



「可積分系」

ウィロックス ラルフ (数理科学研究科 准教授)

ニュートンが17世紀にケプラー問題を解いて以来、それと同様に求積法で完全に解ける「完全可積分系」とよばれる力学系の探求が始り、可積分系という概念は微分積分学と古典力学の発端に起源と言っても過言ではない。オイラー、ラグランジュやハミルトンによる古典力学の形式化に基づき、J. リウヴィル (Joseph Liouville) が19世紀半ばに求積法で完全に解ける発展方程式の構造を初めて解明したが、実は、その構造で初等関数で記述できる厳密解をもつ方程式はまれなものであるため、可積分系の研究は特殊関数論の発展にも大きな刺激を与えた。

いっぽう、求積可能という性質より方程式の解を生成する特殊な変換群の存在は近年「可積分系」というものの定義的

特徴とされている。そのパラダイムシフトのきっかけとなったのは、M. クラスカル (Martin Kruskal) と共同研究者が1960年代に発見した非線形偏微分方程式であるKdV方程式の逆散乱法による解法である。たとえば、KdV方程式の解に周期的な境界条件を課すと、方程式による時間発展はヤコビ多様体上の線形の時間発展に対応することは知られているし、一般には、KdV方程式の解が無次元グラスマン多様体と関係し、解の時間発展はその多様体上の線形変換群に対応することは佐藤幹夫先生 (京都大学名誉教授) による有名な結果である。

それは連続系ばかりではなく、可積分系の研究は離散系にも拡大した。平面上の可積分な写像のプロトタイプであるQRT写像は、楕円曲線を定める保存量

をもち、写像自体はその楕円曲線上の加法定理に対応し、他の可積分な2次元の写像は同様の代数幾何学的な記述を認めることが知られている。

コンピュータで可積分系を数値的にシミュレートすると、その系の可積分性を証明する性質はほとんど保たれていないため、最近、連続可積分系の忠実な離散化についての研究は非常に盛んであり、さらに簡単にシミュレートできる可積分なセルオートマトンも活発に研究されている。数理科学研究科では筆者以外、時弘哲治教授 (可積分なセルオートマトン)、坂井秀隆准教授 (離散パルヴェ方程式) や白石潤一准教授 (量子可積分系) らがこの分野の研究を行っている。



「PとNP」

河村 彰星 (情報理工学系研究科コンピュータ科学専攻 助教)

西暦2000年5月、クレイ数学研究所は千年紀の幕開けにあたり未解決問題を7つ挙げて各100万ドルの賞金を懸けた。その筆頭を飾るのが計算量理論の $P \neq NP$ 予想である。

n 人の者がおり、どの二人が親しいか書き並べたリストがある。三つの班に分けて各班内はどの二人も親しいようにしたい。この間に答えるには、各人を班に割当てる3通りそれぞれのそれぞれが条件を満たすか調べ尽くすという自明な方法があるが、手間が余りに膨大である。

もっと素早く班分けの有無を知る (そして有れば見出す) 術はないか。ここで「素早く」とは、入力長さに関する多項式の程度の手間で済むことをさす (ここでは入力リストの長さが n^2 程であるから、 n の多項式と言ってもよい)。たとえば三つでなく二つの班に分けるのであれば、そのような方法はある (考えてみよ)。このように入力長の多項式 (polynomial) 以内の時間で解き得る問題の全体を計算量理論では P とよんでいる。勿論厳密には「問題」「時間」な

どの言葉にはきちんと定義があるが、その詳細よりも重要なのは、それが実際に即した概念であり、 P は現実の計算機で素早く解ける問題におおむね一致するという事実である。

班が三つの場合、素早い判定法は知られていない。ただこの問題は、自ら班分けを見出すのは難しくとも、もし或る班分けを示されたら、それが条件を満たすか確かめるのはたやすいという性質をもつ。このように解を確かめることは多項式時間でできるという状況で解の存否を問う問題の全体を NP とよぶ。解を自ら見出すことを要しないのだから、当然 NP は P よりも真に多くの問題を含む一と考えられるが、その証明が得られていない。これが $P \neq NP$ 予想である。上述の三班分けの問題も、 P に属しないことが示せない。まだ人類の知らない上手い解き方がある可能性を除けずにいるのである。

何かを上手く配置したり、効率の良い解決を求めたりする工学の問題の多くは、 NP に属する。そもそもあらゆる数

学的探究が、適当な定式化のもとで、やはり NP 問題である (数学における証明というものは、発見するのは難しいが、与えられれば原理的にはただちに確かめ得るものである)。これらの本質的な難しさを問う $P \neq NP$ 予想は、知的な営みすべてに関わる重大な課題といえる。

さて、 $P \neq NP$ はそう簡単に示されそうにないが、周辺には実際上も理論上も興味深い豊かな研究の裾野が広がる。たとえば厳密に解くのが難しい問題なら近似解を求めるのがひとつの手である。ところが或る種の問題は近似的にすら解けないことが分かっている。このように計算量の研究では、優れた算法を見出すことと、そのような算法の非存在を示すこととの両面から、計算の本質に迫ろうとするのである。

筆者はこの計算量の理論を、実数を含む数値問題に応用する研究を行っている。また計算量における乱択 (ランダムネス) の役割の解明を目指す東工大、電通大との共同プロジェクトも進行中である。



「臨界温度と秩序パラメータ」

内田 慎一 (物理学専攻 教授)

臨界温度という言葉は、気体がどんなに圧力を加えても液体にならない超臨界流体状態になる温度という意味でも使われるが、物質が相転移によりその形態(相)が変化する温度、相転移温度、として物理、化学の分野では広く使われている。多くの場合、臨界温度以下の温度では、物質を構成する原子、分子あるいは電子が秩序をもった相を形成する。たとえば、原子が規則的に整列する固体、電子のスピン磁気モーメントの向きが揃う強磁性が典型である。また、多数の粒子の波動関数の位相が揃う、ヘリウム原子の超流動や電子が抵抗を受けずに流れる超伝導も秩序相の例である。

このような秩序相では、エントロピーがゼロであり、多くの場合、対称性の破れが起こっている。強磁性では特別な向きにスピンの揃うために空間回転の対称性が破れており、超流動や超伝導では位相が特定の値に固定されることで「ゲージ対称性」といわれる対称性の破れが起

こっている。一般に、膨大な数の原子などにより形成される物質では、対称性が破れた方が系のエネルギー(熱力学の内部エネルギー)が秩序のない状態に比べ低くなるからである。このエネルギーは秩序の安定化エネルギーである。秩序相の科学的、定量的な記述のために導入されるのが秩序パラメータという物理量である。強磁性では物質内部に発生する磁化の大きさ、超伝導では電子対(クーパー対とよばれる)の束縛エネルギーなどが秩序パラメータとなる。秩序パラメータは、磁化のように必ずしもエネルギーの次元をもたないこともあるが、秩序相の安定化エネルギーの尺度ともなる。物質の温度を上昇させると秩序が徐々に乱れ、乱れの尺度であるエントロピーが増大する。同時に、秩序の安定化エネルギーも減少する。この結果、秩序パラメータが小さくなり、ある温度でゼロになってしまう。この温度が臨界温度である。

臨界温度 T_c の高さは強磁性や超伝導

の応用上、重要なパラメータである。たとえば、超伝導の T_c の最高値は、銅酸化物の絶対温度 135 K であるが、 T_c が常温を超える超伝導物質が発見されれば、そのインパクトは巨大であろう。 T_c を高くするには、安定化エネルギーを大きくし、エントロピーの増大速度を抑えればよい。しかしながら、超伝導の T_c を理論的に予測し、それを上昇させる方策を示すことはきわめて難しい。膨大な数の電子同士のクーロン相互作用をはじめとして、結晶構造などの物質の微妙な状況が T_c に影響を与えるからである。理学系研究科の多数の研究室が、相転移・秩序パラメータに関する研究を行っている。物性だけではなく、宇宙・素粒子の分野では真空の相転移として、また、生体の自己組織化も一種の秩序・相転移として理解される。超伝導の T_c を上げる努力は、物理学専攻の青木研、小形研が理論的に、内田研が実験的に続けている。



「星間分子雲」

山本 智 (物理学専攻 教授)

星と星の間には、ガス(星間ガス)と固体微粒子(星間塵)からなる星間雲がところどころに存在する。星間雲の中で最も密度が高く、水素が主に水素分子として存在するものを星間分子雲とよぶ。高いと言っても水素分子の個数密度は $10^2 - 10^6 \text{ cm}^{-3}$ 程度で、常温大気圧での個数密度 $2.7 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ よりも著しく低い。しかし、大きさは 0.01 - 1 光年、質量は太陽の質量の数 10 倍から数 1000 倍以上に達する。銀河系を見渡すと、質量が太陽質量の 10 万倍程度に達する巨大分子雲も数多く存在し、それらの総質量は銀河系の星の総質量の約 1% 程度を占める。星間分子雲は数 10 万年から数 100 万年の時間をかけてゆっくりと自己重力で収縮して、新しい恒星と惑星系のもとになる原始星と原始惑星系

円盤を生み出す。われわれの太陽系も、46 億年の昔に、そのようにして星間分子雲から生まれたのである。

星間分子雲の温度は 10 - 100 K (-263°C から -173°C) 程度なので、マイクロ波領域から遠赤外線領域の放射を観測して調べる。星間分子雲には水素分子以外にも一酸化炭素、水、アンモニア、ホルムアルデヒドなどのさまざまな分子(星間分子)と星間塵が含まれている。星間分子雲は、主にこれらの星間分子の回転スペクトル線や星間塵の熱放射を電波望遠鏡や赤外線望遠鏡で観測することによって研究されている。その結果、星間分子雲から太陽程度の質量をもつ原始星が誕生する過程については、詳細な理解が進みつつある。

星間分子雲には、エチルアルコールや

ギ酸メチルなどの比較的大きな有機分子まで、微量ではあるが存在していることがわかっている。また、炭素が直線につながった炭素鎖分子も特徴的に見られる。星間分子雲の中心部では、含まれている星間塵のおかげで外部からの紫外線が遮断されるため、分子が壊されることなく成長できるのである。無味乾燥とも思える星間空間でも、分子の豊かな世界が広がっている。著者の研究室では、星間分子雲における星・惑星系形成とそれに伴う分子進化を観測的に調べ、太陽系物質との関係を探っている。星間分子雲は物理学、天文学、地球惑星科学、化学にまたがる研究対象であり、本研究科では他にもさまざまな関連研究が行われている。



「アト秒パルス」

沖野 友哉 (化学専攻 助教)

化学反応を誘起するのは、電子の運動である。たとえば、水素原子の基底状態において、電子が周回運動をするのに要する時間は約 150 アト秒 (1 アト秒 = 10^{-18} 秒) であり、これは、光でさえも、45 ナノメートルしか進むことのできないきわめて短い時間である。この分子振動 (10 ~ 100 フェムト秒) などよりもはるかに早い電子の運動をストロボ写真として観測するには、アト秒の時間分解能を有するパルスの発生が必要となる。アト秒パルスは、分子内の電子分布の変化を実時間で追跡し、化学反応を電子分布の変化から理解するための光源として、期待されている。

アト秒パルスは高次高調波発生過程 (基本波の n 分の 1 の真空紫外から軟 X 線領域の短波長の光が発生する過程) を用いて発生される。その発生原理

は、1993 年に提案された、3 ステップモデルに基づいている (理学のキーワード第 23 回「3 ステップモデル」参照)。1995 年に、このモデルを用いて、アト秒パルスが発生できることが示され、2001 年に、初めてアト秒のパルスの発生が実験的に確認された。現在では、レーザー技術の進展により電場振幅の最大値が 1 か所となるように光の位相を固定した数サイクルフェムト秒レーザーパルスを用いて、最短で 80 アト秒の単一アト秒パルスが発生されている。

アト秒パルスを用いた応用研究については、始まったばかりであるが、これまでにいくつか報告されている。最近の研究としては、ネオン原子を光子エネルギー約 100 eV の 100 アト秒パルスで励起し、2s 軌道と 2p 軌道からの光電子放出に 20 アト秒程度の時間差があるこ

とが突き止められている。

しかし、これまでのところ、分子内の化学反応を、アト秒パルスを用いてポンプ・プローブ追跡することは実現していない。これは、アト秒パルスの発生効率が低いことから、ポンプ・プローブ計測を行うために十分な強度のアト秒パルスが得られていないことによる。

化学専攻の山内研究室では、上記の問題点を克服する高繰り返し高強度単一アト秒パルスを発生し、強いレーザー電場中での化学反応を実時間で追跡するための装置開発を行っている。特に、強レーザー場中できわめて速く動く炭化水素分子中の水素原子 (プロトン) の運動を、アト秒パルスを用いて高精度で実時間追跡することを目指している。



「システム生物学」

黒田 真也 (生物化学専攻 教授)

生物は、細胞や分子といった互いに影響しあう要素からなる、ある種のシステムとみなすことができる。システム生物学とは、生命現象をシステムの振る舞いとしてとらえ、その特性や動作原理を明らかにすることを目的とした、生物学の一分野である。英語表記では systems biology と複数形になるが、これは複雑な複数のシステムを扱う systems engineering の考え方を biology へ適用するという発想に基づいてこの分野が生まれたためとされている。

生命現象のシステムレベルでの理解は、古くから繰り返し試みられてきた生物学の大きな目標のひとつである。たとえば生理学はそのような試みのひとつで

あるが、システムを構成する分子についての知見が少ない時代に確立されたため、システムの振る舞いに関する現象論的な解析が中心であった。その後、生化学や分子生物学が盛んになり、さらに近年のオームクス研究の進展などにより、遺伝子やタンパク質といったシステムの構成要素についての知見が急速に明らかになった。システムの振る舞いと構成要素の両方の知見が蓄積されたことで、生命現象のシステムレベルでの本質的理解が初めて可能になったといえる。

システム生物学では、多数の構成要素の振る舞いを詳細に調べたうえで、それらを統合してシステムとしての特性を把握することが必要である。このような統

合的な解析を行うために、生物学に加えて工学や数学、情報科学などさまざまな分野の研究者が参加しており、実験データに即したモデル作成、シミュレーションによる分子ネットワークの特性解析、新たな実験・解析手法の開発など多様な研究が展開されている。またタンパク質や細胞、組織といった単一階層のシステムだけでなく、これら複数の階層にまたがったシステムに関する研究も行われている。さらにこれらの知見を製薬・医療に生かそうとする試みも活発である。このようにシステム生物学の適用範囲は広く、今後の生物学の主流となることが期待される。