様　式　C－19、F－19－1、Z－19　（共通）

科研費 KAKENHI

科学研究費助成事業　　研究成果報告書

平成 ２９ 年　 ６ 月 ２６ 日現在

機関番号：１４３０１
研究種目：基盤研究(C)（一般）
研究期間：2014～2016
課題番号：２６４０００６８

研究課題名（和文）幾何学的力学系理論の展開と量子系のトポロジー

研究課題名（英文）Progress in geometric mechanics and topological study of quantum systems

研究代表者
岩井　敏洋（Iwai, Toshihiro）

京都大学・情報学研究科・名誉教授

研究者番号：１００２１６３５

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費）　　2,300,000円

研究成果の概要（和文）：幾何学的力学系理論の応用として、グラスマン多様体上の最適化問題とその応用を研究した。量子系のトポロジーでは、スピン・軌道角運動量相互作用を一般化したハミルトニアンを取り扱った。量子系のハミルトニアンのパラメータ変化に伴うエネルギーバンド構造の変化に対応して、半量子系では、固有空間バンドルのチャーン数の変化が起こる。その変化は、特異点周りでの線形化ハミルトニアンへのホモトピー変形により、ある種の写像度で計ることができる。逆に、半量子系の線形化ハミルトニアンを量子化して得られるディラック作用素の境界値問題を解くことで、パラメータ変化に伴ってエネルギーバンド構造に変化がみられることを示した。

研究成果の概要（英文）：Geomtric machanics is applied to optimization problems on Grassmann manifolds, which are realted to eigenvalue problems for real symmetric matrices. Topological study is made on Hamltonians which describe generalized spin-orbital angular momentum coupling. In accordance with the band rearrangement for the quatum Hamiltonian against a parameter, change in Chern number of the eigen-line bundle is observed in the corresponding semi-quantum system. The change is shown to be counted by means of the respective mapping degrees assigned to singular points at which the Hamiltonian is linearized through homotopy deformation. Conversely, the linearized simi-quantum Hamiltonian is quantized to give a Dirac operator, for which the eigenvalue problem can be solved under boundary conditions to exhibit energy band rearrangement against a parameter. In practice, 2D Dirac equations have been solved under the APS (Atiyah-Patodi-Singer) and the chiral bag boundary conditions.

研究分野：幾何学的力学系理論

キーワード：多様体上の最適化問題　エネルギーバンド　チャーン数　ディラック方程式　境界条件　スペクトル流

１．研究開始当初の背景

最適化の理論は一見力学とは無関係なように見えるが、実は幾何学的力学系理論とは方法論的には密接につながっている。最適化の理論では多様体上のある関数の最大化問題を扱う。特に、グラスマン多様体や、スティーフェル多様体上のレイレー商の最大化問題は行列の固有値や特異値の計算と密接に関係している。この問題をレイレー商の勾配流の問題と考えると力学系の範疇の問題となる。しかし、最適化の問題では計算の効率が問題になるので、勾配ベクトルの零点に対するニュートン法という手法が応用され、そこではヘッシアンの計算が欠かせない。計算機上で実行可能な仕方で、グラスマン多様体やスティーフェル多様体においてある関数のヘッシアンを求めるには、グラスマン多様体やスティーフェル多様体を行列空間の部分多様体として実現し、局所座標系表示を回避して行列変数でヘッシアンを書き下せば計算機のプログラムに載せることができる。この際平行移動や測地線といったリーマン多様体上の内在的概念が有効に働く。それ以前にはこのような多様体上の内在的な概念を最適化の計算に活用するための方法論が未発達であった。

　また、量子系のトポロジーの話題では、量子系のエネルギーバンド構造の変化に対応して、半量子系の固有空間バンドルのチャーン数の変化が対応するということは具体例で知られていたが、逆に半量子系のチャーン数の変化にはエネルギーバンド構造に変化が伴うかということは明確ではなかった。もう少し詳しく説明する。量子物理学では伝統的に量子系の定性的性質を議論するのに、エネルギーレベル（固有値）の密度に応じて、早い変数と遅い変数とを導入してモデルとなるハミルトン作用素を構成するという手法がとられてきた。遅い変数はエネルギー密度の濃い状態を表す変数として古典力学的に扱い、早い変数はエネルギー密度の低い離散的な状態を表す変数として量子力学的に取扱うのである。この意味でのモデルハミルトニアンをもつ系を半量子系と呼ぶ。振動と回転の問題ならば、典型的には振動状態は量子力学的に、回転状態は古典力学的に扱う。この場合、モデルハミルトニアンは２次元球面上で定義されたエルミート行列の形をとる。このハミルトニアンが適当なパラメータに依存していれば、そのパラメータの変化に応じて固有値が変化する。パラメータが通常値なら固有値は縮退しないので、球面の各点に固有空間を付与するという仕方で複素直線バンドルの直和が構成できる。もしパラメータが変化して特異値を取れば固有値に縮退が起きバンドルの直和構造は壊れる。さらにパラメータが変化して通常値に戻れば再び複素直線バンドルの直和が構成されるが、以前のものとは異なっているのが一般的である。これに伴って、複素直線バンドルの位相不変量であるチャーン数が変化する。具体的には、回転群の有限部分群である３次の２面体群の作用のもとで不変な２次のエルミート行列の形で書けるハミルトニアンに対して、パラメータ空間としてのトーラスが、いくつかの領域に分割されて、その各領域ではチャーン数が一定で、領域を移るとチャーン数が変化するということは計算で明かになっていた。実際、正の固有値に対応する複素直線バンドルについて、パラメータ空間の分割とそれに対応するチャーン数についてはすでに計算を終えてそれを表示する図表を得ていた。しかし３次のエルミート行列の形で半量子系ハミルトニアンが与えられると、固有値や固有ベクトルを求めることが途端に困難になる。そのような場合にチャーン数を求めるための処方はまだ開発されていなかった。また、それが求まったとしても、半量子系でのチャーン数の変化に対応して、量子系で実際にバンド構造の変化が起きているのかは明確ではなかった。

２．研究の目的

幾何学的力学系理論の応用として、共変微分、測地線、ヘッシアン等の多様体の内在的な概念を利用して、最適化問題における計算アルゴリズムの精度を高める。特に、グラスマン多様体上で定式化される対称行列の固有値問題では、固有値の縮退が起こる場合の臨界点集合を明らかにするとともに、その時の点列の収束を明らかにする。

　量子系のトポロジーの研究では、３次以上のエルミート行列の形で半量子系ハミルトニアンが与えられる場合にも有効な、固有値に対応する複素直線バンドルのチャーン数を求めるための処方を開発する。さらに、チャーン数の変化とバンド構造の変化との対応を基本的な形で明確にする。言い換えると、一般的な対応は、要素となる対応の合成で捉えることができることを示す。

３．研究の方法

共変微分等の概念は多様体上で内在的に定義されてはいるが、そのままでは計算機上の計算アルゴリズムには適さないので、問題としている多様体を部分多様体として含む空間での微分等の計算を共変微分に結び付ける工夫をする。具体的には、グラスマン多様体を行列空間の部分空間として、グラスマン多様体上の共変微分を行列空間の射影作用素を利用して書き表すことや、ヘッシアンを計算するために、測地線に沿っての２階の方向微分を行列変数で実行することが有効である。

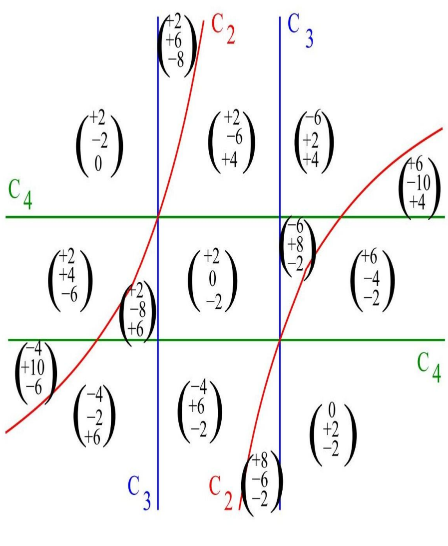
チャーン数の変化とエネルギーバンドの変化の対応を一般的に研究するためには、まず３次以上のエルミート行列の形のハミルトニアンに対して、チャーン数の計算処方を見出す必要がある。キーとなる考え方は、チャーン数そのものを計算するのではなく、チャーン数の変化量を計算するというものである。固有値の縮退が起こるのは、パラメータ変化に伴って、特異的なパラメータ値の時に２つの相異なる固有値が縮退し、その他の固有値はこの間縮退を起こさないというのが一般的である。この場合、３重以上の縮退は２重縮退の複合だと考えるのである。すると、縮退を起こした固有値に対応する固有空間に着目して、ハミルトニアンをその空間に制限し、そこで起こる変化を観察するという手法が考えられる。この場合、実際上のチャーン数の計算は、局所的に定義された固有ベクトルが定義されなくなる点、あるいは不連続となる点でのある種のベクトル場の指数、あるいはその点周りの円周からの写像度で計算されるという事実が有効に働く。すると、特異パラメータ値と固有値の縮退点（球面上の関数としての固有値が縮退する点、以後この点も特異点という）で、ハミルトニアンを線形化して、それを利用して、チャーン数の変化量を求めることができるようになる。（ここで、線形化ハミルトニアンは、基礎の多様体の特異点における接空間で定義される。）実際、チャーン数の変化量は整数値であるので、それを求めるための積分はホモトピー変形で不変であるからである。さらに、ハミルトニアンが正８面体群のような有限群で不変な場合、その群の軌道に含まれる要素数だけチャーン数の変化量が倍加される。

このように、半量子系に対して、ハミルトニアンのサイズに拘らずに、チャーン数の変化を求めるための線形化の手法が確立されるので、これに対応して、量子系で起こるはずのエネルギーバンドの再編についても線形化の手法で研究することができる。線形の半量子系はハミルトニアンを量子化すると、ディラック作用素が得られる。ここで最も基本的なのは空間２次元のディラック作用素である。これは物理的には自由粒子のハミルトニアンなので、境界条件がなければ連続スペクトルしか現れない。本研究ではエネルギー固有値の、パラメータ変化に伴う変化に興味があるので、適当な有界領域をとって、境界条件を課す必要がある。実際には円板上で APS (Atiyah-Patodi-Singer) 境界条件とカイラルバッグ境界条件を用いた。通常、ディラック作用素の位相数学的な研究では、質量パラメータが零の場合を取り扱うのであるが、本研究では、質量パラメータの変化に伴うエネルギー固有値の変化に興味がある。この点が本研究の特長である。

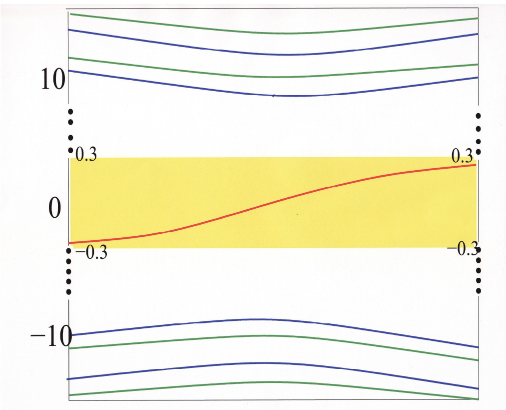
４．研究成果

幾何学的力学系理論の応用として、対称行列の固有値問題、特に対称行列の固有値のうち大きい方から何個かのものとその固有ベクトルを求めるという問題をグラスマン多様体上の最適化問題として定式化し、幾何学的概念を活用して、解法のためのアルゴリズムを見出した。その結果は驚くべきものである。幾何学的概念を活用せずに単に誤差を少なくするような技法に比べて、精度が格段に上がったのである。また、固有値が縮退するときの臨界点集合が多重度に応じた次元のグラスマン多様体に微分同相な部分多様体となることが証明された。この結果は、固有値問題の単なる計算技法では決して見つからないものである。

量子系のトポロジーでは、線形化の手法を正８面体群の作用で不変な３次のエルミート行列の形で２つのパラメータをもつハミルトニアンに適用した。線形化の手法が有効であることを証明し、実際にチャーン数の変化と求めた。それだけでは全体図は求まらないが、ある特定の領域でのチャーン数を計算すると、あとは領域をまたぐ時のチャーン数の変化から以下の全体図が見出せた。この図中の３成分のベクトルは、固有値の大きい方から順にそれに付随する複素直線バンドルのチャーン数を並べてできたものである。この図からも見て取れるが、チャーン数の変化量は正負の符号を除いて、対称性群である正８面体群の位数 24 の約数、すなわち、特異点の軌道の位数になっている。Cn は特異点での等方部分群を表す。また、上述のある特定の領域というのはこの場合パラメータ平面の原点を含む領域である。さらに、このようなチャーン数の変化量は、以前に２次のエルミート行列形のハミルトニアンに対して見出した図表においても同様に成り立つ。実際、正負の符号を除いて、チャーン数の変化量は３次２面体群の位数６の約数となる。

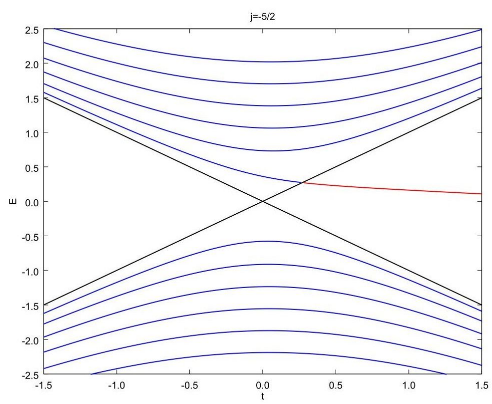


すでに見たように、特異点におけるチャーン数の変化量の基本は±１である。逆に、半量子系の線形化ハミルトニアンを量子化して得られるディラック作用素においてバンド構造の変化の基本量も±１となるだろうか。空間２次元のディラック方程式の円板領域での境界値問題を解くことで、それを示すことができる。すなわち、エネルギーバンドの変化をスペクトル流で評価すると、チャーン数の変化量と対応させることができる。本研究では、APS 境界条件と、カイラルバッグ境界条件を用いてそれを示した。下記の図は APS 境界条件のもとパラメータの関数としてのエネルギー固有値の変化を表している。ここでは、スピン・軌道角運動量の符号が負のものしか載せていないが、その符号が正のものは赤線で描かれた曲線の傾きが逆になる。こうして、確かにチャーン数の変化量とスペクトル流が対応していることが分かる。スペクトル流に関与しないエネルギー固有値はバルクエネルギー状態、スペクトル流に関与するエ



ネルギー固有値はエッジエネルギー状態を表す。バルクエネルギーの固有状態の動径方向の関数はベッセル関数で表されるが、エッジエネルギーの固有状態の動径方向の関数は変形ベッセル関数で表される。

これに対して、カイラルバッグ境界条件を用いた時のエネルギー固有値のパラメータ変化の様子は少し異なったものになる。その理由は、APS とカイラルバッグでは、境



界条件の許す対称性が異なるからである。その図は左欄下に示されている。スピン・軌道角運動量が負であるようなエネグギーバンド図だけを示した。スピン・軌道角運動量が正のものは赤線で示したエネルギーレベルが、対照的に下の方のバンドから分かれ出ることになる。ここでも、チャーン数の変化量±１には、スペクトル流が対応することが分かる。しかし、ここではスペクトル流の定義を若干変更する必要がある。エネルギーがゼロの値を必ずしも通過しないからである。ここでも、バルク状態の動径方向の固有関数はベッセル関数で、エッジ状態の動径方向の固有関数は変形ベッセル関数で記述される。

さらに、スペクトル流の定義を拡張して、多バンド構造で固有値の多重縮退が起こる場合にも適用可能なようにすると、量子系のスペクトル流と半量子系のチャーン数の変化とが見事に対応することを、スピン・軌道角運動量結合のハミルトニアンを拡張したハミルトニアン作用素に対して示した。さらに、半量子系からそれに対応する古典ハミルトン系が自然に定義でき、そのエネルギー・運動量写像には、モノドロミーが現れ、エネルギー・運動量写像のボーア・ゾンマーフェルト流量子化を行うと、パラメータ変化に対応してバンド構造の変化が見られ、定性的には量子系でのそれに一致することを示した。

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７件）

① H. Sato and T. Iwai, Optimization algorithm on the Grassmann manifolds with application to matrix eigenvalue problem, Japan J. Indust. Appl. Math.,査読有, 31 巻, 2014, 335-400, DOI:10.1007/s13160-014-0141-9,

② T. Iwai and B. Zhilinskii, Topological phase transition in the vibration-rotation dynamics of an isolated molecule, Theor Chem Acc.,査読有, 133 巻, 2014, 1501 (13 pages), DOI:10.1007/s00214-014-1501-x,

③ T. Iwai and B. Zhilinskii, Local description of band rearrangements-Comparison of semi-quantum and full quantum approach, Acta Appl Math., 査読有, 137 巻, 2015, 97-121, DOI: 10.1007/s10440-014-9992-y,

④ T. Iwai and B. Zhilinskii, Band rearrangement through the 2D Dirac equation: Comparing the APS and chiral bag boundary conditions, Indag. Math., 査読有, 27 巻, 2016, 1081-1106, dx.doi.org/10.1016/j.indag.2015.11.010,

⑤ T. Iwai and B. Zhilinskii, Change in energy eigenvalues against parameters,

Trends in Mathematics, 査読有,Geometric methods in Physics, 2016, 233-253,
DOI:10.1007/978-3-319-31756-4,
⑥ T. Iwai and B. Zhilinskii, Chern number modification in crossing the boundary between different band structures: Three-band models with cubic symmetry, Reviews in Mathematical Physics, 2017, 査読有, 29 巻, 1750004 (91pages),
DOI: 10.1142/S0129055X17500040,
⑦ G. Dohnt, T. Iwai, and B. Zhilinskii, Topological phase transition in a molecular Hamiltonian with symmetry and pseudo-symmetry, studied through quantum, semi-quantum and classical models, SIGMA, 査読有, 掲載予定,
airXiv: 1703.04472,

〔学会発表〕(計 6 件)
① 岩井敏洋, Control systems -- the falling cat and the inverted pendulum, Geometry in Nara – Around subRiemannian geometries, 2014.8.19-21, 奈良女子大学,
② 岩井敏洋, パラメータ変化に伴うエネルギーバンドの再編成, 沼津研究会, 2015.3.9-11, 沼津高専,
③ T. Iwai, Band rearrangement through Dirac equations with boundary conditions,
Dynamics and Geometry, Leiden, The Netherland, 2015.6.16.
④ T. Iwai, Change in eigenvalues against parameters, Workshop on Geometric Methods in Physics, 2016.6.29, Bialowieza, Poland,
⑤ T. Iwai, Change in eigenvalues against parameters, Geometric and singular analysis, 2016.3.9, Potsdam, Germany,
⑥ 岩井敏洋, From quantum mechanics to classical mechanics and then quantization on a simple model, 量子化の幾何学 2016, 2016.12.9-10, 早稲田大学.

〔図書〕(計 0 件)

〔産業財産権〕
○出願状況(計 0 件)
○取得状況(計 0 件)

〔その他〕
ホームページ等

6. 研究組織
(1)研究代表者
岩井敏洋 (IWAI, Toshihiro)
京都大学・大学院情報学研究科・名誉教授
研究者番号:10021635

(2)研究分担者
該当なし

(3)連携研究者
該当なし

(4)研究協力者
該当なし