluride workshop "Geometry of Chemical Reaction Dynamics in Gas and Condensed Phases", 2013/06/14, Telluride, Colorado, USA, Mikito Toda

(11)Understandings of Chemical Reaction Dynamics in terms of Dynamical System Theory, Computational Chemistry (CC) Symposium in ICCMSE 2015, 3/20/2015, invited, Athens, Greece, Hiroshi Teramoto, Mikito Toda and Tamiki Komatsuzaki

(12)Wavelet analysis of multi-dimensional dynamical systems, Japan-Slovenia Seminar on Nonlinear Science (Kansai 2014), 29th October 2014, Nara women's university, M. Kushida, M. Toda, H. Fujisaki,

(13)Time series analysis of the protein SNase : its dynamics and function Japan-Slovenia Seminar on Nonlinear Science (Kansai 2014), 29th October 2014, Nara women's university Kana Fuji, Mikito Toda

国際学会 (ポスター発表)

(14)A network structure of emotional interactions in an electronic bulletin board Social Modeling and Simulations + Econophysics Colloquium 2014, 4th November, 2014, 神戸ポートアイランドセンター, Haruka Adachi, Mikito Toda

国内研究会 (招待講演)

(15)大自由度力学系の特徴集出, ワークショップ「大自由度分子系における化学反応機序の理解と制御」、北海道大学, 2015/11/01, 戸田幹人

(16)大自由度力学系の集団運動, 研究会「非線形現象の捉え方」福岡工業大学セミナーハウス, 由布院、大分, 2015/10/10, 戸田幹人

(17)大自由度系における振動エネルギー移動の解析, Workshop on Dynamical Systems and Computation 2015、2015年3月5日、北海道大学, 戸田幹人

(18)大自由度力学系に対する時系列解析: ウェーブレット変換を用いた試み 環瀬戸内応用数理研究部会シンポジウム、2014年12月5日, 戸田幹人

(19)生体分子の分子動力学で探る集団運動、京都大学数理解析研究所研究集会「ランダム力学系理論とその応用」、2014/02/21 戸田幹人

国内研究会発表

(20)非線形動力学に依拠した情報発掘法の開拓と生体分子への応用 第5回物質・デバイス領域共同研究拠点報告会, 2015/04/20、九州大学伊都キャンパス、戸田幹人、ポスター発表

(21)SNS における感情の伝播現象に関する研究 ~ 投稿の参照関係に基づく感情語ネッ

トワークの特性～(口頭)第6回テキストマイニング・シンポジウム、2015年2月5日、ティーオージー会議室(大阪・梅田)、足立遥、戸田幹人

(22)SNSにおける感情表現とその相互作用関係の抽出(口頭)第220回自然言語処理研究会(情報処理学会)、2015年1月19日、九州大学、足立遥、戸田幹人

(23)Chemical Ratchet: a possible mechanism to break the detailed balance, Workshop "What kinds of dynamical feature can we extract from data?", 27/August/2014, ニセコ, Mikito Toda (口頭発表) 学会発表

(24)結合振動子系における多様な動的現象の解析 3、日本物理学会年会、東北学院大学、2016/03/20、ポスター発表 森田紗代、戸田幹人

(25)Fermi-Pasta-Ulam 結合振動子系における動的緩和現象の解析 4、日本物理学会年会、東北学院大学、2016/03/20、ポスター発表 神戸舞、富士香奈、戸田幹人

(26)Fermi-Pasta-Ulam 結合振動子系における動的緩和現象の解析 3、日本物理学会秋季大会、関西大学、2015/09/17、ポスター発表 神戸舞、富士香奈、戸田幹人

(27)特異点論を用いた非断熱交差の安定性と分岐の解析、日本物理学会秋季大会、関西大学、2015/09/16、口頭発表 寺本央、戸田幹人、小松崎民樹

(28)A Global Dynamical Switching of a Reaction Coordinate and its Experimental Observability、第31回化学反応討論会、北海道大学、2015/06/03、口頭発表 寺本央、戸田幹人、小松崎民樹

(29)Fermi-Pasta-Ulam 結合振動子系における動的緩和現象の解析 2 日本物理学会年会、2015年3月22日、早稲田大学(ポスター) 神戸舞、戸田幹人

(30)非平衡分子動力学を用いた生体分子内のエネルギー移動の解析 日本物理学会年会、

2015年3月21日、早稲田大学(口頭発表) 藤崎弘士、古田忠臣、戸田幹人(31)大自由度力学系における振動エネルギー移動の解析、日本物理学会年会、2015年3月21日、早稲田大学(口頭発表) 榎田茉実、富士香奈、藤崎弘士、戸田幹人 (32)結合振動子系における多様な動的現象の解析 2、日本物理学会年会、2015年3月21日、早稲田大学(ポスター) 森田紗代、戸田幹人

(33)SNSの発言間における参照関係と感情表現のネットワーク、日本物理学会年会、2015年3月21日、早稲田大学(ポスター) 足立遥、戸田幹人

(34)正準変換摂動理論の有効領域の拡張法とそれによる振動子間の非線形共鳴によるエネルギー移動の解明、日本物理学会、中部大学、9/Sep/2014(口頭発表) 寺本央、戸田幹人、小松崎民樹

(35)Fermi-Pasta-Ulam 結合振動子系における動的緩和現象の解析、日本物理学会、中部大学、8/Sep/2014(ポスター) 神戸舞、戸田幹人

(36)結合振動子系における多様な動的現象の解析、日本物理学会、中部大学、8/Sep/2014(ポスター) 森田紗代、戸田幹人

(37)大自由度力学系におけるエネルギー移動の解析 3、日本物理学会、中部大学、8/Sep/2014(ポスター) 榎田茉実、富士香奈、戸田幹人、藤崎弘士

(38)生体分子と水の過渡的な集団運動の抽出(口頭発表)第17回理論化学討論会、名古屋大学 ES 総合館、22/May/2014 寺本央、戸田幹人、小松崎民樹

(39)生体分子と水の過渡的な協同運動の抽出、日本物理学会年会、2014/03/30、口頭発表、東海大学、寺本央、戸田幹人、小松崎民樹 (40)核酸分解酵素 Staphylococcal nuclease の分子動力学に対する時系列解析 活性低下における水、リガンド、ループの関係性、日本物理学会年会、2014/03/30、口頭発表 東海大

学、富士香奈、藤崎弘士、古田忠臣、芝るみ、山口真理子、戸田幹人

(41)シグナル伝達に關与する PDZ ドメインの分子動力学データに対する時系列解析 4、日本物理学会年会、2014/03/30、口頭発表、東海大学、岸田直子、戸田幹人、藤崎弘士

(42)大自由度力学系におけるエネルギー移動の解析 2、日本物理学会年会、2014/03/30、ポスター発表、東海大学、櫛田菜実、富士香奈、戸田幹人

(43)タンパク質シニョリンの構造変化パスサンプリング II、日本物理学会年会、2014/03/27、口頭発表、東海大学、藤崎弘士、富士香奈、戸田幹人

(44)The analysis of energy transfer in Chaotic Dynamical System Biophysical Society of Japan、2013/10/30、ポスター発表、名古屋大学、M. Kushida, K. Fuji, M. Toda

(45)Time-series analysis of molecular dynamics: Conformational change and dynamics of collective behavior、Biophysical Society of Japan、2013/10/28、ポスター発表、名古屋大学、K. Fuji, M. Sekijima, H. Fujisaki, M. Toda

(46)生体分子の分子動力学に対する時系列解析 集団運動の揺らぎと構造変化の關係を探索 IV、日本物理学会、2013/09/28、口頭発表、徳島大学、富士香奈、関嶋政和、戸田幹人、藤崎弘士

(47)タンパク質シニョリンの構造変化パスサンプリング、日本物理学会、2013/09/28、口頭発表、徳島大学、藤崎弘士、富士香奈、戸田幹人

(48)シグナル伝達に關与する PDZ ドメインの分子動力学に対する時系列解析 3、日本物理学会、2013/09/28、ポスター発表、徳島大学、岸田直子、戸田幹人、藤崎弘士

(49)大自由度力学系におけるエネルギー移動の解析、日本物理学会、2013/09/28、ポスター発表、徳島大学、櫛田菜実、富士香奈、戸田幹人

(50)生体分子の分子動力学データに対するウェーブレット変換を用いた時系列解析、生物物理学会北海道支部講演会、2013/09/19 戸田幹人、鎌田真由美

〔その他〕 プレスリリース

(1)Mechanism and Experimental Observability of Global Switching Between Reactive and Nonreactive Coordinates at High Total Energies, Physical Review Letters, 115 093003(5 pages), 2015, H.Teramoto, M.Toda, H.Kono, M.Takahashi,T.Komatsuzaki に関して、PRLのエディターの勧めにより、プレスリリースを行い(北大と東北大)、日経産業新聞、大学ジャーナルオンライン、日経バイオオンラインで報道された。

〔その他〕
ホームページ等

6. 研究組織

(1)研究代表者

足立聡 (ADACHI, Satoshi)
東京工業大学・大学院理工学研究科(理学系)・助教
研究者番号：90211698

(2)研究分担者

窪谷浩人 (KUBOTANI, Hiroto)
神奈川大学・工学部・教授
研究者番号：60281143

(3)研究分担者

戸田幹人 (TODA, Mikito)
奈良女子大学・自然科学系・准教授
研究者番号：70197896