マスター方程式の離散幾何学 — 拡散方程式の厳密な導出 —

後藤振一郎, 日野英逸

情報 · システム研究機構 統計数理研究所

概要

非平衡統計力学で標準的に用いられるマスター方程式を離散幾何学を用いて定式化を提案する. この定式化により, 詳細釣り合い条件を満たす場合において離散拡散方程式が近似なしで得られることを示す. この定式化ではマスター方程式をグラフ上の力学系とみなし, 頂点や辺の上の関数間に内積を導入する. その内積を適切に選ぶことにより, マスター方程式に適合した頂点や辺上の関数に作用するラプラシアンが定義される. 例として単純化した動的イジング模型に対応する拡散方程式を導出する. また, これらのラプラシアンのいわゆる超対称性についても言及する.

Discrete geometry of master equations — Rigourous derivation of diffusion equations—

Shin-itiro Goto, Hideitsu Hino

The Institute of Statistical Mathematics

Abstract

In this paper a discrete geometric formulation is proposed for master equations employed in nonequilibrium statistical mechanics. It is then shown that discrete diffusion equations are obtained without any approximation for the case that the detailed balance conditions hold. In this formulation master equations are regarded as dynamical systems on graphs, and inner products for functions on vertexes and edges are introduced. By choosing inner products appropriately, Laplacians adopted in this framwork are defined. As an example diffusion equations for a simplified kinetic Ising model are derived. The so-called supersymmetry of these Laplacians is also argued.

1 はじめに

マスター方程式は分布関数の時間発展を記述し, 非平衡統計力学で頻繁に用いられる [1]. 線形方程式であるため数学的にシンプルであり, 古典物理の研究のみならず, モンテカルロ法や, 量子系にも用いられるため, 現在もなおその基礎に関する研究や応用の探索が続いている.

代数トポロジーは数学のみならず, 数理工学にも使われる. 更に代数トポロジーや関数解析などを組み込んだ離散幾何学と呼ばれる数学が整備され [2], 現在までに, ランダムウォーク, 電気回路にも応用され, マスター方程式への応用も期待される.

内積をグラフ上の関数に導入すると演算子の共役演算子が定義され, ラプラシアンが自己共役演算子として定義できる. ラプラシアンの有用性は, 関数解析やその理論物理で既に知られており, マスター方程式での役割を調べることは自然であろう. 拡散方程式はある近似や極限でマスター方程式から得られるが, いつ拡散方程式が得られるか知ることは重要であろう. 何故なら, 拡散方程式は数学でよく知られており, 様々な性質がわかっているからである.

本稿ではマスター方程式を離散幾何学により記述

する. ここで状態と遷移確率は代数トポロジーで定義される鎖を用いて書かれる. 幾つかの定義を与えたのち, 以下を示す：

主張. どのマスター方程式も連続方程式の形で書かれる (定理 3.1).

主張. 詳細釣り合い条件を満たすマスター方程式は離散拡散方程式と等価である (定理 3.2).

なお, 本稿の内容の詳細は [3] を参照して頂きたい.

2 準備

グラフ G をペア $G=(V,E)$ とする. ここで V は頂点集合,E は辺集合とする. 本稿を通して, グラフは (i) 連結, (ii) 向き付けされており,(iii) 有限 $(\#E<\infty)$, かつ,(iv) ループ辺を許し, (v) 平行辺は存在しない, とする. 本稿での演算子やその表記の殆どは文献 [2] に従う.

与えられた辺 $e\in E$ に対して, その**逆**, **終点**, **始点**をそれぞれ $\overline{e}$, $\mathrm{t}(e)$, $\mathrm{o}(e)$ と表す. これらの間に $\mathrm{t}(\overline{e})=\mathrm{o}(e)$, $\mathrm{o}(\overline{e})=\mathrm{t}(e)$ 等の関係が成立する：

$$\underset{\mathrm{o}(e)}{\bullet}\xrightarrow[e]{\qquad}\underset{\mathrm{t}(e)}{\bullet}\ ,\qquad\qquad \underset{\mathrm{t}(\overline{e})}{\bullet}\xleftarrow[\overline{e}]{\qquad}\underset{\mathrm{o}(\overline{e})}{\bullet}\ .$$

ループ辺 $e\in E$ とは $\mathrm{o}(e)=\mathrm{t}(e)$ なる関係を有する辺であり, **平行辺** $e_1,e_2\in E(e_1\neq e_2)$ とは $\mathrm{o}(e_1)=\mathrm{o}(e_2)$ かつ $\mathrm{t}(e_1)=\mathrm{t}(e_2)$ を満たす辺である. グラフ $G=(V,E)$ の $\mathbb{R}$ 係数の **0-鎖**の群や **1-鎖**の群を

$$C_0(G):=\left\{\sum_{x\in V}a_x x\,\middle|\,a_x\in\mathbb{R}\right\},$$

$$C_1(G):=\left\{\sum_{e\in E}a_e e\,\middle|\,a_e\in\mathbb{R}\right\},$$

とし, その上の関数をそれぞれ

$$C^0(G):=\{\,f:V\to\mathbb{R}\,\},\ C^1(G):=\{\,\omega:E\to\mathbb{R}\,\},$$

と表す.$C^0(G)$ は $\Lambda^0(G)$ とも書くことにし, $C^1(G)$ の部分集合を以下のように定義しておく：

$$\Lambda^1(G):=\{\omega\in C^1(G)\,|\,\omega(\overline{e})=-\omega(e)\},$$

$$S^1(G):=\{\mu\in C^1(G)\,|\,\mu(\overline{e})=\mu(e)\}.$$

余境界演算子 $\mathrm{d}:\Lambda^0(G)\to\Lambda^1(G)$ を線形: $\mathrm{d}(f_1+f_2)=\mathrm{d}f_1+\mathrm{d}f_2,\ \mathrm{d}(af_1)=a\,\mathrm{d}f_1,\ f_1,f_2\in\Lambda^0(G),a\in\mathbb{R}$ かつ

$$(\mathrm{d}f)(e)=f(\mathrm{t}(e))-f(\mathrm{o}(e)),$$

で定義する. **内積** $\Lambda^0(G)\times\Lambda^0(G)\to\mathbb{R}$, 及び $\Lambda^1(G)\times\Lambda^1(G)\to\mathbb{R}$ を定義したい. ある

$$m_V(x)>0,\quad m_E(e)=m_E(\overline{e})>0,\quad \forall x\in V,e\in E,$$

なる $m_V\in\Lambda^0(G)$ と $m_E\in S^1(G)$ を選んで

$$\begin{aligned}\langle\, f_1\,,\,f_2\,\rangle_V &:= \sum_{x\in V}f_1(x)\,f_2(x)\,m_V(x),\\ \langle\,\omega_1\,,\,\omega_2\,\rangle_E &:= \frac{1}{2}\sum_{e\in E}\omega_1(e)\,\omega_2(e)\,m_E(e),\end{aligned}$$

と定義する. **余微分** $\mathrm{d}^\dagger:\Lambda^1(G)\to\Lambda^0(G)$ を内積に関して d の随伴で定義する. すなわち, $\langle\,\mathrm{d}f\,,\,\omega\,\rangle_E=\langle\,f\,,\,\mathrm{d}^\dagger\omega\,\rangle_V$. 具体的には以下である：

$$\begin{aligned}(\mathrm{d}^\dagger\omega)(x) &= \frac{-1}{m_V(x)}\sum_{e\in E_x}\omega(e)m_E(e),\\ E_x &:= \{\,e\in E\mid \mathrm{o}(e)=x\,\}.\end{aligned}$$

ラプラシアン $\Delta_V:\Lambda^0(G)\to\Lambda^0(G)$ 及び $\Delta_E:\Lambda^1(G)\to\Lambda^1(G)$ を以下で定める：

$$\Delta_V:=-\,\mathrm{d}^\dagger\mathrm{d},\quad \Delta_E:=-\,\mathrm{d}\mathrm{d}^\dagger.$$

すると, 自己共役性を確認できる：

$$\begin{aligned}\langle\,\Delta_V f_1\,,\,f_2\,\rangle_V &= \langle\,f_1\,,\,\Delta_V f_2\,\rangle_V\,,\\ \langle\,\Delta_E\,\omega_1\,,\,\omega_2\,\rangle_E &= \langle\,\omega_1\,,\,\Delta_E\,\omega_2\,\rangle_E\,.\end{aligned}$$

3 マスター方程式

マスター方程式とは次の方程式である：

$$\dot{p}_t(x)=-\sum_{x'}w_{x\to x'}p_t(x)+\sum_{x'}w_{x'\to x}\,p_t(x').\quad(1)$$

ここで $p_t(x)\in\mathbb{R}$ は時刻 $t\in\mathbb{R}$ での離散的な状態 $x\in\Gamma$ にいる確率, $\dot{p}_t(x)=\mathrm{d}p_t(x)/\mathrm{d}t$, $w_{x\to x'}$ を $x\in\Gamma$ から $x'\in\Gamma$ への単位時間での遷移確率を表す. 状態 $x\in\Gamma$ での平衡分布を $p^{\mathrm{eq}}(x)$ とする. $\Gamma=\{x\}$, $\{w_{x\to x'}\}$, $\{p^{\mathrm{eq}}(x)\}$, $\{p_0(x)\}$ は全て与えられているものとする.

3.1 グラフ表示

式 (1) をグラフの言葉で書こう. 与えられたデータ $\{x\}$, $\{w_{x\to x'}\}$ に付随したグラフ $G=(V,E)$ を以下のように導入する：

- $x\in V$.
- $e\in E$ を $w(e)=w_{x\to y}$ かつ $\mathrm{o}(e)=x$, $\mathrm{t}(e)=y$ となるように選ぶ.

- 与えられた $e\in$ に対して $\overline{e}\in E$ とする．但し，$w(\overline{e})=w_{y\to x}$ が存在しない場合, $w(\overline{e})=0$.

グラフ G 上に p_t と w を以下のように導入する：

- $p_t\in\Lambda^0(G)$ がマスター方程式の解 $p_t(x)$.
- $w\in C^1(G)$ が遷移確率 $w(e)$.

これにより, (1) は以下のように書ける：

$$\begin{aligned}\dot{p}_t(x) &= \sum_{e\in E_x} I_t(e) \qquad (2)\\ I_t(e) &:= \left[-p_t(\mathrm{o}(e))\,w(e)+p_t(\mathrm{t}(e))\,w(\overline{e})\right],\end{aligned}$$

ここで $I_t\in\Lambda^1(G)$ と見做している．定理を述べるために記号を準備する．V と E 上の関数

$$1_V\in\Lambda^0(G),\qquad 1_E\in S^1(G),$$

を $1_V(x)=1$, $1_E(x)=1$ がどんな $x\in V$ に対しても成立するとする.

これから以下の定理が得られる

定理 3.1. *(マスター方程式と連続の式).* $m_V=1_V$, 及び $m_E=1_E$ とおく. すると *(2)* は

$$\dot{p}_t=-\mathrm{d}^\dagger I_t.$$

注意 3.1. 連続体力学との対比では, 定理 3.1 は連続の式に対応する. なお, 微分幾何学的に連続体力学を記述する際, d と $\mathrm{d}^\dagger$ を外微分とその随伴として $\mathrm{div}=-\mathrm{d}^\dagger$ なる演算子が定義される.

3.2 詳細釣合条件を満たす場合

詳細釣り合い条件とは

$$p^{\mathrm{eq}}(\mathrm{o}(e))\,w(e)=p^{\mathrm{eq}}(\mathrm{t}(e))\,w(\overline{e}),$$

を満たす場合のことを言う.

本小節では任意の $x\in V$ や $e\in E$ に対して以下のように置く：

$$m_V(x)=p^{\mathrm{eq}}(x),\quad m_E(e)=w(e)\,p^{\mathrm{eq}}(\mathrm{o}(e)).$$

以下が主定理である

定理 3.2. *(拡散方程式).* $\psi_t\in\Lambda^0(G)$ を $p_t(x)=p^{\mathrm{eq}}(x)\,\psi(x)$ となるように定義する. すると *(2)* から以下が得られる *:*

$$\dot{\psi}_t=\Delta_V\,\psi_t. \qquad (3)$$

注意 3.2. $(\Delta_V\,\psi_t)(x)$ は次のように書き下せる：

$$(\Delta_V\,\psi_t)(x)=\sum_{e\in E_x} w(e)\left[\psi_t(\mathrm{t}(e))-\psi_t(\mathrm{o}(e))\right].$$

式 (3) は左辺に時間微分, 右辺にラプラシアンが現れ, 拡散方程式そのものである. また, リアプノフ関数が見つかり, 以下が証明できる：

$$\lim_{t\to\infty} p_t(x)=p^{\mathrm{eq}}(x),\qquad \forall x\in V.$$

ラプラシアン固有値問題とその応用

拡散方程式 (3) は線形であるため,$\Lambda^0(G)$ や $\Lambda^1(G)$ 等は以後全て線形空間とする.

ラプラシアン $\Delta_V:\Lambda^0(G)\to\Lambda^0(G)$ は自己共役であるため, 以下が成立する.

補題 3.1. 固有値問題

$$\Delta_V\phi_V^{(s)}=\lambda_V^{(s)}\phi_V^{(s)},$$

において固有値 $\lambda_V^{(s)}$ は実数で特に,$\lambda_V^{(s)}\leq 0$ である. また,$\{\phi_V^{(s)}\}$ は以下の正規直交系に選べる *:*

$$\left\langle\,\phi_V^{(s)},\,\phi_V^{(s')}\,\right\rangle_V=\begin{cases}1 & s=s'\\ 0 & s\neq s'\end{cases}.$$

特に 0-固有値 $\lambda_V^{(0)}=0$ に付随する正規化された固有関数 $\phi_V^{(0)}$ は

$$\phi_V^{(0)}=1_V.$$

なお, $\phi_V^{(0)}$ は平衡状態に対応する.

補題3.1 を用いて以下を示すことができる.

命題 3.1. *(固有分解).* $\{\lambda_V^{(s)}\}$ を 0 ではない, s でラベル付けされる Δ_V の固有値全体とする．すると *(3)* の初期値問題の解は $a^{(s)}(0)\in\mathbb{R}$ を定数として

$$\psi_t=\sum_s a^{(s)}(0)\,\mathrm{e}^{-|\lambda_V^{(s)}|t}\phi_V^{(s)}+1_V.$$

この命題により, 緩和への収束が固有値で特徴付けられることも確認できる.

本稿でラプラシアンは 2 種類導入された．その固有値に関して以下が成立する.

命題 3.2. *(超対称性).* Δ_V と Δ_E の 0 以外の固有値は全て一致する.

拡散方程式 (3) から $\Lambda^1(G)$ 上の拡散方程式

$$\mathrm{d}\dot{\psi}_t=\Delta_E\,\mathrm{d}\psi_t,$$

も得られることを注意しておく.

動的イジング模型での例

動的イジング模型とは平衡状態で定義された古典イジング模型を拡張し, 時間発展を導入したモデルの一つである. ここでは熱浴にスピン 1 つが存在する単純な模型を考察する [4].

定義 3.1. $\sigma = \pm 1$ をスピン変数, 平衡分布関数を $p_{\mathrm{I}}^{\mathrm{eq}}(\sigma)$ とする. 分布関数の発展方程式

$$\dot{p}_{t,\mathrm{I}}(\sigma) = -\, w^{\mathrm{I}}_{\sigma\to-\sigma}\, p_{t,\mathrm{I}}(\sigma) + w^{\mathrm{I}}_{-\sigma\to\sigma}\, p_{t,\mathrm{I}}(-\sigma), \tag{4}$$

を考え, かつ詳細釣り合い条件を満たすとする :

$$w^{\mathrm{I}}_{\sigma\to-\sigma}\, p_{\mathrm{I}}^{\mathrm{eq}}(\sigma) = w^{\mathrm{I}}_{-\sigma\to\sigma}\, p_{\mathrm{I}}^{\mathrm{eq}}(-\sigma), \tag{5}$$

この力学系を本稿では**動的イジング模型**と呼ぶ.

動的イジング模型 (4) でのグラフ表示は

$$\underset{\sigma}{\bullet} \underset{e''}{\overset{e'}{\rightleftarrows}} \underset{-\sigma}{\bullet}\ , \quad \{e'\} = E_{\sigma}, \quad \{e''\} = E_{-\sigma},$$

$$w(\,e'\,) = w^{\mathrm{I}}_{\sigma\to-\sigma}, \quad w(\,e''\,) = w^{\mathrm{I}}_{-\sigma\to\sigma}.$$

変数 $\psi_{t,\mathrm{I}} \in \Lambda^0(G)$ を

$$p_{t,\mathrm{I}}(\sigma) = p_{\mathrm{I}}^{\mathrm{eq}}(\sigma)\, \psi_{t,\mathrm{I}}(\sigma), \quad \sigma = \pm 1,$$

と導入する. この変数 $\psi_{t,\,\mathrm{I}}$ の満たす方程式は

$$\dot{\psi}_{t,\mathrm{I}}(\sigma) = w^{\mathrm{I}}_{\sigma\to\,-\sigma}[\,\psi_{t,\mathrm{I}}(-\,\sigma) - \psi_{t,\mathrm{I}}(\sigma)\,],$$

である. 右辺を注意3.2 と比較することにより, 確かに拡散方程式であることが確認できる. 行列表示

$$\begin{pmatrix} \dot{\psi}_{t,\mathrm{I}}(-1) \\ \dot{\psi}_{t,\mathrm{I}}(+1) \end{pmatrix} = M_{\mathrm{I}} \begin{pmatrix} \psi_{t,\mathrm{I}}(-1) \\ \psi_{t,\mathrm{I}}(+1) \end{pmatrix},$$

$$\text{ここで} \quad M_{\mathrm{I}} := \begin{pmatrix} -\,w^{\mathrm{I}}_{-1\to+1} & w^{\mathrm{I}}_{-1\to+1} \\ w^{\mathrm{I}}_{+1\to-1} & -\,w^{\mathrm{I}}_{+1\to-1} \end{pmatrix},$$

により,M_{I} の固有値

$$\lambda_{\mathrm{I}}^{(0)} = 0, \quad \lambda_{\mathrm{I}}^{(1)} = -\,(\,w^{\mathrm{I}}_{+1\to-1} + w^{\mathrm{I}}_{-1\to+1}\,),$$

は確かに実数であり, 固有ベクトルは以下である :

$$\phi_{\mathrm{I}}^{(0)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \qquad \phi_{\mathrm{I}}^{(1)} = c_{\mathrm{I}} \begin{pmatrix} w^{\mathrm{I}}_{-1\to+1} \\ -\,w^{\mathrm{I}}_{+1\to-1} \end{pmatrix},$$

$$\text{ここで} \quad c_{\mathrm{I}} := \left[\, \sum_{\sigma=\pm1} (w^{\mathrm{I}}_{\sigma\to-\sigma})^2\, p_{\mathrm{I}}^{\mathrm{eq}}(\sigma) \right]^{-1/2}.$$

正規直交性は例えば以下のように確認できる :

$$\left\langle \phi_{\mathrm{I}}^{(0)}, \phi_{\mathrm{I}}^{(0)} \right\rangle_V = \sum_{\sigma=\pm1} p_{\mathrm{I}}^{\mathrm{eq}}(\sigma) = 1,$$

$$\left\langle \phi_{\mathrm{I}}^{(0)}, \phi_{\mathrm{I}}^{(1)} \right\rangle_V = \sum_{\sigma=\pm1} \phi_{\mathrm{I}}^{(0)}(\sigma)\, \phi_{\mathrm{I}}^{(1)}(\sigma)\, p_{\mathrm{I}}^{\mathrm{eq}}(\sigma)$$

$$= c_{\mathrm{I}} \left[\, w^{\mathrm{I}}_{-1\to+1}\, p_{\mathrm{I}}^{\mathrm{eq}}(-1) - w^{\mathrm{I}}_{+1\to-1}\, p_{\mathrm{I}}^{\mathrm{eq}}(+1) \right] = 0,$$

ここで $p_{\mathrm{I}}^{\mathrm{eq}}$ の規格化条件や (5) を用いた.

文献 [4] ではパラメーター $\theta \in \mathbb{R}$, $\gamma \in \mathbb{R}_+$ を用い

$$\begin{aligned} p_{\mathrm{I}}^{\mathrm{eq}}(\sigma;\theta) &= \frac{\exp(\,\theta\sigma\,)}{2\cosh\theta}, \\ w^{\mathrm{I}}_{\sigma\to-\sigma}(\theta,\gamma) &= \frac{\gamma}{2}(1-\sigma\tanh\theta), \end{aligned}$$

が選ばれている. ここで θ は逆温度に比例し, γ は緩和を特徴付け, 時間の逆数の次元を有する. この時非ゼロの固有値と固有ベクトルは以下である :

$$\lambda_{\mathrm{I}}^{(1)} = -\,\gamma, \qquad \phi_{\mathrm{I}}^{(1)} = c_{\mathrm{I}}(\theta,\gamma)\frac{\gamma}{2} \begin{pmatrix} 1+\tanh\theta \\ -1+\tanh\theta \end{pmatrix},$$

4 結語

本稿では非平衡統計力学で用いられるマスター方程式の離散幾何学を用いた定式化を行った. それにより, マスター方程式に適合した自己共役演算子であるラプラシアンを見出し, 詳細釣り合い条件を満たす場合, 拡散方程式とマスター方程式が等価であることを示した. これらを例示するため, 簡単な動的イジング模型での解析例を示した.

謝辞

本研究において著者の一人 S.G. は JSPS 科研費 JP1903635 の部分的助成を受けたものである. また,H.H. は JSPS 科研費 JP17H01793 の部分的助成を受けました.

参考文献

[1] 戸田盛和ほか, “統計物理学 第 2 版”, 岩波書店, (2002).

[2] T. Sunada, *“Topological Crystallography”*, Springer, (2013).

[3] S. Goto and H. Hino, arXiv 1908:04535.

[4] S. Goto, J. Math. Phys. **56**,073301, (2015).