

非線形シュレジンガー方程式系のセンターマニフォールドについて

筑波大学物質工学系 金野 秀敏 (Konno Hidetoshi)

1. はじめに

非線形シュレジンガー方程式は様々な物理系を表現する方程式に通減摂動法を適用する事により導出され、非線形のスケルトン的な性質を有していると期待される。この様な簡単な非線形シュレジンガー方程式に様々な摂動が加わった場合でも、

$$i\phi_t + (1/2)\phi_{xx} + |\phi|^2\phi = -i\epsilon \Gamma(\phi, \phi_x, \dots) \quad (1)$$

右辺の摂動 Γ の強度及び種類により様々な時空パターンが期待される。

相加性外力の存在する場合の空間1次元の研究は量子系で小西と和達 [1] (1985)、古典系で野崎と戸次 [2, 3] (1985, 1986)、その他多くの研究があるが (1) 共鳴による分裂等の詳細な性質; (2) 輻射発生の物理的原因とその法則; (3) ソリトンの局在の物理的な仕掛; (4) 局在ソリトンの生成消滅の確率統計法則等必ずしもよくわかっていない。本論では、非線形シュレジンガー方程式系の比較的摂動が小さな場合について量子力学のシュレジンガー方程式

$$i\phi_t + (1/2)\phi_{xx} - V(x)\phi = 0 \quad (2)$$

との対応で数値計算結果の定性的な解釈を試みた結果を報告する。

2. シュレジンガー波束の運動 — コヒーレント状態とスクーイーゾド状態 —

容易に理解されるように、摂動 Γ が存在しない場合シュレジンガー方程式(1)は

量子力学のシュレジンガー波束(2)と次の様な対応関係がある。

$$V(x) = - |\phi|^2 \quad (3)$$

ポテンシャルが調和ポテンシャルの場合 $V(x) = (1/2)x^2$ のシュレジンガー波束は次に示すように初期波形に依存して様々な運動を行う。初期波形及び解を

$$\phi(x, 0) = \exp(a'x^2 + b'x + c') \quad (4)$$

$$\phi(x, t) = \exp(a(t)x^2 + b(t)x + c(t)) \quad (5)$$

と同様な形を仮定すれば、複素係数 a, b, c は時間の関数となり、次の常微分方程式に従う。

$$da/dt = (1/2)(4a^2 - \alpha) \quad (6a)$$

$$db/dt = 2ab \quad (6b)$$

$$dc/dt = (1/2)(b^2 + 2a) \quad (6c)$$

この連立常微分方程式は厳密に解けて、時間発展は完全に解析的に求まる。なぜなら、(6a)式は a のみの関数であり変数分離法で解け、その解を(6b)及び(6c)に代入して a, b, c 全ての解を得る。この事を最初に示した[5]のは伏見康治氏であろう。

波束の様子を示すと図1-3の様になる。初期波束が中心零、分散1のガウウシアン波束の場合、波束の形は変わらない(図1)が、分散がこれよりも大きい、あるいは小さい値をとれば(図2)あるいは波束の中心がポテンシャルの底からはずれると(図3)波束は脈動する。

波束の形を変えないで運動する状態は量子力学あるいは量子光学ではコヒーレント状態 $|\alpha\rangle$ と呼ばれている。調和ポテンシャルの場合の基底状態の波束はコヒーレント状態の1つであるが、これは特殊な場合であり、一般には次の関係を満たす系の固有状態の無限個の重ね合わせで表される；

$$|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} C_n(\alpha) |n\rangle$$

但し、 $|C_n|^2 = \exp(-|\alpha|^2) |\alpha|^{2n} / n!$

がコヒーレント状態である。

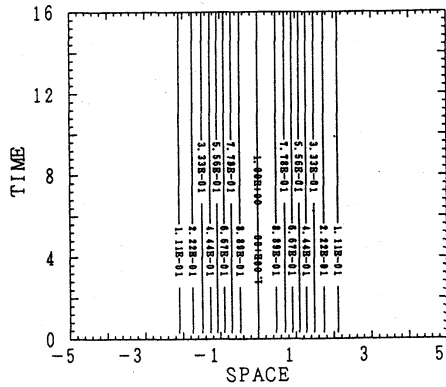


図1 コヒーレント状態の波束の時間発展

初期波形 $\phi(x, 0) = \exp(-x^2)$

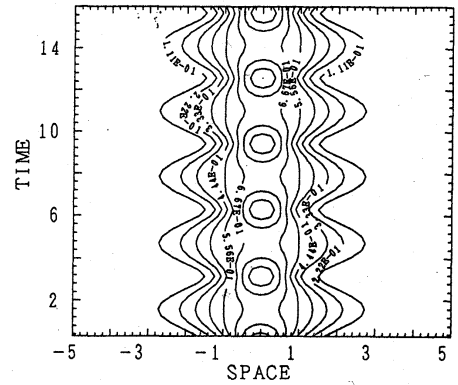


図2 脈動状態の波動関数の時間発展

圧縮状態が周期的に現れる

初期波形 $\phi(x, 0) = \exp(-ax^2)$ ($a < 1$)

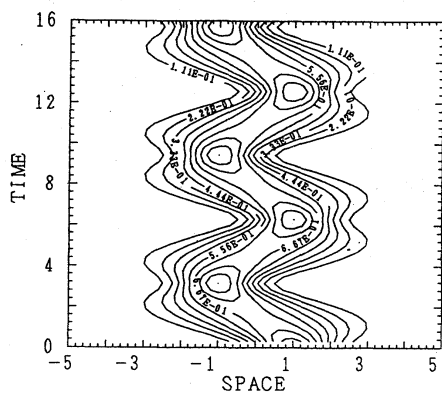


図3 脈動状態の波動関数の時間発展

初期波形 $\phi(x, 0) = \exp\{-(x-1)^2\}$

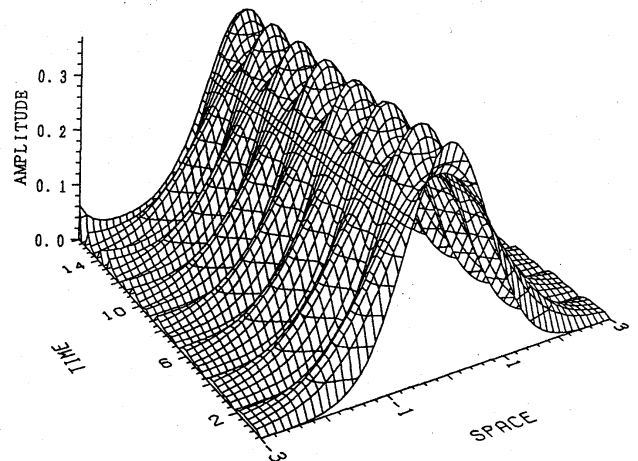


図4 (9)式から構成したアトラクタの時間発展

の一例 (初期波形はガウシアンとした)

一方、振幅変調（脈動）状態では圧縮状態（Squeezed State）が現れる。この圧縮状態は、不確定性関係で言えば、位置の不確定性が小さくなった分を運動エネルギーの不確定性に押し込めた状態であり、外力が存在しない場合でも初期波束に依存して出現する。もちろん、調和ポテンシャルではポテンシャルの係数が時間に依存して sinusoidal に変化しても適当な座標変換を行えば外力の時間変動が見かけ上ない系に移る事が出来る。即ち、調和ポテンシャル中での波束の運動はビートを打ち複雑になるように見えても時間的には周期的変化のみ現れる。

それでは、非調和ポテンシャルの場合はどうであろうか？ 非調和ポテンシャルでも固有関数、固有エネルギーが定まるので固有状態に対応する純粋状態が選択されれば波束の運動は周期的になる事が期待される。しかし、任意の初期波束を選択した場合、純粋状態が選択される確率は非常に小さくなる事が期待される。非調和ポテンシャルの場合、そのエネルギー固有値は調和ポテンシャル中でのそれのように基底状態の整数倍にはならない。従って、任意の波束から出発した場合、固有状態の無限個の重ね合わせからなる系の波動関数の時間変化の周期は擬（概）周期的、あるいは準周期的になる確率が圧倒的に大きい事が期待される。

調和ポテンシャルや井戸型ポテンシャルが非常に特殊であり一般の非線形ポテンシャルではエネルギースペクトル（固有値のスペクトル）は一般にお互いに整数倍のきれいな関係にならない。実際、最も簡単な非線形ポテンシャルである三角ポテンシャル等の非線形ポテンシャル中での波束の運動は一般にビートを打ち「擬周期的 or 概周期的」運動を行っている。「擬周期 or 概周期的運動」は必ずしもイコール「カオス」を意味しないが、ビート及び擬周期、概周期運動は非線形ポテン

シャルを有する量子系にも内在しうる点をまず強調したい。

3. 量子力学とのアナロジー

非線形シュレジンガー方程式の場合、上に述べた線形の量子力学との対応で言うところの N ソリトンはどのように対応付けられるのだろうか？ 1 ソリトン解は (i) 波束の半値幅は時間的に変化せず (ii) 不確定性最小の状態であり、コヒーレント状態とみなす事が出来る。一方、 $N (\geq 2)$ ソリトン解は (i) 波束の半値幅は時間的に変化し (即ち、ビートを打ち)、(ii) 圧縮状態が出現しているとみなせる。圧縮状態では、線形のシュレジンガー方程式 (2) の場合と同様、位置の不確定性 Δx が減少した分だけ、運動量の不確定性 Δp が増大していると解釈出来る。このような量子論とのアナロジーをあとで数値計算結果の解釈に使おう。

量子系との本質的な違いは、外場が印可された場合に特に顕著となり場が非線形である故に状況は大きく変化する点であろう。即ち、調和ポテンシャル中の波束の運動では、sinusoidal に時間変化する項が付け加わっても線形系の特殊性からビートの様相に本質的違いが現れなかったが、非線形シュレジンガー方程式では、外場が非線形系共鳴を通じて新たなモードを励起しビートの様相を大きく変える可能性がある。外場の存在により、系は非可積分となるその際もソリトンは一つの非線形モードたりうる。輻射は小さい振幅の線形波である。ソリトンと輻射の区別が付かない程度の振幅を持った波動が複雑な振舞いをする系では重要となる。

4. センターマニフォールド方程式

非線形シュレジンガー方程式系のセンターマニフォールド方程式の考察から始めよう。非線形シュレジンガー方程式に正弦波と散逸を導入した場合、

$$-i\epsilon\Gamma = -i\epsilon \exp(i\omega t) - i\gamma\phi \quad (7)$$

(i) ソリトンの励起が依然としてアトラクタの役割を果たしている事; (ii) 輻射とソリトンの2次の相互作用がこの系のカオスの発生に本質的に重要な役割を果たしている事が示されてきた[2, 3]。

散逸係数が時間的に変動する場合、即ち、時間的に振動する正弦波を相乗的に加えた場合[4]、 $-i\epsilon\Gamma = -i\Gamma_0 \sin(\omega t)\phi$ (8)

センターマニフォールドはどの様になるのだろうか? そして、一見、カオス的波形と見なせる数値計算結果はどの様に解釈出来るのだろうか? (1) 式の解の形を量子力学の問題(2)を解く時に仮定した(5)式に習って

$$\begin{aligned} \psi(x, t) = & \exp(a(t)x^2 + b(t)x + c(t) + d(t)x^3 + e(t)x^4 \\ & + f(t)x^5 + g(t)x^6 + \dots) \end{aligned} \quad (9)$$

と置くと、 $a, b, c, d, e, f, g, \dots$ に関する連立常微分方程式を得る。この連立常微分方程式は解析的には解けないが、通常のフーリエ級数展開に比べるとはるかに少ない項数で元の関数を近似可能となると期待される。

(9) 式の仮定は、ソリトンの励起が依然アトラクタの役割を果たしている事を暗黙に想定している。この形式的展開は輻射の物理的な効果を陽に扱っていないが、その効果も拾っている。この様にして構成したソリトンによるアトラクタは(9)式のべきの項数が少ないと、また、エネルギーの供給なしでは $t \rightarrow \infty$ で減衰する。エネルギー供給のもとでの定常的振動の様子の数値計算結果を図4に示すが概周期性が観察される。

量子系の非線形ポテンシャル中での波束の運動との対応関係を考えよう。非線

形シュレジンガー方程式系は次の様にして高次の非線形ポテンシャル中での波束の運動と形式的対応が付けられる。

(9) 式で簡単のために指数関数の肩のべき級数を6次までで止めると

$$\begin{aligned}
 V(x) = -|\phi|^2 = & -1 - 2b_r x - (2a_r + 2b_r^2) x^2 - (4a_r b_r + 4b_r/3 + 2d_r) x^3 \\
 & - (2a_r^2 + 4a_r b_r^2 + 2b_r^4/3 + 4b_r d_r + 2e_r) x^4 - (4a_r^2 b_r + 8a_r b_r^3/3 + 4a_r d_r \\
 & + 4b_r^2 d_r + 4b_r e_r + 2f_r) x^5 - (4a_r^3/3 + 4a_r^2 b_r^2 + 8a_r b_r d_r + 4a_r e_r + 8b_r^3 d_r \\
 & + 4b_r^2 e_r + 2d_r^2 + 4b_r f_r + 2g_r) x^6
 \end{aligned} \tag{10}$$

となる。この数学的対応の観点からすると、非線形シュレジンガー方程式に従がう波束も非調和ポテンシャル中の波束の運動と対応付けられ、前者で予想された概周期運動（固有値の集合の性質に由来した）は、後者でもその存在が予想出来る。

(8) 式で表現される場 $\phi(x, t)$ に対してパラメトリックな摂動が存在する場合の非線形シュレジンガー方程式を変数変換して(2)式の型に書き直す事も容易に

$$\text{出来る;} \quad iu_t + (1/2)u_{xx} + |q(t)|^2 |u|^2 u = 0 \tag{11a}$$

$$q(t) = \exp\{ \Gamma_0 (\cos \omega t - 1) / \omega \} \tag{11b}$$

摂動(8)が存在する場合のシュレジンガー波束の実効ポテンシャルは時間に依存する事となり $V(x) = -q(t)^2 |u|^2$ と表現される。

近年、量子カオスで問題になってきた簡単な系の一つは次の様な外場の存在下での非線形ポテンシャル中での波動関数の時空発展

$$i\phi_t + (1/2)\phi_{xx} - V(x)\phi - x\eta(t)\phi = 0 \tag{12a}$$

$$\text{但し、} \quad V(x) = (\alpha/2)x^2 + (\beta/4)x^4, \quad \eta(t) = \eta_0 \cos \omega t \tag{12b}$$

である。これにガリレイ変換とゲージ変換を施せば、次の形に変換される。

$$i\phi_t + (1/2)\phi_{xx} + V(X-m(t))\phi = 0 \quad (13a)$$

$$X = x + m(t), \quad m(t) = \int_0^t dt' \int_0^{t'} ds \eta(s) \quad (13b)$$

この様にポテンシャルが時間的に変動する場合の波束の運動の問題に帰着される。量子系の場合”対応する古典系で「カオスになっている」場合でも量子系では「カオスになっていない」と言うのが結論であるが、自由度の大きな系での乱れの発生に関する注意深い考察が必要であろう。古典カオスと量子カオスの対応は Gutzwiller [6]の教科書等に詳しく述べられている。

初めから(8)式のパラメトリックな摂動に対する(1)式の解を次の形に仮定すれば

$$\phi(x,t) = K(t) \operatorname{sech}\{K(t)x\} \exp\left\{i \int_0^t K(t')^2 dt'\right\} \quad (14a)$$

$$K(t) = 2\eta \exp\{2\Gamma_0 (\cos\omega t - 1)/\omega\} \quad (14b)$$

が得られる。これは完全に周期的な運動を与える。数値計算による概周期的振動をするソリトンのアトラクタの様子を図5に示すが、外場強度が比較的弱い場合でも輻射の効果はソリトンの振幅変調の概準周期的振動とビートに無視出来ない影響を与えている事が観察される。

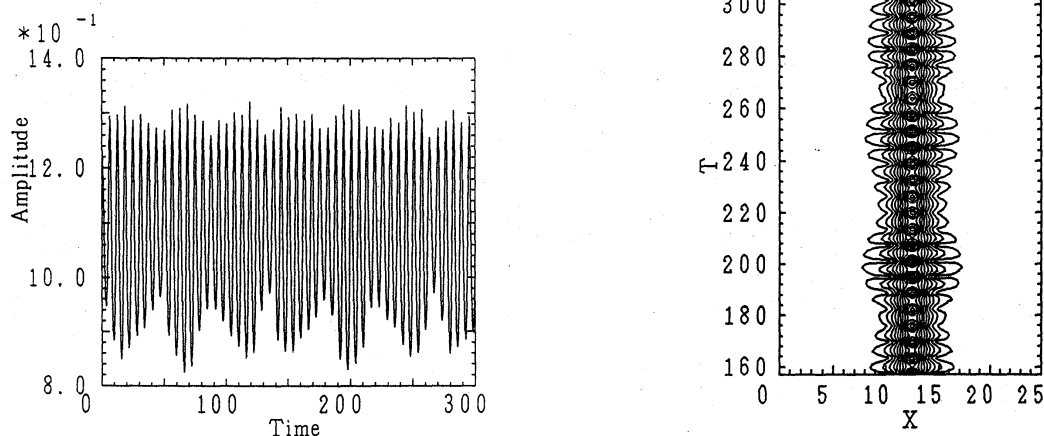


図5 $\Gamma_0 = 0.058$ の場合のソリトンの運動とソリトンの中心の時間発展の様子

初期波形 1 ソリトン、振幅 $\eta = (\sqrt{5} - 1)/2$

5. ランダムネスの原因と輻射

輻射の発生が外場強度と供にどの様に変化してゆくかみてみよう。数値計算によれば、輻射の発生は(7)及び(8)の異なる種類の摂動でも定性的には同様とみなされるので、(8)の場合の結果を示す。図6(a)及び(b)には $\Gamma_0 = 0.058$ 及び $\Gamma_0 = 0.0585$ の場合のソリトンの周りの輻射の様子を比較のために示した。これは、 $T = 565.5$ 秒から $\Delta t = \pi/100$ おきの波形を10コマ重ねて描いたものである。 $T = 630$ 秒までの計算の範囲内ではソリトンの分裂現象は発生しないが、外場の強度の増大に伴って輻射の振幅も増大する。縦軸のスケールは輻射の波形が見やすいように10倍した。また、ソリトンの裾の部分には2ソリトンの様な波形の変調が現れている事にも注意。この様子は時間発展の数値計算誤差を極力抑えても変わらない。

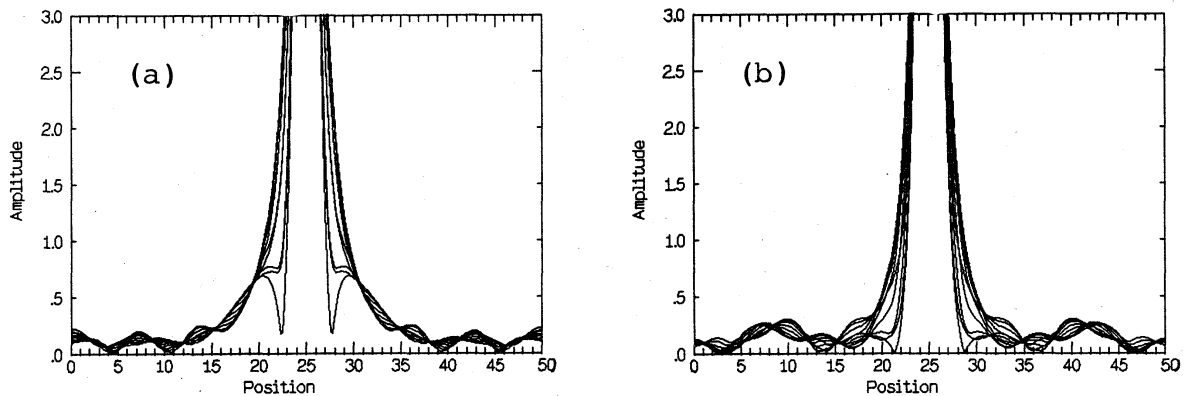


図6 輻射のプロファイルの外場強度による変化の様子 (a) $\Gamma_0 = 0.058$ (b) $\Gamma_0 = 0.0585$ 但し、初期波形1ソリトン、振幅 $\eta = (\sqrt{5} - 1)/2$ 。

6. 輻射とソリトンの減衰

上記の考察をさらに進めて外場による励起が大きな場合を考えてみよう。1ソリトン解を初期波形にとった時のソリトンの振幅は輻射の存在により著しく減衰す

る。われわれは、空間 x 方向は周期的境界条件を用いているから輻射が壁に反射して戻って来る状況を考えている事に等しい。従って、無限に広い媒質におけるソリトンの存在形態よりもっと複雑な事が起こる事が予想される。この点に注意しながら、輻射に関する考察を進めよう。

図7 (a), (b)にはかなり強いパラメトリックな外場の励起が存在する場合、初期波形として1ソリトンを置いた場合の様子を示した。外場の印可によりソリトンとして局在していたエネルギーは輻射としてソリトンから放出されてゆき、ソリトンが減衰している様子がみて取れる。従って、 $t \rightarrow \infty$ では系は輻射の非平衡定常状態が実現されると期待される。系の全粒子数 N (及び、全運動量 P) は時間変化するが
$$N(t) = \int_{-\infty}^{\infty} |\phi(x, t)|^2 dx = N(0) \exp\{ 2\Gamma_0 (\cos \omega t - 1)/\omega \}$$
 まる一定値の周りで変化するにも拘らず、これは不可逆過程である。即ち、局在したソリトンはもはや安定ではありえず、また、ソリトンの存在によるアトラクタは無い。数学的にはこの系はハミルトン力学系的な特徴を備えているにも拘らず、崩壊(減衰)モードしか存在しないような状況になっている。

次に、輻射が強く発生する場所は何処であるのか観察しよう。図7 (c), (d)には ϕ の実数部を示した。輻射の存在により、等高線図及び鳥観図には斜めにすじが走っている事がわかる。輻射は圧縮状態から非圧縮状態へ遷移する際に発生している様に見える。これは不確定関係のアナロジーが成立する傍証である。

図8には外場の振幅を図7の場合と同じ値にして、初期波形を振幅の大きなソリトンとした場合の時間発展を示した。この場合は、図7で観察された小振幅の輻射の存在は見られず、ソリトンが2つの大きな輻射へと分裂する様子が見て取れる。

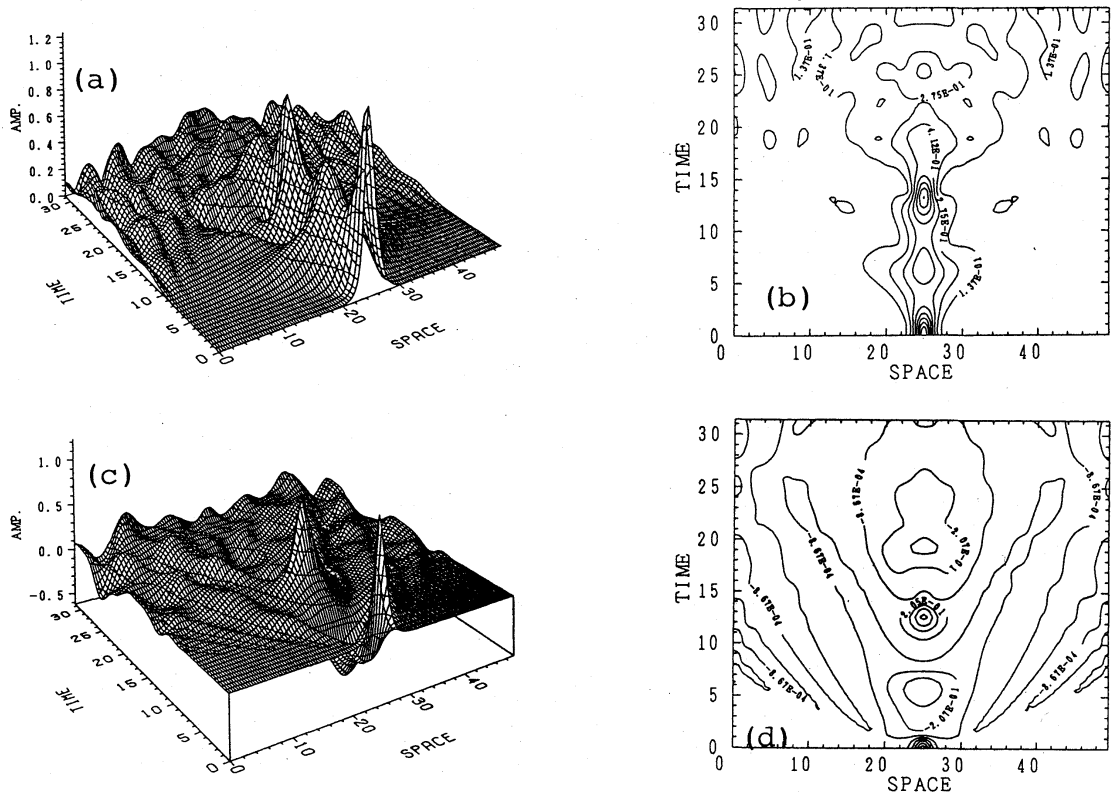


図7 (a), (b) $\Gamma_0 = 0.24$ の場合のソリトン $|\phi|$ の減衰の様子及びその
 実数部 $\text{Re}(\phi)$ の様子 (c), (d); 初期波形 1 ソリトン、振幅 $\eta = (\sqrt{5} - 1)/2$ 。

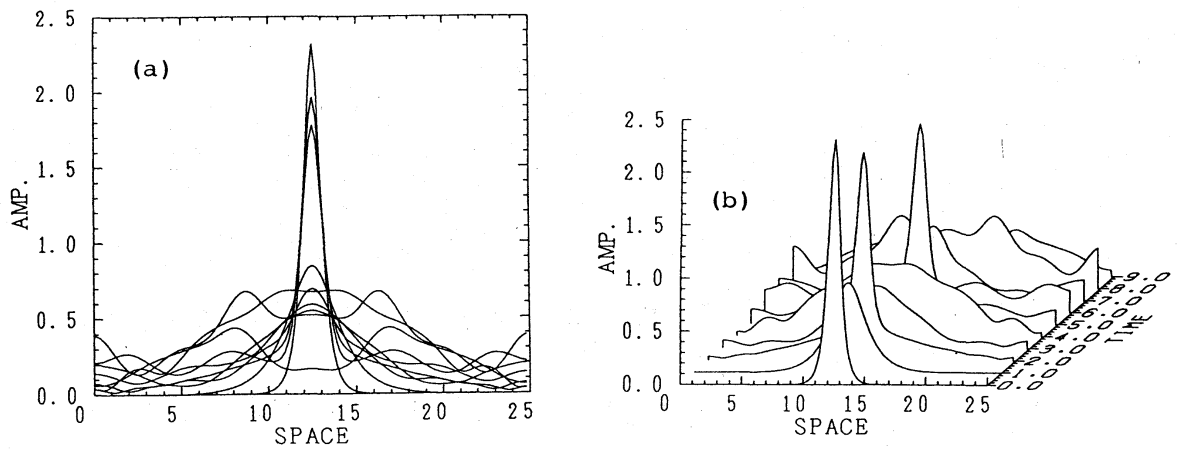


図8 (a), (b) $\Gamma_0 = 0.24$ の場合のソリトンの減衰の様子
 初期波形 1 ソリトン、振幅 $\eta = (\sqrt{11} - 1)/2$ 。

6. 結言

この報告では非線形シュレジンガー方程式系の量子力学の波動方程式との類似性に注目し、量子力学の概念を用いて数値計算結果の定性解釈を行う事を目的とした。数値的に誘導されるカオスの存在が非線形シュレジンガー方程式系等で見いだされており[7]、数値計算結果の妥当性を見極める数理物理的センスを持つ事が重要であるからである。また、不確定関係式の類推と量子カオスで用いられている定量化手法がこの系の解析にも用いられ、ある程度有効である事を確認した。しかし、輻射とソリトンの相互作用が絡んだ現象を周期的境界条件で計算しているので、特に、強い外場の励起が存在する場合の系の動的振舞いを解析しその本質を見極めるには様々な数理的な考察と実験解析的な工夫が必要である。

参考文献

- [1] T. Konishi and M. Wadati : J. Phys. Soc. Jpn. 55 (1986) 1075.
- [2] K. Nozaki and N. Bekki : J. Phys. Soc. Jpn. 54 (1985) 2363.
- [3] K. Nozaki and N. Bekki : Physica 21D (1986) 381.
- [4] A. Okamura and H. Konno : J. Phys. Soc. Jpn. 58 (1989) 1930.
- [5] K. Fushimi : Progr. Theor. Phys. 9 (1953) 381.
- [6] M. C. Gutzwiller : Chaos in Clasical and Quantum Mechanics, (1990)
Springer.
- [7] B. M. Herbst and M. J. Ablowitz : Phys. Rev. Lett. 62 (1989) 2065.