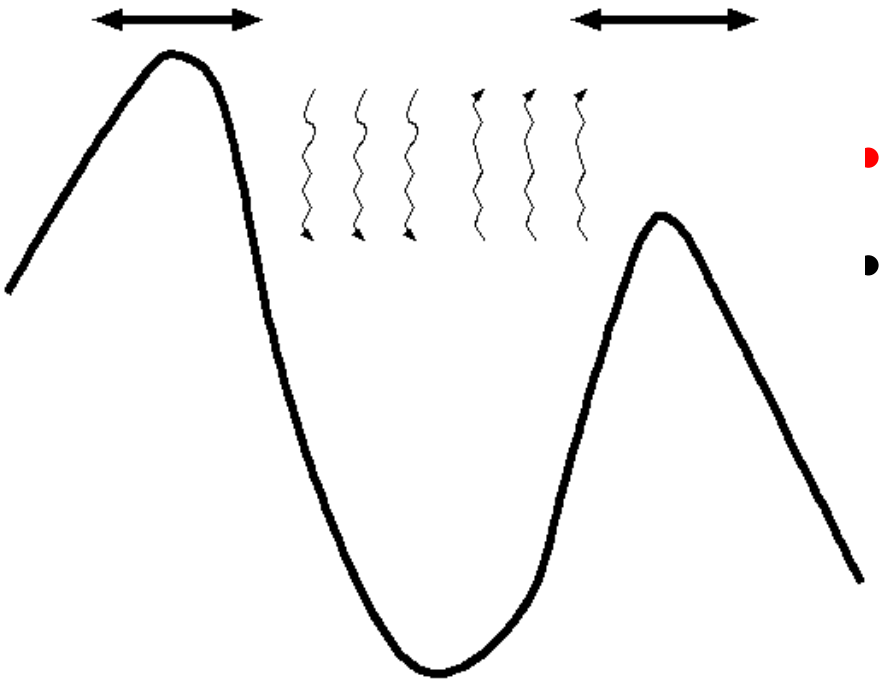
動力学の相空間における階層性：問題提起として

戸田幹人
奈良女子大学理学部物理

内容の概略

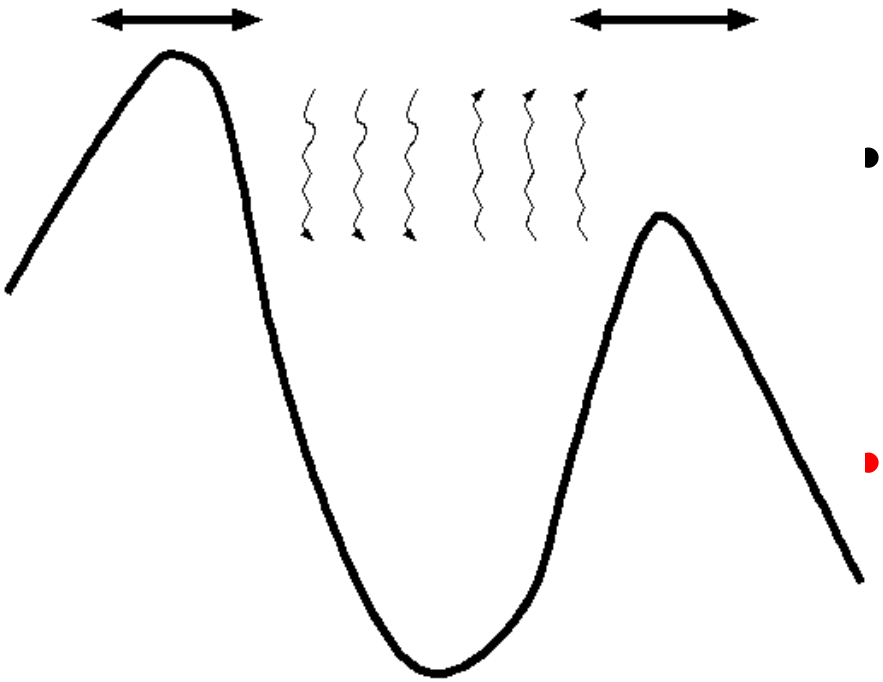
- 問題の背景：統計的反応論の限界
- 動力学的反応論へ向けて
- 相空間構造の幾何学：法双曲的不変多様体
- 集団運動の形成・崩壊・組み換え
- 集団運動の抽出：データマイニングとしての粗視化
- 「系」とその「環境」：その「境界」？
- 「粒子の描像」から「場の描像」へ
- 「古典」と「量子」の狭間

統計的反応論１：その基本的な描像



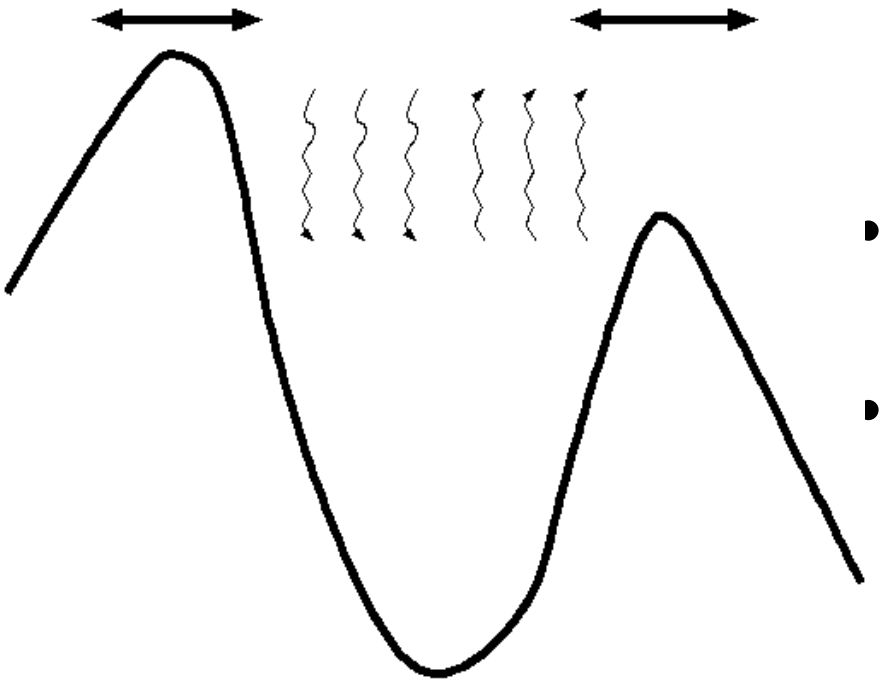
- 井戸内の過程のエルゴード性
- １次元的な「反応座標」
- サドル近傍で「反応座標」と「熱浴」は独立

統計的反応論2 ：特徴的な時間スケールの分離



- 井戸内の過程における**緩和時間**
- 井戸を越える通路を見つける特徴的な時間：**反応時間**
- **二つの時間スケールが分離**

統計的反応論３ ：遷移状態理論



- ポテンシャルサドルは状態空間を二つに区分「遷移状態」
- サドルを越える「流れ」で「反応量」が分かる
- ポテンシャル井戸内の状態数と、サドルを越える「流れ」の比で、反応係数が得られる
- 理論は「局所的」

統計的反応論への疑問1

ポテンシャル井戸内の過程の非エルゴード性？

「反応座標」とそれ以外の自由度から成る「熱浴」への
分離はどこまで正しいのか？

サドルは状態空間を区分できるのか？
反応座標の多次元性？

複数の井戸を渡る過程（多谷過程）
反応座標の組み換え・動的な相関

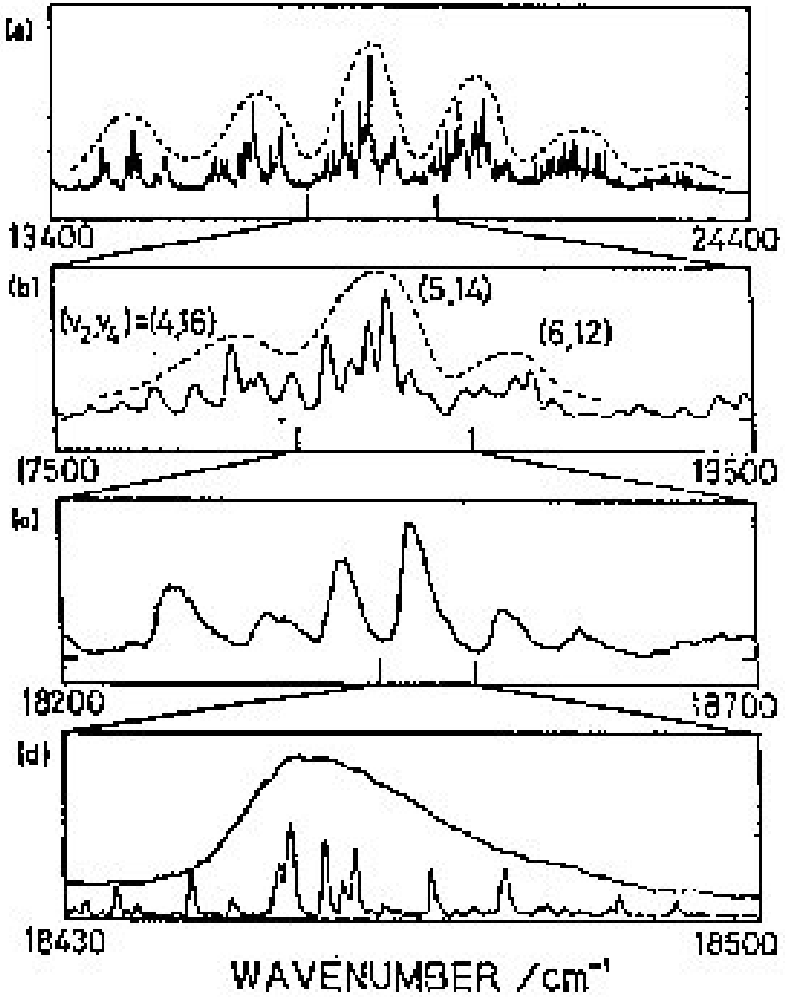
統計的反応論への疑問2

気相反応・宇宙空間における有機物合成
　希薄環境における反応過程

レーザーによる特定モードの励起
振動エネルギー分配過程の時間分解測定

生体分子反応における「情報処理」の可能性
　非熱的揺らぎの下の「マックスウエルの悪魔」

分子振動スペクトルの階層性



- アセチレンのスペクトルの精密測定

Yamanouchi et al., JCP,95(1991)6330

動力学的反応論の目指すもの

- 「統計的反応論」の基礎付けとその限界
  「遷移状態」の定式化
  「統計性」の起源の明確化

- 「統計的反応論」を越えた理論的方向性
  「反応座標」の多次元性
  「「反応座標」と「熱浴」の非分離
  「反応座標」の組み換え

動力学的反応論に向けて

- 「遷移状態理論」の定式化
  状態空間を区分する力学的な構造
  ＝＞法双曲的不変多様体
- ポテンシャル井戸内の非エルゴード性
  ＝＞アーノルドの網の目
- 「状態」から「状態」への遷移のネットワーク
  ＝＞カオス的遍歴
  複数の井戸を渡り歩く過程

相空間構造幾何学:
統計的反応論を越えて

- 法双曲的不変多様体

  分岐･消失

- それらの安定多様体･不安定多様体
- 安定多様体と不安定多様体の交差

  交差のネットワーク

非線形共鳴のネットワーク:

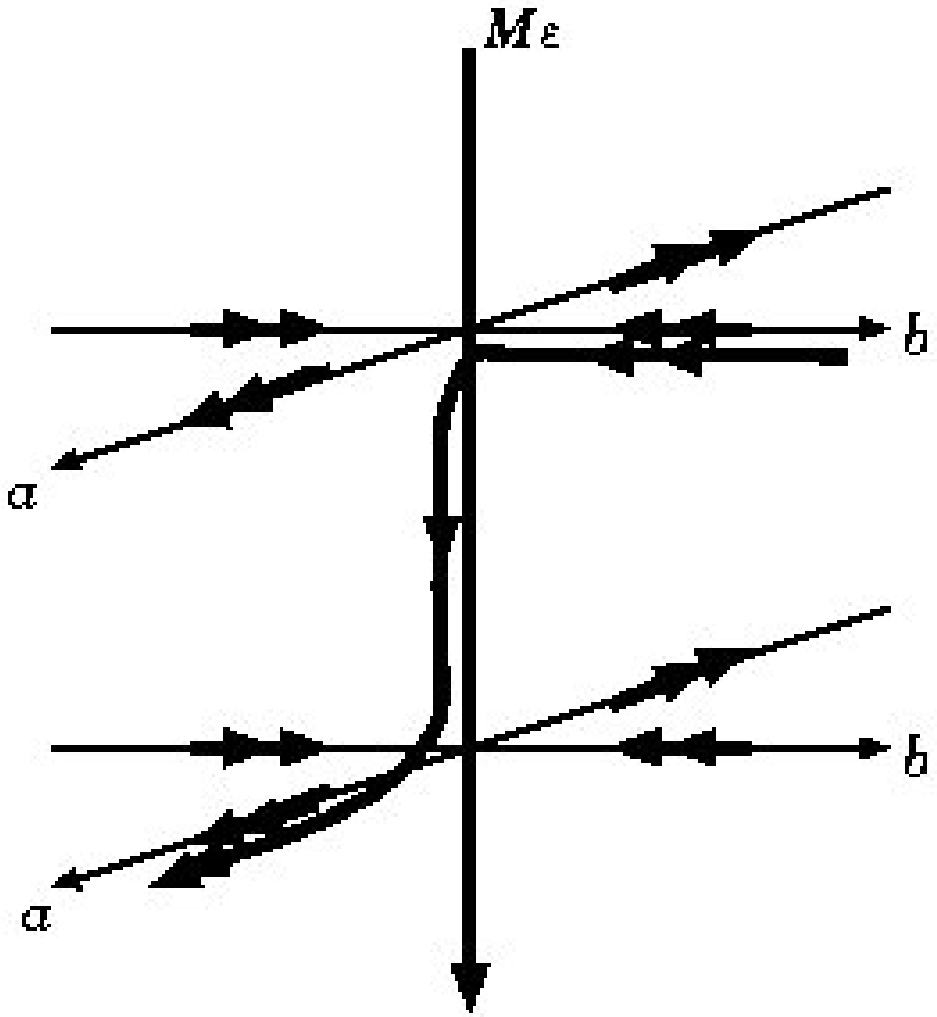
アーノルドの網の目の成す階層性

法双曲的不変多様体

normally hyperbolic
invariant manifolds(NHIMs)

- 法線方向のリャプノフ数の絶対値が
  接線方向のリャプノフ数の絶対値より大きく、
  ギャップがある
  ＝＞不安定性の特徴的時間スケールに
  階層性がある
- 構造安定
  (安定多様体と不安定多様体を含めて)

法双曲的不变多様体



動力学的反応論1：
「遷移状態論」の定式化

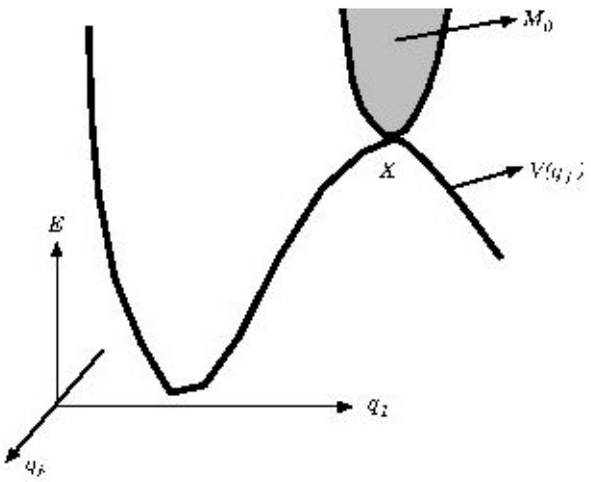


Figure 8. A saddle of the potential and the NHIM above it.

- **指数1のサドルの近傍にある法双曲的不変多様体**

N自由度

等エネルギー面：2N-1次元

NHIM：2N-3次元

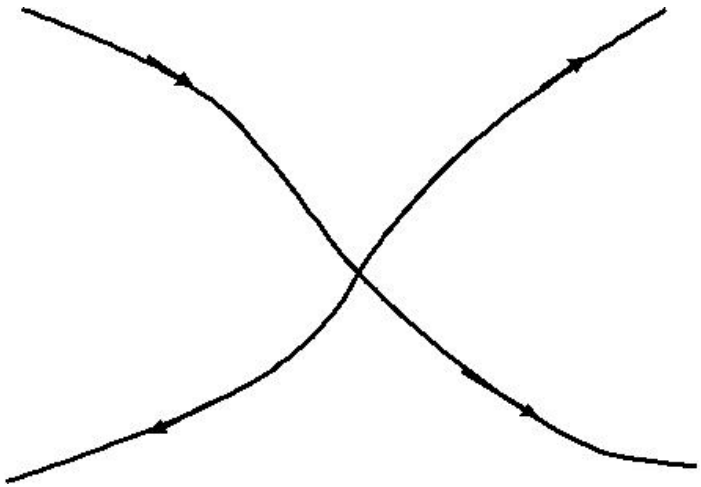
安定(不安定) 多様体：

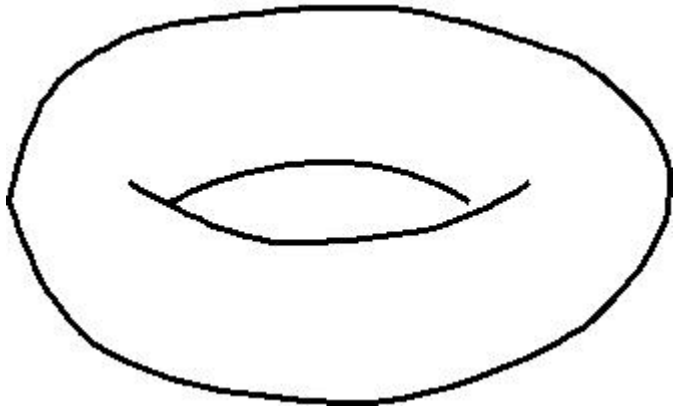
2N-2次元

＝＞等エネルギー面の分離

「遷移状態論」：状態空間の分離

- 「状態空間」は相空間





集団運動としての「反応座標」

- 生体分子の構造変化
- 生体分子の周囲の水分子の構造変化：
  水素結合ネットワーク

非線形共鳴のネットワーク：アーノルドの網の目

- **振動エネルギー再分配過程**の動力学

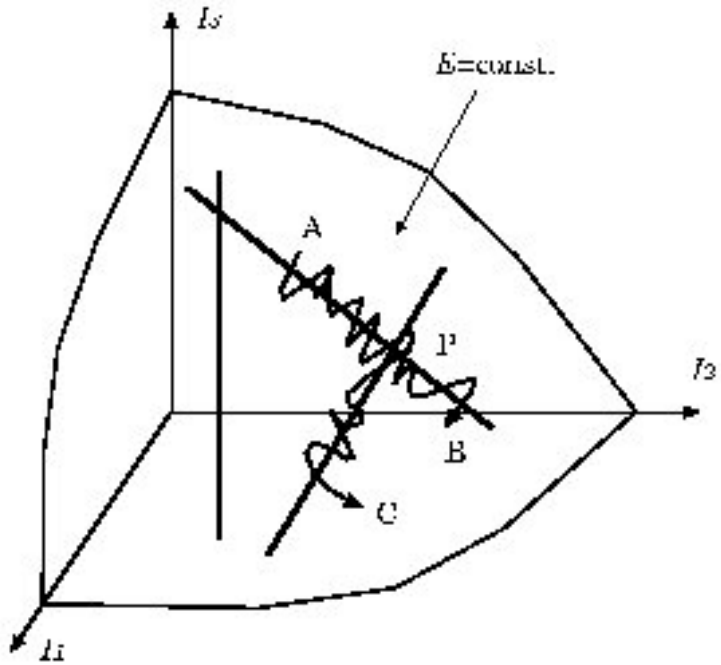
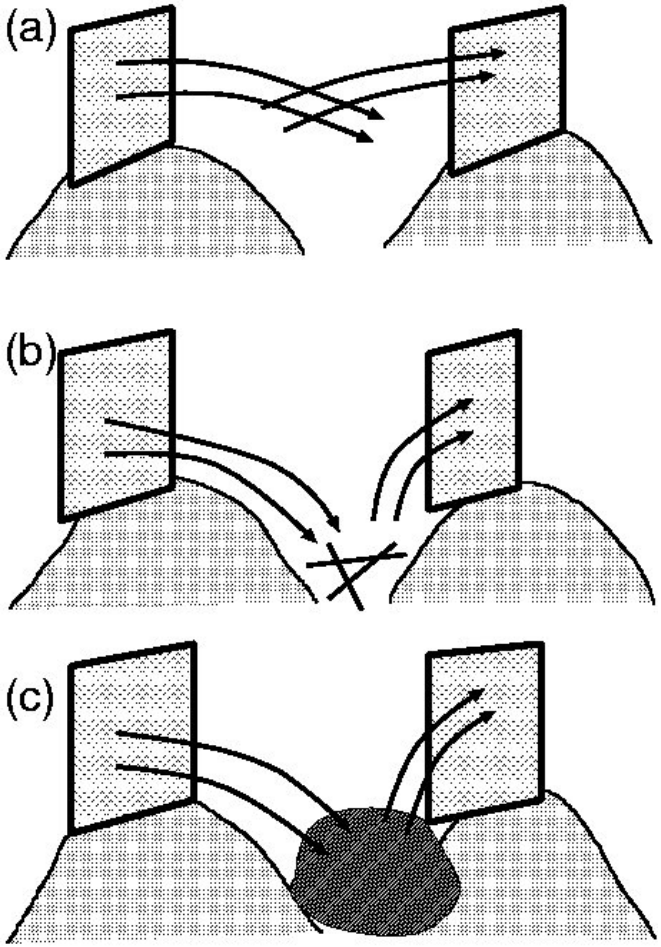


Figure 21. Branching is expected at resonance intersections

動力学的反応論2

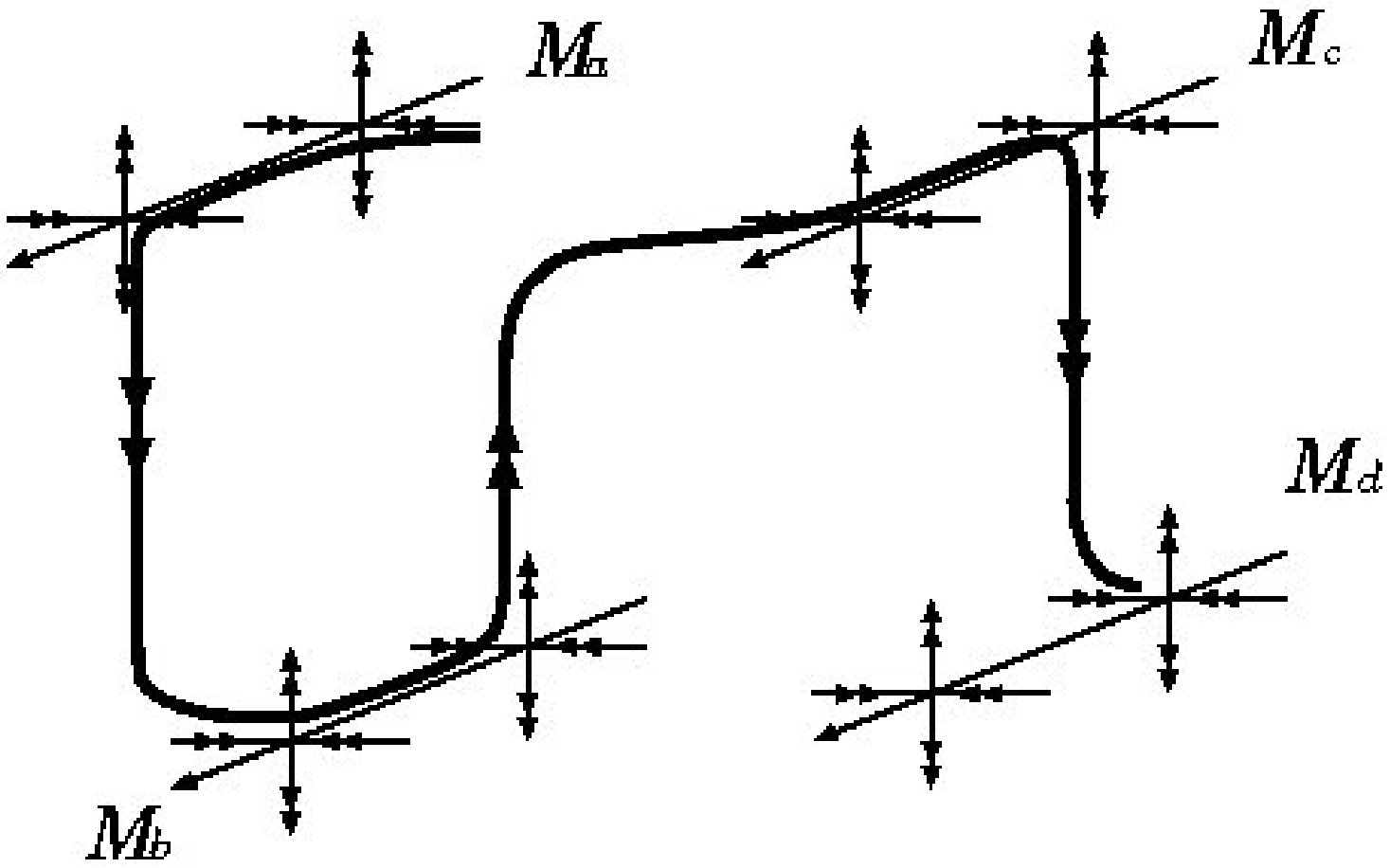


- サドルからサドルへの**動力学的な相関**
- 井戸内の振動エネルギー分配における**異なる統計性**
- NHIMと井戸内の**相空間構造のつながり**
- **選択的反応過程**の可能性

動力学的反応論3：
統計的反応論を越えて

- カオス的遍歴
- 交差構造のネットワーク性
- 反応座標の組み換え
- 法双曲的多様体の消失･分岐
- 非エルゴード的な統計性：ベキ的挙動

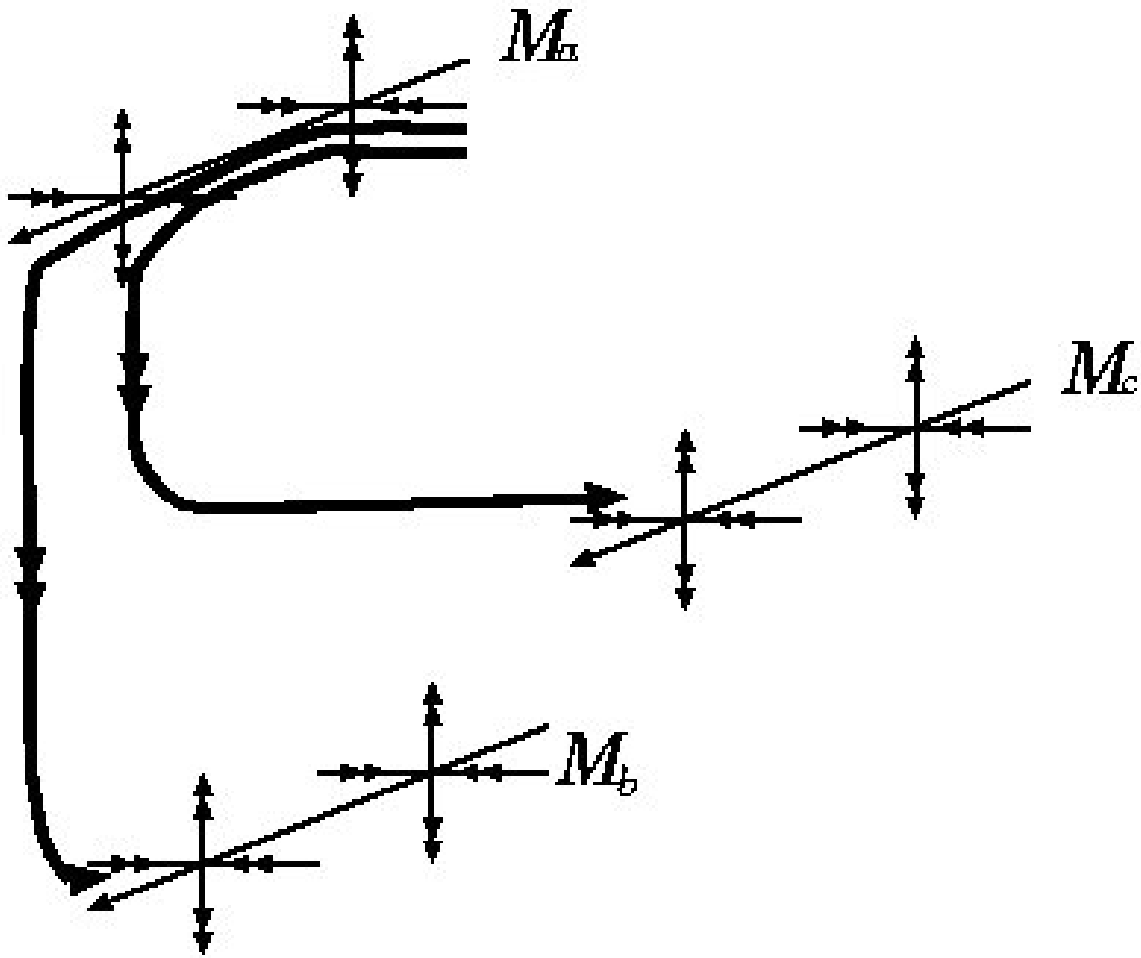
カオス的遍歴



集団運動の崩壊と組み替え

- 生体分子において、
  基質結合に伴う一連の構造変化
- 水素結合ネットワークの組み換え

交差構造のネットワーク



交差構造の枝分かれ

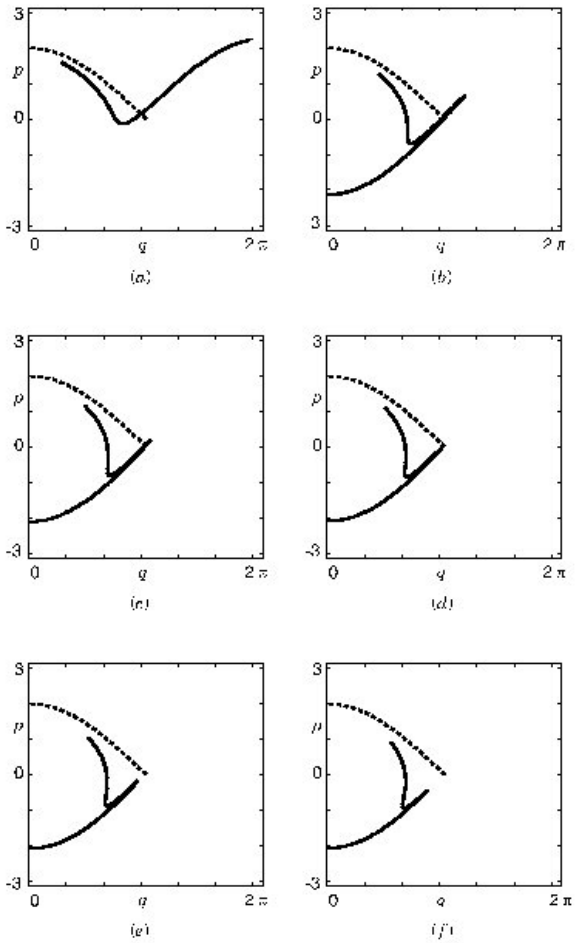
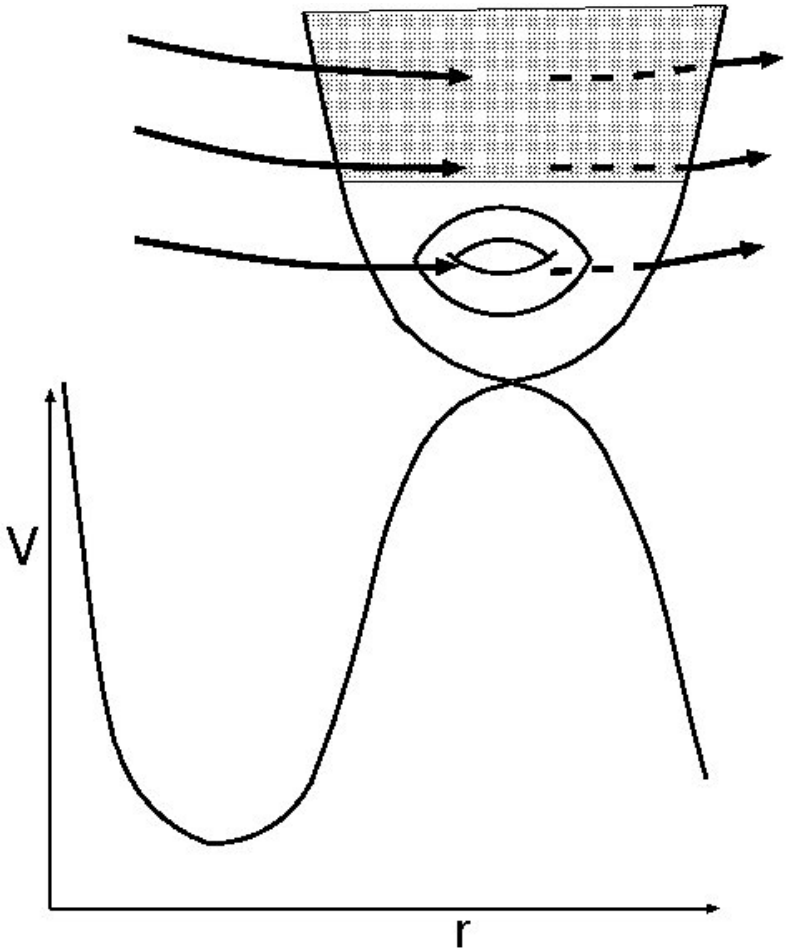


Figure 22. How intersections between stable manifolds (dotted lines) and unstable manifolds (solid lines) change as θ_0 varies. Tangency takes place at (a). We choose $V = 1.0$, $\omega = 1.0$, $\varepsilon = 0.1$, and $\mu = 0.22$, and the initial values θ_0 for these pictures are the following: (a) $\theta_0 = 0.9\pi$, (b) $\theta_0 = 0.8\pi$, (c) $\theta_0 = 0.78\pi$, (d) $\theta_0 = 0.77\pi$, (e) $\theta_0 = 0.76\pi$, (f) $\theta_0 = 0.74\pi$.

法双曲不変多様体の消失･分岐



- 法双曲的多様体上のカオス（自由度3以上）

法線方向の不安定性と接線方向の不安定性の「共鳴」

ベキ的な統計性

- 非線形共鳴の階層性？
- 異常拡散・f分の１スペクトル
- 無限測度の確率論

＝＞エルゴード性の概念を拡張する必要性

非線形共鳴の階層性

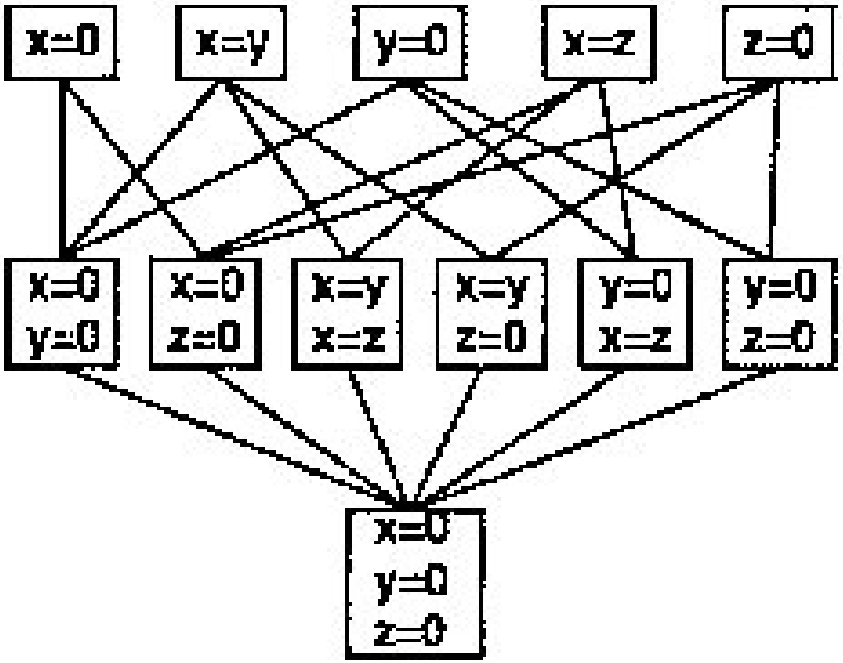


図 17: 包含関係の階層性を図示する Hasse 図式 の例

動力学的反応論4：
rugged energy landscape

- 生体分子などの「でこぼこ」ポテンシャル面
- 粗視化したエネルギー面上のダイナミックス
- 部分系の集団運動としての「反応座標」
- 多数の「浅い」ポテンシャル井戸内の運動
- 「非熱的な」統計性

「非熱的揺らぎ」の下での
マックスウエルの悪魔

- ベキ的揺らぎ・無限測度で記述される揺らぎの下での「投機者」としての分子

＜＝経済物理との共通性

生体分子における反応過程

- 実験的には限られた情報しか得られない
  一分子計測
- 分子動力学で可能な時間スケールに限界
- 大規模数値データをどう解析するか
- 活性部位における反応過程の量子性
- 大きく異なる階層的時空間スケール
- 大自由度系

集団運動の抽出：
データマイニングとしての粗視化

- 大規模数値データ・実験データから
  粗視化された集団運動を抽出
- 「解析的な表現」は無い
- 「運動法則」をどう取り出すか

時系列解析における試み

- たんぱく質の分子動力学データから
  粗視化ダイナミックスへ

水分子に囲まれたたんぱく質分子の分子動力学データを解析中
(横浜市立大学木寺グループとの共同研究)

ゆっくりした集団運動の抽出

- ウエーブレットによる「ゆっくりした運動」の取り出し

- 集団的な自由度をどう取り出すか
  (主成分解析？)

- 集団的自由度の変遷をどう捕らえるか

粗視化ダイナミックスとしてのトレンド

- 「トレンド」をどう抽出するのか
- 「トレンド」をどうモデル化するのか
- 「トレンド」を動力学として記述できるか

ランダム力学系としてのモデル化は可能か
揺らぎは「熱的」か？

Equation-free なダイナミックス (Kevrekidis)

概不変性

- 集団運動の「不変多様体」は、厳密な意味では「不変」ではない

＜＝　他の自由度の影響、雑音

「不変性」の要請をゆるめる必要がある

拡散の効果と負のリャプノフ数の拮抗

「ランダム」力学系における概不変性

- どのように「概不変性」を定式化するか

- 大規模データにおいて「概不変」な構造をどう抽出するのか

「系」と「環境」の「境界」

- 「系」の動力学・非平衡性の影響を受けた「境界」が存在する

たんぱく質分子に接する水分子

- 「古典」と「量子」の「境界」？
  生体分子に取っての「環境」の役割
  ＜＝「双対性」による定式化との関係？

「粒子の力学」から「場の力学」へ

- たんぱく質分子のまわりにある水分子集団の集団的構造をどうとらえるか

成員は入れ替わりながら維持される構造を力学としてどう記述するのか

＝＞経済物理における「組織」

「量子」と「古典」の狭間

- 生体分子に取っての「環境」は
  巨大自由度の観測装置ではない

どこから「古典的」と扱えるのか

概念的かつ実際的な問題
＝＞マルチフィジックス

量子系の部分系の特徴付け

- 量子絡み合い

「古典性」とは「部分への分割」や「動力学の詳細」に依存しない量子絡み合いの特性

＝＞量子絡み合いにおける
普遍性クラスの存在

逆問題としての量子絡み合い

- 部分系の情報から全系を復元できるか
  ＝＞相対位相の情報を復元できるか

普遍性のために
　　「相対位相の情報を復元できない」
　＝＞「古典性」

量子カオスにおける
量子絡み合いの普遍性

- 動力学的な絡み合いの生成過程
  「古典性」の起源としての動力学的統計性
- ランダム行列による記述
- 普遍的な緩和過程は存在するか？

量子的な巨大自由度？

- 超流動状態
- 量子計算における計算過程(A.Shimizu)

力学系理論における課題

- 大自由度力学系における相空間構造の**階層性と粗視化**
- 粗視化された動力学の抽出と**縮約された記述の構成**
- **同種粒子系の相空間構造**（「粒子の力学」から「場の力学」へ）

量子カオスにおける課題

- 量子的な全系の「部分系」が「古典的」である条件は何か
- 「自然な境界」の設定は可能か
- 緩和過程の普遍性と個別性
- 「逆緩和過程」は可能か

＝＞量子情報処理における

エラーからの復元

共同研究者

- **動力学的反応論**
  小松崎民樹氏・ChunBiu Li氏 (北大電子研)
  小路口暁氏 (NEC)
- **生体分子の分子動力学の解析**
  木寺詔紀氏・渕上壮太郎氏 (横浜市立大)
- **量子カオスにおける絡み合い**
  窪谷浩人氏 (神奈川大)
  足立聡氏 (東工大)