

## 大自由度カオスの相空間幾何学と 複雑系の化学反応動力学

Geometrical Structure of Phase Space in Multi-Dimensional Chaos :  
Application to Chemical Reaction Dynamics in Complex Systems

日時 2003年10月26日から11月1日まで

場所 京都大学基礎物理学研究所

### 研究会の趣旨

化学反応はミクロに見れば、非線形な分子振動が相互作用する系におけるダイナミックスであり、非線形力学系におけるカオス現象が重要と考えられる。特に、タンパク質の折り畳みなど高分子の関与する化学反応は、大自由度力学系の重要な一例であり、カオス現象の解明を通じて、反応制御や効率の向上などに向けた、新たな知見が得られる可能性がある。このような問題意識に基付き本研究会では、(1) 大自由度力学系の相空間構造を解明するため、従来の少数自由度系カオスの研究を越える新たな解析方法を開拓し、(2) この方法に基付いて、大自由度力学系にしばしば見られる、動的な長時間相関のメカニズムの解明を行なう。さらに、(3) この長時間相関を利用して、反応制御や効率向上を行なうための方法論を建設し、(4) その具体的な応用として、タンパク質の折り畳み過程に対して、これを大自由度力学系と見なす立場から、反応制御と効率向上に向けた解析を行なう。以上の4点の研究課題に向けて、日米および諸外国における非線形物理と物理化学の研究者が一同に会し、研究成果の相互交流と共同研究の推進を目指す事が本研究会の目的である。本研究会の詳細な報告は、*Advances in Chemical Physics* (John Wiley & Sons, Inc.) の特別号 (Vol.130, Part A&B, 2005年2月) として出版される。

なお本研究会は、基礎物理学研究所からの財政援助以外に、下記の団体からも財政援助を受けた。ここに感謝したい。

- (1) 日本学術振興会日米共同セミナー
- (2) 井上科学振興財団
- (3) 科研費特定領域研究「強レーザー光子場による分子制御」(代表・山内薫東大教授)

世話人 戸田幹人 (奈良女子大学理学部)・小松崎民樹 (神戸大学理学部)  
小西哲郎 (名古屋大学理学部)・R. Stephen Berry (シカゴ大学)  
Stuart A. Rice (シカゴ大学)

本研究会では、非線形物理・化学物理・生物物理・応用数学など異なる研究領域の研究者が一堂に会し、相空間構造の解析に基づいた化学反応の動力学理論に向けて議論を行った。その中で特に重要なのは以下の四点である。このうちで第一と第二は、相空間構造に基づく反応動力学の構築に向けた基礎的な課題に関連し、第三と第四は、基礎理論を複雑系の反応過程に応用するための課題に関連する。

まず基礎的な課題における成果を述べる。

第一の点は、法双曲的な不変多様体と、その安定多様体・不安定多様体の交差構造に基づいて、反応過程の動力学を解析する方法の有効性が確認されたことである。この方法は、従来、2自由度系に対しては確立していたが、これを越える場合に関して有効性が議論されたのは初めてである。さらに、大自由度系に対して適用するに際して、相空間の領域を粗視化し、各領域のつながり方をグラフ化することによって、ミクロなダイナミクスからマクロなダイナミクスへと橋渡しを行う方法の可能性が提起され、参加者の活発な意見交換が行われた。また、法双曲的な多様体が分岐・消失する過程を研究する重要性が指摘され、かつて2自由度系に対して Pollak と Pechukas が行った研究を、大自由度系に拡張していく必要性が指摘された。また、従来、遷移状態として考慮されてきた指数1の鞍点のみでなく、指数2以上の鞍点をも含めて反応論を構築する必要性が議論された。これは、法双曲的多様体として、最も次元が大きいのもののみではなく、より小さい次元のものが反応過程に寄与する可能性を意味する。それらが相空間において、どのような構造を成しているのかは未知の問題であり、今後の研究の進展が待たれる。さらに、「能勢—Hoover 熱浴法は、法双曲的多様体を保存するか」という問題が提起された。能勢—Hoover 熱浴法は分子動力学において一般的に用いられており、この問題は、能勢—Hoover 熱浴法の適用の正当性に直結するにもかかわらず、従来、全く問われてこなかった。

以上のように、相空間構造の基本である法双曲的多様体と反応動力学の関連に関して、多くの問題提起が成され、新しいアイデアが出された。

第二の点は、大自由度カオスのエネルギー緩和におけるボトルネックの存在が、「特徴的な時間スケールのギャップ」をメカニズムとする普遍的な現象として確認された事である。このようなボトルネックは、内部自由度を持つ系における遅い緩和、クラスター形成におけるサイズ分布の統計性、長距離相互作用を持つ系における緩和、たんぱく質における低周波数領域のエネルギー移動など、異なる領域において多くの現象に見られることが指摘された。「特徴的な時間スケールのギャップ」を持つ系では、非線形共鳴のネットワークが重要であるが、モデル系における詳細な研究が報告されるとともに、実際の分子において、wavelet 解析など新たな時系列解析の方法の有効性が指摘され活発な議論が行われた。また、特異値分解法に基づく、非線形共鳴のネットワーク上の非定常なダイナミクスの解析の可能性が指摘された。これらは、今後の研究において、有効性が検討されるべきアイデアである。また、鞍点近傍の法双曲的多様体と非線形共鳴

のネットワークが、相空間においてどのようにつながっているのか、という問題が提起された。この問題は、高励起振動状態から反応へ至るメカニズムに関係するとともに、複数の遷移状態を経て進行する反応過程における「動的相関」の可能性を解明するために不可欠であるにもかかわらず、これまで問われてこなかった問題であり、今後の研究が待たれる。

以下の第三と第四の成果は、以上に述べてきた基礎的な研究を、たんぱく質を初めとする大自由度における反応過程に対して応用するための課題に関連する。

第三の点は、力学系の方法論に基づく時系列解析の可能性と必要性が、分子動力学計算や1分子測定実験の結果に対する適用を念頭に議論されたことである。このような議論は、非線形物理の方法論を実際の場面に適用するに際して不可欠であるが、化学物理・生物物理の文脈でされるのは、本研究会が初めてである。このために、化学物理の研究会としては初めて異例なことであるが、時系列解析の専門家を招待講演者に加え、時系列解析の方法論の有効性に関して活発な議論を行った。特に、生物物理における分子動力学計算において、時系列解析を独立に行っていた研究者も交えて、複雑な多谷構造を持つエネルギー曲面上のダイナミクスに対して時系列解析を適用し、集団的な自由度を抽出していく必要性が議論された。また、従来、力学系理論においてカオス現象を特徴付ける指標として用いられてきた Lyapunov 指数の概念を、集団的な自由度に対して適用できるように拡張する試みとして、有限サイズ Lyapunov 指数の定義が紹介され、たんぱく質のような大自由度系において集団座標を取り出す指標としての有効性が議論された。さらに、非線形高次光学過程の観測によって、実験的に非線形動力学に関するデータを得る方法が紹介され、その有効性が議論された。この方法は、局所的な不安定指数を知るのに有効であることが理論的に知られているが、局所的な情報を越えて、相空間構造の解析など大域的な情報を得るために使えるか、という問題提起が成された。

第四の点は、クラスターの1次相転移や合金形成・液体における集団運動・たんぱく質の低エネルギー振動など、有限多体系・大自由度力学系における非平衡非定常ダイナミクスの具体例が報告され、それらのダイナミクスの反応論における重要性が指摘されたことである。これらのダイナミクスに対して、有限サイズ Lyapunov 指数を用いた解析、相空間構造の大域的なつながり方を特徴付ける試み、フラクタル指数を用いた分散関係の解析、指数2以上の鞍点からの寄与が重要である事を指摘する研究など、力学系に基づく基礎的な方法論を適用する研究が数多く報告された。今後は、時系列解析の発展と、それを用いた相空間構造の特徴付けを含めて、大自由度力学系の非平衡非定常ダイナミクスにおける集団運動の解析が重要であることが指摘された。

以上のように本研究会では、大自由度カオスの相空間構造の解析に向けた基礎的な課題と、たんぱく質やクラスターなどの具体的な系に対する応用の両面にわたって、多くの異なる研究分野から研究者が参加し、お互いの分野の壁を越えて議論を行い、新たな問題提起とアイデアが提出されるなど、境界領域における研究会としてきわめて有意義であったと言

える。この研究分野における第一歩として価値ある研究会であったという点で、参加者の間では好評であり、今後もこのような研究会を継続してほしいという要望が数多く寄せられた。以下に、プログラムに沿って研究会報告を行う。

### 第一日 「化学反応動力学のための大自由度カオス研究とは？」（戸田、Rice、小西）

第一日目は、本研究会における基本的な論点の提示を行い、少数自由度カオスの研究を越え、大自由度カオスに向かうに際して、特に化学反応の動力学との関わりにおいて、何が必要であるのかを議論した。Rice は、動力学的立場からの反応動力学の研究を総括し、多自由度系の場合の困難と、それを克服する方向性を打ち出した。戸田は、従来の反応動力学の基本概念である「遷移状態」に関して、その動力学的基礎付けの試みを総括し、Wiggins の提唱する、法双曲的不変多様体 Normally Hyperbolic Invariant Manifolds (NHIM) に基づく定式化が、「遷移状態」概念の多次元に対する一般化になっていることを示した。また、反応動力学の現在の課題と、それに対する力学系カオスの研究からのアプローチとして、特に NHIM の安定（不安定）多様体の交差構造の多様性と、反応論におけるその意味に焦点を当てて現時点での問題点を論じた。小西は、大自由度カオスの相空間構造の解明に向けて、非線型共鳴の構造の解明と、そこで見られる、「アーノルド拡散」に関して議論した。

### 第二日 「相空間の幾何構造と複雑系の長時間相関」

（小松崎、Uzer、Straub、Leitner、高塚）

第二日目の主題は、前日に議論された相空間構造の幾何学に基づいて、複雑系の長時間相関の可能性を議論することであった。小松崎は、鞍点近傍の NHIM を系統的に求める Lie 摂動論を議論するとともに、反応過程においてエネルギーが増加する際に、NHIM の分岐が予想される事を指摘し、この分岐において、遷移状態近傍に長時間相関が見られる可能性を示唆した。Uzer は、大自由度力学系における長時間相関のメカニズムの解明に向けて、複数のポテンシャル井戸領域にまたがる動的相関の可能性を指摘するとともに、従来のフーリエ解析に代えて wavelet 解析を用いることで、非線型共鳴における長時間相関を検出する試みを紹介した。Straub は、複雑系の代表としてたんぱく質における振動緩和の研究を報告し、緩和過程の特徴を理解するために動力学的な研究が必要である事を指摘した。Leitner は、たんぱく質の振動状態において、特に低振動数領域に「特徴的な時間スケールのギャップ」が存在することを指摘し、たんぱく質の集団運動が遅い緩和を示す可能性を議論するとともに、フラクタルに基づく分散関係の解析から、たんぱく質の折りたたみ構造のフラクタル性を指摘した。高塚は、有限多体系の反応過程に関する非平衡統計力学的な記述の試みを紹介し、クラスターの一次相転移における非定常ダイナミックスの解析を報告した。

### 第三日 「複雑系の非定常ダイナミクス」 (Koon、木寺、Douglas、首藤、斎藤)

第三日目の主題は、相空間構造を利用した反応過程の制御可能性と、具体的な複雑系における非平衡非定常ダイナミクスの研究の報告であった。Koon は、相空間構造の幾何学、特に NHIM の安定多様体・不安定多様体の交差を利用した制御の問題を、天体力学における例をあげて紹介するとともに、同様な方法が化学反応論で利用できる可能性を指摘した。特に、大自由度系において、相空間のつながり方を粗視化して表現する方法を紹介し、ミクロなダイナミクスからマクロへと橋渡しする可能性を議論した。木寺は、たんぱく質の分子動力学データに対して、時系列解析を適用する試みを紹介した。特に、従来の大域的な方法ではなく、局所的な時系列解析の適用可能性を指摘した。Douglas は、液体の集団運動において、特有の運動形態が見られること、それらの運動が非定常性非ガウス性を示すことを指摘し、有限サイズ Lyapunov 指数を利用した解析を報告した。首藤は、特徴的な時間スケールに階層性がある場合のダイナミクス、特に、遅い自由度のダイナミクスが、他の自由度から切り放されて凍結される可能性を指摘し、その結果、内部自由度を持つ系において「特徴的な時間スケールのギャップ」に起因する遅い緩和が見られることを指摘した。斎藤は、非線形高次光学過程を利用して、実験的に非線形ダイナミクスを解析する方法を議論した。

### 第四日 「有限多体クラスターの相転移」 (Berry、志田)

第四日は、大自由度ハミルトン系の立場から化学反応を研究するに際して、そのモデルとなる有限多体クラスターの研究における総括と展望を行った。これは、蛋白質の折り畳みなど、高分子の関与する反応動力学に対しても、研究手法や概念的な枠組みの点で、参照軸と成り得る。Berry は、有限多体系における一次相転移の動力学的研究の総括と展望を行った。志田は、有限サイズクラスターの固液相転移において、指数が 2 以上の鞍点が主要に寄与する事を指摘し、反応動力学における高次鞍点の重要性を提起した。これは、相空間において、最大の次元を持つ NHIM のみが重要なのではなく、より次元の小さい NHIM も寄与する可能性を意味しており、相空間構造の幾何学と反応動力学の両面において極めて革新的な問題提起である。指数が 2 以上の鞍点の重要性は、第六日目の小林・清水による、クラスターにおける合金化過程のダイナミクスにおいても指摘されている。

### 第五日 「非定常ダイナミクスと時系列解析」

(相澤、Jaffe、Broomhead、長谷川、田口)

第五日目の主題は、力学系の立場から非定常ダイナミクスを解析する問題と、具体的なデータにおいて非定常過程を解析する際に不可欠となる時系列解析の方法論である。相澤は、非線型共鳴領域における長時間相関に対する、漸近解析を用いた解析的な評価を議論するとともに、統計力学におけるエルゴード問題との関連を問題提起し、特に、多重エルゴード的な統計性の可能性を報告した。さらに具体的な問題として、クラスターの衝

突・蒸発過程の動力学における非定常性を指摘し、その結果、クラスターのサイズ分布に普遍的な分布が現れる可能性を示唆した。Jaffe は、NHIM の安定（不安定）多様体の交差を視覚化する試みを紹介し、天体力学における方法論が化学反応論に応用できる可能性を指摘した。次の三名の講演者は、動力的な時系列解析、即ち、実験結果や分子動力学データから、どのようにしてダイナミックスの情報を引き出すのか、という問題を議論した。これらの方法は、パターン認識や経済解析などに応用された事例はあるが、化学物理に使われた例はほとんど無く（第三日目の木寺の講演は、数少ない例のひとつである）、今後の発展が期待できる。Broomhead は、動力的な時系列解析の現状を紹介し、数値計算や実験で得られるデータを少数のパラメータで記述する方法を報告するとともに、脳科学において実際に応用された例を議論した。長谷川は、自己回帰モデルによる原子炉の運転データの解析を紹介し、原子炉が不安定な状況にある場合の、自己回帰モデルの収束性を議論した。非定常な反応過程も、不安定な原子炉と同様に、自己回帰モデルの収束性に特徴的な挙動が見られる可能性があり、今後の研究が期待される。田口は、非計量的なパラメータ化の方法論を報告し、進化系統樹に応用した結果を議論した。非計量的なパラメータ化は、たんばく質の機能と構造の関連など、計量的な特徴付けが自明ではない場合に対して、有効である可能性があり、今後の研究が望まれる。このように、第五日の講演は、境界領域である本研究会の特徴が最も良く現れたと言って良い。

#### 第六日 「非定常性からマクロな反応過程へ」

(Wiesenfeld、清水、小林、Vulpiani、金子、山口)

第六日目の主題は、非定常ダイナミックスの問題が、様々な反応過程と関連する事を明らかにすることである。Wiesenfeld は、複数の遷移状態を経過する反応過程の重要性と、複数の NHIM 間の安定・不安定多様体の交差を解析することによって、そのメカニズムを解明する可能性を指摘した。さらに具体例として、宇宙空間における有機物生成の素過程を挙げ、相空間構造の解明が有機物生成の解明につながる事を提起した。清水と小林は、少数多体クラスターにおける早い合金化過程の研究を報告し、非定常な集団運動の重要性と、その集団運動において、指数 2 以上の鞍点が重要な寄与をしている可能性を指摘した。Vulpiani は、集団運動の力学を特徴付ける量として、有限サイズ Lyapunov 指数の定義を報告し、長距離相互作用を行う系における集団運動の研究で有効性を指摘した。金子は、ネットワーク的に結合した化学反応系のダイナミックスを議論し、特徴的な統計的性質が見られる事を報告した。山口は、長距離相互作用をする系における「異常な拡散過程」を報告し、その動力学の解明の重要性を指摘した。

#### 第七日 「高励起振動状態・分子動力学」(Joyeux、Ezra)

Ezra は、能勢—Hoover 熱浴系の問題を総括的に報告した。能勢—Hoover 熱浴系は、分子動力学において一般的に使われる方法であるが、エルゴード性の問題など、その基礎

に関してはまだ確立されていない。これに関して、多重エルゴード性の可能性の指摘、能勢—Hoover 熱浴系は NHIM を保存するのか等、従来指摘されなかった問題が始めて提起された。Joyeux は、高励起振動状態のダイナミックスの量子化を報告し、特に、トポロジカルな特異性が現れる可能性を指摘した。

**第七日 「総括提起：大自由度カオスの研究は何を提示するか」(Rice、Berry、戸田)**

第七日目は、本研究会の締めくくりとして総括的な問題提起が出された。Rice は、非線形動力学から反応過程を研究するに際して、粗視化の重要性を指摘し、相空間構造に基づく「粗視化された力学的記述」の必要性を指摘した。Berry は、非平衡非定常なダイナミックスの解明が、熱力学が持つような「普遍性」を勝ち取る必要性を指摘した。戸田は、NHIM に基づく反応過程の動力学理論にとって、基礎的な課題として(1)NHIM の分岐、(2)複数の NHIM のつながり、(3)次元が小さい NHIM の役割、の3点の重要性を特に強調し、応用的な課題として、多谷構造を持つエネルギー曲面における集団運動の力学の特徴付け、それに向けた局所的な時系列解析の重要性を指摘した。

## Program

Sunday, October 26, 2003

- 12:30 - 13:30 Registration (Yukawa Institute for Theoretical Physics Kyoto University)
- Chairman **T. Komatsuzaki** (Kobe Univ. )
- 13:30 - 14:30 **A-1 MIKITO TODA** NARA WOMEN'S UNIVERSITY, Japan  
Toward reaction dynamics from multi-dimensional dynamical systems
- 14:30 - 15:00 Coffee Break
- 15:00 - 16:00 **A-2 (Overview and Discussant) STUART A. RICE**  
UNIVERSITY OF CHICAGO, USA  
Classical, Semiclassical and Quantum Mechanical Unimolecular Reaction Rate Theory
- 16:00 - 17:00 **A-3 TETSURO KONISHI** NAGOYA UNIVERSITY, Japan  
Slow Dynamics in MultiDimensional Phase Space: Arnold Model Revisited
- 18:00 Welcome Cocktail Party (Hotel Rubino Kyoto Horikawa)

Monday, October 27, 2003

- Chairman **R. Stephen Berry** (Univ. of Chicago)
- 09:00 - 10:00 **B-1 TAMIKI KOMATSUZAKI** KOBE UNIVERSITY, Japan  
Regularity in Chaotic Motions in Isomerization Reaction and Protein Dynamics
- 10:00 - 10:30 Coffee Break
- 10:30 - 11:30 **B-2 TURGAY UZER** GEORGIA INST. TECH, USA  
Direct construction of the transition state
- 11:30 - 12:30 **B-3 JOHN E. STRAUB** BOSTON UNIVERSITY, USA  
Vibrational Energy Flow in Proteins
- Lunch
- Chairman **M. Toda** (Nara Women's Univ.)
- 14:15 - 15:15 **B-4 DAVID M. LEITNER** UNIVERSITY OF NEVADA, USA  
Quantum Energy Flow in Molecules
- 15:15 - 15:30 Coffee Break
- 15:30 - 16:30 **B-5 KAZUO TAKATSUKA** UNIVERSITY OF TOKYO, Japan  
Chaotic dynamics of clusters: Microcanonical temperature in multichannel chemical reaction and semiclassical quantization of vibrational states
- 16:30 - 18:30 Poster Session II

Tuesday, October 28, 2003

- Chairman **T. Konishi** (Nagoya Univ. )
- 09:00 - 10:00 **C-1 WANG SANG KOON** CALTECH, USA  
Tube Dynamics, Lobe Dynamics and a Low Energy Tour of Jupiter's Moons
- 10:00 - 10:30 Coffee Break
- 10:30 - 11:30 **C-2 AKINORI KIDERA**, YOKOHAMA CITY UNIVERSITY, Japan  
Protein Dynamics viewed from the Normal Mode Picture
- 11:30 - 12:30 **C-3 JACK. F. DOUGLAS** NIST, USA  
Dynamic Entropy as a Measure of Caging and Persistent Particle Motion in Glass-Forming Liquids
- Lunch
- Chairman **W. S. Koon** (Caltech.)
- 14:15 - 15:15 **C-4 AKIRA SHUDO** TOKYO METROPOLITAN UNIV, Japan  
Slow relaxation in Hamiltonian systems with internal degrees of freedom
- 15:15 - 15:30 Coffee Break
- 15:30 - 16:30 **C-5 SHINJI SAITO** NAGOYA UNIVERSITY, Japan  
Theoretical study of nonresonant two-dimensional fifth-order Raman spectroscopy of Liquids
- 16:30 - 18:30 Poster Session II

Wednesday, October 29, 2003

- Chairman **J. Straub**(Boston Univ. )
- 09:00 - 10:00 **D-1 (Overview and Discussant) R. STEPHEN BERRY**  
UNIVERSITY OF CHICAGO, USA;  
Atomic Clusters: Powerful Tools to Probe Complexity
- 10:00 - 10:30 Coffee Break
- 10:30 - 11:30 **D-2 NORIHIRO SHIDA**, NAGOYA INST. TECH., Japan  
The Phase Transition of Lennard-Jones Cluster Molecules
- 11:30 - 11:50 **Group Photo**
- Lunch
- 13:30 - 18:00 Excursions, Ginkakuji-Temple and Nanzenji Temple via Philosopher Road
- 18:00 - 20:00 **Banquet** (Kyodai-Kaikan)

Thursday, October 30, 2003

Chairman **T. Uzer** (Georgia Inst. Tech.)

- 09:00 - 10:00 **E-1 YOJI AIZAWA** WASEDA UNIVERSITY, Japan  
Multi-ergodicity and Non-stationarity in Nearly Interable Hamiltonian Systems -Kinetic Laws of cluster formation -
- 10:00 - 10:30 Coffee Break
- 10:30 - 11:30 **E-2 CHARLES JAFFE** WEST VIRGINIA UNIVERSITY, USA  
The construction and quatization of transition states for atomic and molecular systems having more than three or more degrees of freedom
- 11:30 - 12:30 **E-3 DAVE. S. BROOMHEAD** UNIVERSITY OF MANCHESTER, UK  
Observing Randomly Forced Chemical Networks

Lunch

Chairman **Dave S. Broomhead** (Univ. Manchester)

- 14:15 - 15:15 **E-4 HIROSHI H. HASEGAWA** IBARAKI UNIVERSITY, Japan  
Inductive Thermodynamics from Time Series Analysis
- 15:15 - 15:30 Coffee Break
- 15:30 - 16:30 **E-5 YOSHIHIRO TAGUCHI** CHUO UNIVERSITY, Japan  
Nonmetric Multidimensional Scaling as a Data Mining Tool -Conventional Method Applied to New Targets-
- 16:30 - 18:30 Poster session III

Friday, October 31, 2003

Chairman **C. Jaffe** (West Virginia Univ.)

- 09:00 - 10:00 **F-1 LAURENT WIESENFELD** UNIVERSITY JOSEPH-FOURIER, France  
Untable equilibra and transition states with angular momenta
- 10:00 - 10:30 Coffee Break
- 10:30 - 11:30 **F-2 YASUSHI SHIMIZU AND TAIZO KOBAYASHI** RITSUMEIKAN UNIVERSITY, Japan  
Rapid alloying in binary clusters: Microcluster as dynamical material
- 11:30 - 12:30 **F-3 ANGELO VULPIANI** UNIVERSITA DI ROMA, Italy  
The Role of Chaotic Advection and Turbulence for Front Propagation

Lunch

Chairman **Angelo Vulpiani** (Univ. Roma)

- 14:15 - 15:15 **F-4 (Overview and Discussant) KUNIIHIKO KANEKO** UNIVERSITY OF TOKYO, Japan  
Dynamical Systems Studies Inspired by Biology, and Characteristics of Biological Processes as High-dimensional Dynamical Systems
- 15:15 - 15:30 Coffee Break
- 15:30 - 16:30 **F-5 YOSHIYUKI Y. YAMAGUCHI** KYOTO UNIVERSITY, Japan  
Relaxation and Diffusion in a Globally Coupled Hamiltonian System
- 16:30 - 18:30 Poster session IV

Saturday, November 1, 2003

- Chairman **Mitsusada Sano** (Kyoto Univ.)
- 09:00 - 10:00 **G-1 GREGORY EZRA** CORNELL UNIVERSITY, USA  
Geometry of non-Hamiltonian Systems
- 10:00 - 10:30 Coffee Break
- 10:30 - 11:30 **G-2 MARC JOYEUX** UNIVERSITY JOSEPH-FOURIER, France  
The dynamics of isomerization and dissociation reactions
- 11:30 - 11:45 Coffee Break
- 11:45 - 12:00 **Poster Award Ceremony**
- 12:00 - 13:00 **R. STEPHEN BERRY, STUART A. RICE AND MIKITO TODA**  
PERSPECTIVES
- 13:00 End of Symposium
- 14:00 - 18:00 We will organize excursions in Kyoto (or Nara) for participants who are interested.

## Poster session

The odd numbered papers are presented in Poster Sessions I & III and the even numbered papers are presented in Poster Sessions II&IV.

- |     |   |  |
|-----|---|--|
| P1  | <b>AKINORI AWAZU</b><br>UNIVERSITY OF TOKYO         | Is relaxation to equilibrium hindered by transient dissipative structure in a closed system?<br>by Akinori Awazu and Kunihiko Kaneko   |
| P2  | <b>LINTAO BU</b><br>BOSTON UNIVERSITY               | Vibrational energy relaxation of "tailored" hemes in myoglobin following ligand photolysis supports energy funneling mechanism of heme "cooling" by Lintao Bu and John E. Straub |
| P3  | <b>NARK NYUL CHOI</b><br>KUMOH NATIONAL UNIV.       | Electron-positive helium ion scattering as a three-body Coulomb problem  |
| P4  | <b>SOTARO FUCHIGAMI</b><br>ACT-JST(KOBE UNIVERSITY) | Nonadiabatic Dynamics of the Classical Hydrogen Molecular Ion H <sub>2</sub> <sup>+</sup><br>by Sotaro Fuchigami and Kiyohiko Someda   |
| P5  | <b>KOICHI FUJIMOTO</b><br>UNIVERSITY OF TOKYO       | Self-organization of time scale hierarchy<br>by Koichi Fujimoto and Masashi Tachikawa  |
| P6  | <b>HIROSHI FUJISAKI</b><br>BOSTON UNIVERSITY        | Dynamical studies on the vibrational energy relaxation of the CD bond in cytochrome c<br>by Hiroshi Fujisaki, Lintao Bu, and John E. Straub                                      |
| P7  | <b>SHINICHIRO GOTO</b><br>KYOTO UNIVERSITY          | Liouville Operator Approach to Symplecticity-Preserving Renormalization Group Method   |
| P8  | <b>SEIICHIRO HONJO</b><br>UNIVERSITY OF TOKYO       | Is Arnold diffusion relevant to global diffusion?  |
| P9  | <b>KOJI HOTTA</b><br>UNIVERSITY OF TOKYO            | Semiclassical quantization of chaos in terms of an amplitude-free quasi-correlation function   |
| P10 | <b>KIM HYEON-DEUK</b><br>KYOTO UNIVERSITY           | Contributions of Heat Conduction to the Rate of Chemical Reaction  |
| P11 | <b>YOUHEI KOYAMA</b><br>UNIVERSITY OF TOKYO         | Dynamical coherence and solvation effect on the state transitions of a peptide molecule<br>by Youhei Koyama and Mitsunori Takano   |
| P12 | <b>KAZUO KUWATA</b><br>GIFU UNIVERSITY              | Protein Zeta   |
| P13 | <b>YASUHIRO MATSUNAGA</b><br>KOBE UNIVERSITY        | Extracting Dynamical Information about Protein Folding from Time Series Analysis<br>by Y. Matsunaga, K.S. Kostov and T. Komatsuzaki  |

- P14 TAKU MIZUKAMI** Rate constant polymorphism observed in protein kinetic measurements  
JAPAN ADV. INST. SCI. & TECH.
- P15 HIDETOSHI MORITA** Self-Organized Bottleneck in Energy Relaxation  
UNIVERSITY OF TOKYO
- P16 TERUAKI OKUSHIMA** Finite-time Lyapunov exponents in many-dimensional dynamical systems  
TOKYO METROPOLITAN UNIV
- P17 MASA-AKI B. SAKAGAMI** Quasi-equilibrium of self-gravitating N-body systems  
KYOTO UNIVERSITY
- P18 MITSUSADA M. SANO** Mass Ratio Effect in Classical Coulomb Three-Body Problem  
KYOTO UNIVERSITY
- P19 TATSUO SHIBATA** Fluctuating reaction rates and noise in genetic networks  
HIROSHIMA UNIVERSITY
- P20 KIN'YA TAKAHASHI** Classical mechanism of multi-dimensional barrier tunneling  
KYUSHU INST. TECH.
- P21 TOSHIYA TAKAMI** The role of stochasticity in controlling quantum systems  
INST. MOL. SCI. by Toshiya Takami, Hiroshi Fujisaki, and Takayuki Miyadera
- P22 MITSUNORI TAKANO** Mechano-chemical coupling of a molecular motor system studied by non-equilibrium molecular dynamics simulations  
UNIVERSITY OF TOKYO
- P23 HIROSHI TERAMOTO** The role of "light" modes in structural transition of polymer  
UNIVERSITY OF TOKYO
- P24 TAKEFUMI YAMASHITA** Regularity in highly excited vibrational dynamics of NOCI: Quantum mechanical calculation on a new potential energy surface  
KYOTO UNIVERSITY
- P25 TOMOHIRO YANAO** Effects of an intrinsic metric of internal space in structural isomerization dynamics of clusters  
NAGOYA UNIVERSITY by Tomohiro Yanao and Kazuo Takatsuka
- P26 MASATO NAKAMURA** A Classical Sudden Model for Rotational and Vibrational Excitations in Ion-Molecule collisions  
NIHON UNIVERSITY by Atsushi Ichimura and Masato Nakamura