物理における非マルコフ性と非マルコフ型マスター方程式の数値的解法について

江崎　ひろみ *1

Non-Markovity in physics and a numerical simulation method for non-Markovian master equations

Hiromi Ezaki *1

Non-Markovity generally appears in the process of tracing-out for the degree of freedom of heat-bath. The origin of non-Markovity in physics and a numerical simulation method for solving non-Markovian master equations are described in this paper.

はじめに

自然現象を扱う物理では、対象となる系には多くの自由度が含まれ、通常その自由度全てを厳密に取り扱う事は難しい。例えば、結晶中の一つの原子に注目したとき、その周りには他の原子や格子振動、不純物など、多くの自由度が存在し、その注目する原子と相互作用をしている。そこで、系の特徴的な時間スケールや相互作用の強さによって、全系を系（system）と熱浴(heat-bath)に分離し、注目する系の自由度を残して、熱浴については自由度を消去（対角和をとる）することがよく行われる。このとき、系の時間スケールと熱浴の時間スケールに大きな違いがあり、熱浴は系との相互作用から素早く復帰するならば、系の時間発展は過去の履歴によらず、現在の時点のみで決まるマルコフ過程となる。この条件が満たされない場合は、系は非マルコフ過程となる。本論文では、物理学において非マルコフ性がどのように現れるのか明らかにする。さらに、非マルコフ性を近似なしに取り扱うことが可能な数値的解法についても述べる。

マルコフ過程としてのブラウン運動

マルコフ過程の例としては、単純な酔歩、狭義のブラウン運動を記述するオルンシュタイン-ウーレンベック過程などが挙げられる。ブラウン運動が確率過程とみなされるのは、それを取り囲む媒質粒子の運動の詳細についての知識が失われているからである。それと同時に、時間的にも粗視化されれば、ブラウン運動の過程はマルコフ過程となる。時間的粗視化とは、ブラウン粒子の運動をブラウン粒子の速度の相関時間に比べてはるかに大きい時間尺度を持って時間を粗視的に測るという意味である。ブラウン粒子の運動をどんどん微細に見ていくと、一つの媒質粒子が衝突し、次の媒質粒子が衝突するまでは、ブラウン粒子は直線的に運動することになる。この時間スケール（速度の相関時間）で見ると、ブラウン運動はもはや確率過程とは言えない。ブラウン運動を確率過程とみなすには、これよりもずっと大きな時間尺度で時間を粗視的に測る必要がある。同時に、空間的にも、ブラウン粒子が次の衝突までに動く平均距離（平均自由行程）よりも粗い空間尺度で測る必要がある。このように、時間的、空間的粗視化がマルコフ過程とみなせる鍵である。

ブラウン運動と同様に、多数の粒子、多数の自由度を持つ系において、その自由度の一部分のみに着目して、その他のすべての自由度の運動に関して目を瞑るとすれば、観測される運動は確率過程として記述される。そのような粗視化と共に、時間の尺度が粗大化されれば、確率過程はマルコフ過程となる。マルコフ過程は

$$\frac{\partial}{\partial t}P(q,t)=\Gamma(q,t)P(q,t) \tag{1}$$

という形の時間発展方程式で表される。ここで、$P(q,t)$ は時刻 t 、状態 q における系の分布関数、$\Gamma(q,t)$ は系の平均から決まる演算子である [1]。

非マルコフ性の起源

ブラウン運動は時間と空間の粗視化によりマルコフ過程となるが、ブラウン運動には摩擦の遅れがあるから、正確にはマルコフ過程としての記述は成り立たない。一般的に、ある時点から後の時間発展は、その時点だけの知識では定まらず、それまでの発展の歴史全体によって支配されるのが普通である。そのような非マルコフ性は、ある自由度の一部分に着目して、他の自由度には目を覆うという情報の縮約には一般的に現れるものである。実際、全系の密度行列の一部の情報を消去したとき、非マルコフ性が現れることを見てみよう。全系の密度行列を ρ 、全系のハミルトニアンを H とすれ

*1　東京工芸大学工学部基礎教育研究センター教授
2018 年 9 月 21 日　受理

ば、密度行列の運動方程式は

$$\frac{\partial \rho}{\partial t}=\frac{1}{i\hbar}\left[H,\rho\right]\equiv iL\rho \tag{2}$$

で与えられる。今、ハミルトニアン H が

$$H=H_0+H_1 \tag{3}$$

のように、摂動 H_1 と非摂動ハミルトニアン H_0 から成り、H_1 は H_0 に比べて十分弱いとしよう。非摂動系について、

$$H_0\left|\ell\right\rangle=E_\ell\left|\ell\right\rangle \tag{4}$$

とし、任意の演算子 A に対して、射影演算子 P を

$$\left\langle\ell\right|PA\left|m\right\rangle=\left\langle\ell\right|A\left|\ell\right\rangle\delta_{\ell m} \tag{5}$$

$$\left\langle\ell\right|P'A\left|m\right\rangle=\left\langle\ell\right|A\left|m\right\rangle(1-\delta_{\ell m}) \tag{6}$$

として定義しよう。すなわち、P は非摂動ハミルトニアンの固有関数を基底とする表示における対角要素を残したものに A を射影することであり、摂動ハミルトニアンを消去することに対応する。ρ は

$$\rho=P\rho+P'\rho \tag{7}$$

によって、射影 $P\rho$ とその残りの部分 $P'\rho$ に分けられる。これに対応して、(2)式は

$$\frac{\partial}{\partial t}P\rho=PiLP\rho+PiLP'\rho \tag{8}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}P'\rho=P'iLP'\rho+P'iLP\rho \tag{9}$$

という 2 つの方程式に分けられる。$t=0$ での初期状態が ρ_0 であったとして、(9)式を積分すれば、

$$P'\rho=\int_0^t e^{(t-\tau)P'iL}P'iLP\rho d\tau+e^{tP'iL}P'\rho_0 \tag{10}$$

が得られる。これを(10)式に代入すれば射影 $P\rho$ の運動方程式

$$\frac{\partial}{\partial t}P\rho=PiLP\rho+PiL\int_0^t e^{(t-\tau)P'iL}P'iLP\rho d\tau+PiLe^{tP'iL}P'\rho_0 \tag{11}$$

が得られる。(11)式の第 2 項は初期時刻から時刻 t までの時間全体にわたる射影 $P\rho$ の時間発展の経歴によるから、これは記憶項と呼べるだろう。これが非マルコフ性に他ならない。情報の縮約によって、系の時間発展が非マルコフ過程となっていることを示している。一方、(11)式の第 3 項は初期分布の記憶を表している。もし、記憶項の記憶関数の持続時間 τ_c が短く、$P\rho$ の変化の速さが遅ければ、初期時刻からかなり経過した時刻 $(t>>\tau_c)$ では、記憶項を

$$\left[PiL\int_{-\infty}^t e^{(t-\tau)P'iL}P'iLd\tau\right]P\rho(t) \tag{12}$$

と置き換えられるだろう。これはマルコフ近似に他ならない。先に述べたブラウン運動では、この近似はブラウン粒子の速度の相関時間 τ_c に比べて、はるかに大きい尺度を持って時間 t を粗視的に測る場合に相当する。このように、射影された過程は適当な粗視化によってマルコフ性を回復するわけである。

マルコフ近似では、系の時間発展がその時刻においてのみ決まるため、記憶に依らないこと、物理量の指数関数的減衰、系から熱浴への情報の一方的な流れなどがその特徴となる。一方、非マルコフダイナミクスにおいては、記憶の効果、非指数関数的減衰、熱浴からの情報のフィードバックなどが現れる。

さて、マルコフ近似が妥当となるためには、時間的、空間的粗視化と共に、系の特徴的な時間に比べ、熱浴の特徴的な時間が短く、熱浴は系との相互作用から速やかに回復することが必要である。近年の微細加工技術の進歩と測定技術の進歩により、この条件が成り立たず、様々な系において非マルコフ効果が実験でも観測されるようになってきている [2-5]。 例えば、微小共振器中の量子ドットでは、非マルコフ効果に特徴的な非指数関数的減衰が観測されているし [2]、光結晶中の磁気双極子からの放射においても非マルコフ効果が観測されている [3]。さらに、固体物理学や量子光学の分野だけでなく、量子生物学の分野でも、光合成のエネルギー輸送において、熱浴の緩和時間は電子のエネルギー輸送

のダイナミクスと同等かそれよりも長く、マルコフ近似が成り立たないことが報告されている[4,5]。

実験と並行して、理論においても非マルコフ効果を取り入れた様々な定式化が提案されている。マルコフ近似では射影された密度行列のマスター方程式はよく知られた Lindblad 型になるが、非マルコフに拡張された Lindblad 型のマスター方程式も得られている[6]。また、Heisenberg 描像による Input-Output formalism も非マルコフに拡張されている[7]。他にも、経路積分を用いたものなど、いくつかアプローチがあるが、どの理論においても実際に物理量を計算する際には、何らかの近似が必要となる点が難点である。そこで、有力な方法として、量子モンテカルロ波動関数法（Quantum Monte Carlo wavefunction method、以下 QMWM と略す）などの数値的解法が挙げられる。次節では、マルコフおよび非マルコフに対する QMWM の枠組みを示そう[8,9]。

マルコフ型マスター方程式に対する QMWM

QMWM は Stochastic Shrödinger equation とも呼ばれ、系のハミルトニアンを非エルミートに拡張し、確率的に起こるジャンプ（状態遷移）により、減衰や励起を含む量子開放系の時間発展を直接シミュレーションする数値的解法である。マルコフ型のマスター方程式に対する QMWM は以前から提案され、近似なしに厳密に計算できる有力な方法として様々な問題に適用されている。射影 $P\rho$ の運動方程式(11)式はマルコフ近似のもとでは以下のような Lindblad 型マスター方程式になる。

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}=\frac{1}{i\hbar}\left[H_0,\rho(t)\right]+\sum_k\gamma_k C_k\rho(t)C_k^\dagger-\frac{1}{2}\sum_k\gamma_k\left(C_k^\dagger C_k\rho(t)+\rho(t)C_k^\dagger C_k\right) \tag{13}$$

ここで、射影 $P\rho$ を改めて ρ と置いた。γ_k は正の減衰定数であり、C_k は熱浴と系との相互作用を記述する演算子である。また、初期分布の記憶を示す(12)式の最後の項はマルコフ近似のもとでは無視できる。密度行列 ρ は系の波動関数 $\left|\Psi_j(t)\right\rangle$ を用いて、一般的に

$$\rho=\sum_j d_j(t)\left|\Psi_j(t)\right\rangle\left\langle\Psi_j(t)\right| \tag{14}$$

と表すことができる。QMWM では、系の時間発展は以下のような非エルミートのハミルトニアン

$$H=H_0-\frac{i\hbar}{2}\sum_k\gamma_k C_k^\dagger C_k \tag{15}$$

で記述される。第 2 項が(13)式の減衰項に対応している。C_k による量子ジャンプがないときは、系は(15)式の H により

$$\left|\Psi'_j(t+\delta t)\right\rangle=\left(1-\frac{iH\delta t}{\hbar}\right)\left|\Psi_j(t)\right\rangle \tag{16}$$

と時間発展する。ただし、次のステップに進む前に再規格化しておく必要がある。

$$\left|\Psi_j(t+\delta t)\right\rangle=\frac{\left|\Psi'_j(t+\delta t)\right\rangle}{\left\|\left|\Psi'_j(t+\delta t)\right\rangle\right\|} \tag{17}$$

一方、C_k による状態 j から ℓ への量子ジャンプでは

$$\left|\Psi_\ell(t+\delta t)\right\rangle=\frac{C_k\left|\Psi_j(t)\right\rangle}{\left\|C_k\left|\Psi_j(t)\right\rangle\right\|} \tag{18}$$

となり、このジャンプは確率

$$p^k_{\ell\to j}(t)=\gamma_k\delta t\left\langle\Psi_j(t)\right|C_k^\dagger C_k\left|\Psi_j(t)\right\rangle \tag{19}$$

で起こる。このように QMWM は乱数を発生させて、(15)式のハミルトニアンによる決定論的な時間発展と(18)式の量子ジャンプによる確率的時間発展を繰り返すことで(13)式の時間発展をシミュレートする数値的解法である。

非マルコフ型マスター方程式に対する QMWM

非マルコフ過程に拡張された密度行列の運動方程式は

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}=\frac{1}{i\hbar}\left[H_0,\rho(t)\right]+\sum_k\gamma_k(t)C_k\rho(t)C_k^\dagger-\frac{1}{2}\sum_k\gamma_k(t)\left(C_k^\dagger C_k\rho(t)+\rho(t)C_k^\dagger C_k\right) \tag{20}$$

となる。(13)式では定数だった γ_k が時間に依存するようになるだけでなく、負の値もとりうる点がマルコフ過程と大きく異なっている。$\gamma_k(t)$ が正の値をとるときは、系の時間発展は先に述べたマルコフ過程の場合と同じでよい。

(14)式の密度行列に対して、ハミルトニアンは

$$H = H_0 - \frac{i\hbar}{2}\sum_k \gamma_k(t) C_k^\dagger C_k \tag{21}$$

となるし、決定論的な時間発展は(16)式と同じである。量子ジャンプも $\gamma_k(t)$ が正の値をとるときは、

$$\left|\Psi_j(t)\right\rangle \to \left|\Psi_\ell(t+\delta t)\right\rangle = \frac{C_k\left|\Psi_j(t)\right\rangle}{\left\|C_k\left|\Psi_j(t)\right\rangle\right\|} \tag{22}$$

となり、これが起こる確率も(19)式でよい。そのため、非マルコフ性は $\gamma_k(t)$ が負となる場合に特徴的に現れることになる。$\gamma_k(t)$ が負となる場合、量子ジャンプは

$$\left|\Psi_\ell(t)\right\rangle \to \left|\Psi_j(t+\delta t)\right\rangle = \frac{C_k\left|\Psi_j(t)\right\rangle}{\left\|C_k\left|\Psi_j(t)\right\rangle\right\|} \tag{23}$$

となる。これは(22)式と同じように見えるが、(22)式では $\left|\Psi_j(t)\right\rangle$ が量子ジャンプが起こる前の状態で、$\left|\Psi_\ell(t+\delta t)\right\rangle$ がジャンプ後の状態であるのに対して、(23)式の非マルコフ量子ジャンプでは、$\left|\Psi_\ell(t)\right\rangle$ がジャンプ前の状態で、$\left|\Psi_j(t+\delta t)\right\rangle$ がジャンプ後の状態となっている点が異なっている。このジャンプは確率

$$p_{\ell\to j}^k(t) = \frac{d_j(t)}{d_\ell(t)}\left|\gamma_k(t)\right|\delta t\left\langle\Psi_j(t)\right|C_k^\dagger C_k\left|\Psi_j(t)\right\rangle \tag{24}$$

で起こる。ジャンプ後の状態で決まる確率でジャンプが起こるということである。つまり、非マルコフの時間発展はちょうど時間を逆回しにしたことに相当する。このような量子ジャンプで(20)式が再現できることは既にいくつかの論文で証明されている [8]。

ここで示したQMWMは近似なしに直接マスター方程式を計算できる点において、非常に有力な数値的解法である。非マルコフ性を厳密に扱う理論はすでにいくつかあるが、先に述べたように、実際に具体的な物理量を計算するためには何等かの近似をせざるを得ない場合が多い。近似が入ると得られた結果が近似によるものであるか、非マルコフ性によるものであるのかがあいまいになってしまう恐れがある。その点、QMWM は直接マスター方程式を計算できるため、少なくともモデルの範囲内において近似なく厳密に非マルコフ効果を明らかにすることが可能である。この方法の唯一の弱点は、系を直接シミュレートするため、膨大なメモリと CPU 時間が必要なことである。しかし、この問題は計算機の進歩により、ある程度解決されていくと思われる。

おわりに

我々が対象とする系は多数の自由度を含み、我々が注目する自由度はその一部であるという場合が普通である。そのため、そこには常に非マルコフ性が現れる可能性がある。非マルコフ性は物理学の分野に限らず、量子生物学など様々な分野においても現れる普遍的性質である。自然現象に内在しているといってもよいだろう。したがって、その解明は物理の枠を超えて、広く自然現象の本質に迫ることにつながるであろう。

参考文献

1) 統計物理学, 1978, 岩波書店
2) K. H. Madsen et al., Phys. Rev. Lett. 106 (2011) p.233601.
3) U. Hoeppe et al., Phys. Rev. Lett. 108 (2012) p. 043603.
4) E. C. Collini et al., Nature 463 (2010) p.644.
5) A. W. Chin et al., J. Math. Phys. 51 (2010) p. 092109.
6) M. J. W. Hall et al., Phys. Rev. A89 (2014) p. 010103.
7) L. Doisi, Phys. Rev. A85 (2012) p. 034101.
8) J. Piilo et al., Phys. Rev. A79 (2009) p. 062112.
9) H. Ezaki, Nonlinear Opt. and Quantum Opt. 48 (2017) p.147.