

量子力学における数理的手法の古典確率過程への応用

大久保 潤

東京大学 物性研究所

概要

細胞などのミクロな系から交通流などのマクロな系にいたるまで、さまざまな研究分野において確率的に揺らぐ系による記述が用いられる。確率的に揺らぐ系に対する研究は、これまでもさまざまな数理的手法を用いておこなわれてきた。本稿では、量子力学で用いられている数理的手法と、古典確率過程との関連性についていくつか紹介する。例えば周期的外部摂動によって駆動される流れ(ポンプ・カレント)の研究において、幾何学的位相(Berry位相, Aharonov-Anandan位相)に関する計算を応用することができる。また、化学反応系などを記述する離散的マスター方程式と、第2量子化において用いられる生成・消滅演算子を用いた表現との結びつきは、さまざまな研究の基礎として利用されている。

Applications of quantum mechanical methods to classical stochastic processes

Jun Ohkubo

Institute for Solid State Physics, University of Tokyo

Abstract

We explain some applications of quantum mechanical methods to classical stochastic processes. One example is a pump current problem. A pump current is a nonequilibrium current induced by periodic external perturbations. A concept of geometric phase, such as Berry phase and Aharonov-Anandan phase, is available to study the pump current problem. The other example is seen in a discrete master equation describing chemical reaction systems. It is known that the discrete master equation is expressed by creation and annihilation operators, which are used in quantum mechanics. The expression enables us to use various analytical techniques in quantum mechanics for the study of classical stochastic processes.

1 はじめに

近年、細胞などの小さな系に対する観測技術の発展により、揺らぎの重要性が認識されてきている [1,2]。小さな系に限らず、確率的に揺らぐ現象はさまざまなスケールにおいて見られ、その研究の歴史は古い。単純な確率過程については厳密に解くことができ、さまざまな解析計算に基づく結果が知られている。一方で、厳密に解くことが困難であるような場合には、数値実験を用いた研究をおこなう必要もある。し

かしながら、可能な限り解析的な計算を試みることで、その現象の背後に潜む数理的構造を明らかにしたり、現象の深い理解が得られることも期待される。

本稿では、量子力学で用いられる数理的手法がどのように古典確率過程の研究に応用できるのかについて、その基本的なつながりの紹介をおこなう。もちろん、古典確率過程において量子力学的効果を考えるわけではない。古典確率過程の定式化を少し変えると、量子力学と形式的な類似性を見出すことが

できる．この形式的類似性に基づき，量子力学で培われたさまざまな計算手法を古典確率過程の研究に応用することで，新しい観点からの研究の展開が可能になる．

数理的に似た構造を持っていれば数学の問題に帰着されるため，実は「量子力学」をことさらに強調する必要はない．しかし，物理系・工学系の研究者にとっては量子力学は馴染み深い（と思われる）こと，量子力学において実用的な解析手法が発展していることなどから，ここでは量子力学の数理に基づいた説明をおこなう．

2 ポンプ・カレント問題と幾何学的位相

最初の例として，幾何学的位相と呼ばれる概念と古典確率過程における非平衡状態との関連について紹介する．

ある確率過程系において，周期的な外力によって一方向の流れが生じることが実験的にも知られている [3]．この流れのことをポンプ・カレントと呼ぶ．ここでは，ポンプ・カレントを生じる単純な確率過程として，次の系を考える [4]．

$$\left[\text{L} \right] \begin{array}{c} \xrightarrow{k_{+1}} \\ \xleftarrow{k_{-1}} \end{array} \left[\text{C} \right] \begin{array}{c} \xrightarrow{k_{+2}} \\ \xleftarrow{k_{-2}} \end{array} \left[\text{R} \right]$$

[L] と [R] は巨大な粒子浴である．それらの粒子浴は [C] によってつながれており，粒子の移動が生じる．また，[C] は多くとも 1 つの粒子しか含むことができないとする．すなわち，[C] に粒子が存在する場合には，[L] と [R] のどちらからも粒子は [C] に移動できない．

もしそれぞれの粒子の移動確率 k_i が時間に依存しないとすれば，単位時間あたりに [L] から [R] へ（すなわち [C] から [R] へ）移動する粒子の平均個数は

$$j = \frac{\kappa_+ - \kappa_-}{K}, \quad K \equiv \sum_{\{m\}} k_m, \quad \kappa_{\pm} \equiv k_{\pm 1} k_{\pm 2} \quad (1)$$

で与えられる．これは [L] と [R] の化学ポテンシャル差により駆動される流れである．もし化学ポテンシャルに差がないとすると，流れは生じない．

次に， k_{+1} と k_{-2} だけが下記のように時間に依存すると仮定する．

$$k_{+1} = c + R \cos(\omega t), \quad k_{-2} = c + R \sin(\omega t), \\ k_{-1} = k_{+2} = c.$$

ここで c は定数であり， R は周期振動の大きさを表す．このとき， k_{+1} と k_{-2} は \cos (または \sin) で振動するため，移動確率が大きくなる時もあれば小さくなる時もある．よって，振動の 1 周期 T の間に生じる流れの平均を考えると，やはり流れが生じないように思えるが，実際には [C] から [R] へ向かう流れが生じる．これがポンプ・カレントである．

P_e を [C] が空である確率， P_f を [C] に 1 つ粒子が入っている確率とする．[L] と [R] は巨大であると仮定しているため，マスター方程式としては確率ベクトル $\mathbf{p}(t) = [P_e, P_f]$ を用いるのが適切である．しかし，マスター方程式の解は，移動確率 k_i の周期性に従って周期的なものとなるだけであり，そこから流れに関する情報を導きだすのは難しい．

「計数統計」という概念を用いることにより，流れの平均だけではなく，揺らぎ（高次のキュムラント）なども含むすべての統計を扱うことができる．1 周期 T の間に [C] から [R] へ n 個の粒子が移動する確率を P_n とする（例えば， P_{-5} は逆に [R] から [C] へ 5 つの粒子が移動した確率）．このとき，計数統計の概念に従って，流れに関して下記の特性関数を計算する [4–6]．

$$Z(\chi) = e^{S(\chi)} \equiv \sum_{s=-\infty}^{\infty} P_{n=s} e^{is\chi} \\ = \mathbf{1}^\dagger \hat{T} \left(e^{-\int_0^T \hat{H}(\chi, t) dt} \right) \mathbf{p}(0), \quad (2)$$

ここで，時間順序積 \hat{T} など，量子力学で用いられる記号を使用している（式の詳細については参考文献 [4–6] を参照）．行列 \hat{H} は

$$\hat{H}(\chi, t) = \begin{bmatrix} k_1 + k_2 & -k_{-1} - k_2 e^{i\chi} \\ -k_1 - k_2 e^{-i\chi} & k_{-1} + k_2 \end{bmatrix} \quad (3)$$

で与えられ，通常の遷移行列とは若干異なる（計数統計を考えているため， $e^{i\chi}$ などの因子がつく）．

ここで量子力学との類似性が出てくる． $H \equiv -i\hat{H}(\chi, t)$ という置き換えをおこなうと，式 (2) は

$$i \frac{d}{dt} |\phi(t)\rangle = H |\phi(t)\rangle \quad (4)$$

という Schrödinger 方程式と同じ形の方程式の形式解に対応している．よって，この Schrödinger 方程式を解くことにより，流れに関する特性関数を計算することができ，結果として流れに関する統計量を求めることができる．

ハミルトニアン H が周期的に変動するような場合には，幾何学的位相の概念を利用できることが知ら

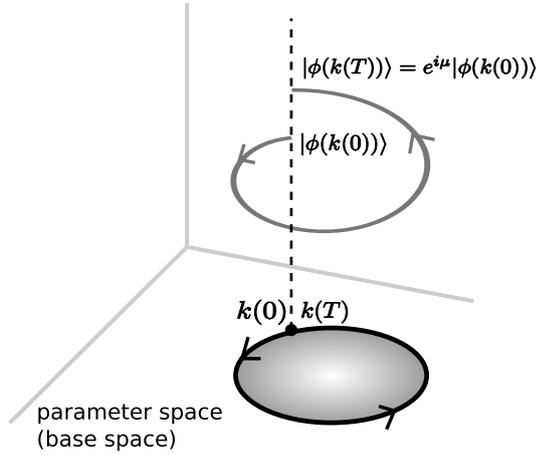


図 1: 幾何学的位相のイメージ .

れている [7] . よって , この形式的類似性により , 量子力学で用いられている幾何学的位相の議論をほぼそのまま古典確率過程の問題に適用することができる . ただし , 通常の量子力学においては , ハミルトニアン H はエルミート行列で与えられるが , 古典確率過程を考える場合には非エルミートとなる . よって , 単純に応用するだけでなく , 拡張するなどの作業は必要となる .

幾何学的位相のイメージを図 1 に示す . パラメータは , 1 周期で元に戻るが , 対応する状態 $|\phi\rangle$ には余分な位相が付く . 位相には動的位相と幾何学的位相の 2 種類あるが , 化学ポテンシャル差による流れは動的位相に , ポンプ・カレントは幾何学的位相にそれぞれ対応している . 幾何学的位相はパラメータ空間上の面積分で定義されており , このことから , 例えば時間依存するパラメータが 1 つしかない場合には , ポンプ・カレントが生じないことがすぐわかる . 時間依存パラメータが 1 つの場合には , パラメータ空間上には直線が描かれる . 直線の「面積」はゼロであるため , ポンプ・カレントは生じない .

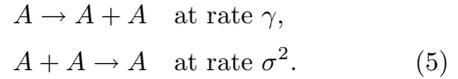
なお , マスター方程式の状態ベクトルは , 1 周期後には元の状態に戻るため , 上記のような構造を持たない . 特性関数を考えることにより , このような構造が見えてくる (ポンプ・カレントと幾何学的位相の話題に関連した review として [8] がある) .

3 離散的マスター方程式と生成・消滅演算子

本節では , 生成・消滅演算子と離散的マスター方程式との関係性について , その基礎的な事項を紹介

する .

例えば下記のような反応系を考える .



粒子 A の個数を n とすると , マスター方程式は

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}P(n, t) &= \gamma(n-1)P(n-1, t) - \gamma nP(n, t) \\ &\quad - \sigma^2 \frac{n(n-1)}{2}P(n, t) \\ &\quad + \sigma^2 \frac{(n+1)n}{2}P(n+1, t) \end{aligned} \quad (6)$$

と書かれる . このマスター方程式を量子力学で用いられる数的手法を使って書き直してみる . この手法は場の理論的手法 , 第 2 量子化法 , Fock 空間表現などさまざまな呼ばれ方をするが , 反応系の文脈では Doi-Peliti 法とも呼ばれる [9, 10] . まず , 下記のような交換関係を持つ演算子を導入する .

$$[a, a^\dagger] = 1, \quad [a, a] = [a^\dagger, a^\dagger] = 0. \quad (7)$$

ここで $[A, B] \equiv AB - BA$ であり , 上記の関係式は演算子 a と a^\dagger が非可換であることを意味している . ここで状態 $|n\rangle$ に対して , 上記の演算子は次のように作用するものとする .

$$a^\dagger|n\rangle = |n+1\rangle, \quad a|n\rangle = n|n-1\rangle. \quad (8)$$

すなわち , 演算子 a^\dagger は状態 n をひとつだけ増やし (生成演算子) , 演算子 a はひとつだけ減らす (消滅演算子) . 真空状態 $|0\rangle$ は , $a|0\rangle = 0$ として定義される . 状態 $\langle m|$ と $|n\rangle$ の内積は , Kronecker のデルタ関数 $\delta_{m,n}$ を用いて次のように定義される .

$$\langle m|n\rangle = \delta_{m,n}n!. \quad (9)$$

以上のような生成・消滅演算子は , 例えば量子力学における場の理論を扱う際などに用いられる . 量子力学に詳しい方は , 通常の生成・消滅演算子とは若干定義が異なることに気が付かれたかもしれない . これは , あくまでも考えているのは古典確率過程であることに起因する . 例えば粒子の平均個数を計算したい場合には , 状態 $|\psi(t)\rangle \equiv \sum_{n=0}^{\infty} P(n, t)|n\rangle$ と ,

$$\langle \mathcal{P} | \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \langle n | = \langle 0 | e^a \quad (10)$$

という射影状態を定義した上で , $\sum_{n=0}^{\infty} nP(n, t) = \langle \mathcal{P} | a^\dagger a | \psi(t) \rangle$ を評価する必要がある . このように通

常の量子力学とは若干の違いはあるものの，離散的マスター方程式で記述される系は，基本的には量子力学と同じような数理構造を持っている．

状態 $|\psi(t)\rangle$ は元の確率過程の確率 $P(n, t)$ を用いて定義されている．確率 $P(n, t)$ がマスター方程式に従って時間発展することに対応して，状態 $|\psi(t)\rangle$ の時間発展は

$$\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = L(a^\dagger, a)|\psi(t)\rangle \quad (11)$$

$$L(a^\dagger, a) = \gamma(a^\dagger - 1)a^\dagger a + \frac{\sigma^2}{2}(1 - a^\dagger)a^\dagger a^2 \quad (12)$$

と表すことができる．これは元のマスター方程式と等価である．以上のようにして，マスター方程式を生成・消滅演算子を用いて書き直すことができた．この書き換えにより，コヒーレント状態に基づく経路積分表示などの量子力学で用いられている手法を利用できるようになる．例えば，空間構造を有する反応系に対して，線り込み群を用いた研究などが盛んにおこなわれている [11]．また，確率過程における双対性に関する研究 [12] や，近似的な数値計算手法の研究 [13–15] などにも応用することが可能である．

4 まとめ

本稿で見たように，古典確率過程と量子力学には数理的に似た点が多々存在する．ここで紹介した以外にも，例えば交通流の問題とも密接に関係する単純排他過程 (Simple Exclusion Process, SEP) には，量子スピン系の表記を利用できることが知られている [16]．数理的に類似な形を見出すことができれば，量子であるか古典であるかは関係なく，単なる数学の問題に帰着する．量子力学においては，厳密，及び近似的な取り扱いの各種手法が発展している．若干の修正は必要となるものの，基本的にはそれらを古典確率過程の問題に応用することができる．見通しよく研究を進めるといふ点において，量子力学で培われた技術をすぐに使えるという強みは大きい．

古典確率過程の中には，まだこのような量子力学 (や他の分野) との類似が成立するものが隠れているだろう．このような類似性を発見しつつ，古典確率過程に関して数理的に深い理解を得ることが，非平衡系の研究に役立つと期待される．

参考文献

[1] C. V. Rao, D. M. Wolf, and A. P. Arkin, *Nature* **420**, 231 (2002).

[2] M. B. Elowitz, A. J. Levine, E. D. Siggia, and P. S. Swain, *Science* **297**, 1183 (2002).

[3] D. S. Liu, R. D. Astumian, and T. Y. Tsong, *J. Biol. Chem.* **265**, 7260 (1990).

[4] N. A. Sinitsyn and I. Nemenman, *Europhys. Lett.* **77**, 58001 (2007).

[5] J. Ohkubo, *J. Stat. Mech.*, P02011 (2008).

[6] J. Ohkubo, *J. Chem. Phys.* **129**, 205102 (2008).

[7] A. Borm, A. Mostafazadeh, H. Koizumi, Q. Niu, and J. Zwanziger, *The Geometric Phase in Quantum Systems* (Springer-Verlag, Berlin, 2003).

[8] N. A. Sinitsyn, *J. Phys. A: Math. Gen.* **42**, 193001 (2009).

[9] M. Doi, *J. Phys. A: Math. Gen.* **9**, 1465 (1976); *ibid.* **9**, 1479 (1976).

[10] L. Peliti, *J. Physique* **46**, 1469 (1985).

[11] U. C. Täuber, M. Howard, and B. P. Vollmayr-Lee, *J. Phys. A: Math. Gen.* **38**, R79 (2005).

[12] J. Ohkubo, arXiv:0909.5290.

[13] M. Sasai and P. G. Wolynes, *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **100**, 2374 (2003).

[14] J. Ohkubo, *J. Stat. Mech.*, P09017 (2007).

[15] J. Ohkubo, *J. Chem. Phys.* **129**, 044108 (2008).

[16] G. M. Schütz, *Exactly solvable models for many-body systems far from equilibrium in Phase transitions and critical phenomena Vol. 19*, edited by C. Domb and J. Lebowitz (Academic Press, London, 2000)