

## 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<sup>\*1</sup>

## A numerical simulation method for non-Markovian master equations

Hiromi Ezaki<sup>\*1</sup>

In this paper, a numerical simulation method for non-Markovian master equations is described. This method is a generalization of the Markovian Monte Carlo wavefunction method into the non-Markovian regime. As a simple example, the Janes-Cummings model is solved by this method.

## はじめに

非マルコフ効果は系と環境の特徴的な時間に大きな違いがない場合に現れる現象である。我々が扱う対象には通常多くの自由度が含まれ、それら全てを厳密に取り扱うことは困難である場合が多い。そのような場合に、注目する自由度（系）と残りの自由度（環境）とに分離し、環境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環境の時間スケールに大きな違いがあり、環境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<sup>1</sup>。本論文では、非マルコフ過程を近似なしに取り扱うことが可能な数値的解法—非マルコフ型量子モンテカルロ波動関数法（Non-Markov Quantum Monte Carlo wavefunction method、以下 NMQM と略す）について述べ、この方法を厳密に解ける Jaynes-Cummings model (JC model) に適用する。

## 非マルコフ型マスター方程式

非マルコフ過程に拡張された密度行列の運動方程式は

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} = & \frac{1}{i\hbar} [H_0, \rho(t)] \\ & + \sum_k \gamma_k(t) C_k \rho(t) C_k^\dagger - \frac{1}{2} \sum_k \gamma_k(t) (C_k^\dagger C_k \rho(t) + \rho(t) C_k^\dagger C_k) \end{aligned} \quad (1)$$

となる<sup>2,4</sup>。ここで、 $\rho$  は系と環境全体の密度行列を環

境についてトレースをとった射影された密度行列であり、 $H_0$  は系のハミルトニアン、 $C_k$  は環境と系との相互作用を記述する演算子である。マルコフ過程では定数だった  $\gamma_k$  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、系の時間発展はマルコフ過程の場合と同様となる。密度行列  $\rho$  は系の状態ベクトル  $|\Psi_j(t)\rangle$  を用いて、一般的に

$$\rho = \sum_j d_j(t) |\Psi_j(t)\rangle \langle \Psi_j(t)| \quad (2)$$

と表すことができる。NMQM 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

$$H = H_0 - \frac{i\hbar}{2} \sum_k \gamma_k(t) C_k^\dagger C_k \quad (3)$$

で記述される。 $C_k$  による量子ジャンプがないときは、系は(3)式の  $H$  により

$$|\Psi'_j(t+\delta t)\rangle = \left(1 - \frac{iH\delta t}{\hbar}\right) |\Psi_j(t)\rangle \quad (4)$$

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。

$$|\Psi_j(t+\delta t)\rangle = \frac{|\Psi'_j(t+\delta t)\rangle}{\| |\Psi'_j(t+\delta t)\rangle \|} \quad (5)$$

量子ジャンプが起こる場合も  $\gamma_k(t)$  が正の値をとるときは、

<sup>\*1</sup> 東京工芸大学工学部工学科電気電子コース教授  
2021 年 9 月 22 日 受理

$$|\Psi_j(t)\rangle \rightarrow |\Psi_\ell(t+\delta t)\rangle = \frac{C_k |\Psi_j(t)\rangle}{\|C_k |\Psi_j(t)\rangle\|} \quad (6)$$

となり、これが起こる確率も通常のマルコフ過程の場合と同じ

$$p_{\ell \rightarrow j}^k(t) = \gamma_k \delta t \langle \Psi_j(t) | C_k^\dagger C_k | \Psi_j(t) \rangle \quad (7)$$

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

$$|\Psi_\ell(t)\rangle \rightarrow |\Psi_j(t+\delta t)\rangle = \frac{C_k |\Psi_j(t)\rangle}{\|C_k |\Psi_j(t)\rangle\|} \quad (8)$$

となる。これは(6)式と同じように見えるが、(6)式では  $|\Psi_j(t)\rangle$  が量子ジャンプが起こる前の状態で、 $|\Psi_\ell(t+\delta t)\rangle$  がジャンプ後の状態であるのに対して、(8)式 of 非マルコフ量子ジャンプでは、 $|\Psi_\ell(t)\rangle$  がジャンプ前の状態で、 $|\Psi_j(t+\delta t)\rangle$  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

$$p_{\ell \rightarrow j}^k(t) = \frac{d_j(t)}{d_\ell(t)} |\gamma_k(t)| \delta t \langle \Psi_j(t) | C_k^\dagger C_k | \Psi_j(t) \rangle \quad (9)$$

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ことである。つまり、非マルコフの時間発展はいわば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(1)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<sup>3</sup>。

### Jaynes-Cummings model への応用

前節で紹介した NMQM を JC model へ適用しよう。JC model は2準位原子が電磁場と相互作用しているモデルで、厳密に解けることがわかっている(図1)。この厳密解と比較することで、NMQM が非マルコフ効果を取り込んで、系の時間発展を正しく記述できているかわかる。

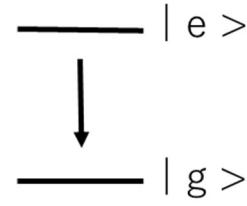


図 1. Jaynes-Cummings model

JC model のハミルトニアンは、原子系  $H_0$  は

$$H_0 = \hbar \omega_e |e\rangle\langle e| + \hbar \omega_g |g\rangle\langle g| \quad (10)$$

となり、環境である電磁場は

$$H_{env} = \sum_k \hbar \nu_k a_k^\dagger a_k \quad (11)$$

となる。また、系との相互作用は双極子近似の範囲内で

$$H_{int} = -\mathbf{D} \cdot \mathbf{E} \quad (12)$$

で与えられる。ここで、 $|g\rangle$ 、 $|e\rangle$  は原子の基底状態

と励起状態で、 $a_k^\dagger$ 、 $a_k$  は電磁場の生成、消滅演算子

$\mathbf{D}$  と  $\mathbf{E}$  は双極子演算子と電場である。このシンプルなモデルの場合、(1)式の  $C_k$  は

$$C = |g\rangle\langle e| \quad (13)$$

のみとなる。この場合(1)式は

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} = & \frac{1}{i\hbar} \lambda(t) [C^\dagger C, \rho(t)] \\ & + \gamma(t) C \rho(t) C^\dagger - \frac{1}{2} \gamma(t) (C^\dagger C \rho(t) + \rho(t) C^\dagger C) \end{aligned} \quad (14)$$

となる。ここで、

$$\gamma(t) = 2 \int_0^t ds \int_0^\infty d\nu J(\nu) \cos\{(\nu - \omega)s\} \quad (15)$$

および

$$\lambda(t) = \int_0^t ds \int_0^\infty d\nu J(\nu) \sin\{(\nu - \omega)s\} \quad (16)$$

であり ( $\omega = \omega_e - \omega_g$ )、電磁場のスペクトル密度

$J(\nu)$  はローレンツ分布で近似した。

$$J(\nu) = \frac{\alpha^2}{2\pi} \frac{\Gamma}{(\nu - \omega_{cav})^2 + (\Gamma/2)^2} \quad (17)$$

ここで、 $\alpha^2$  は結合定数、 $\omega_{cav}$  は cavity の共鳴周波数であり、 $\Gamma$  はスペクトルの分布の幅を決める定数である。

## 数値計算

JC model では、量子ジャンプが起こると励起状態から基底状態へ変化し、非マルコフ効果で励起状態に戻るチャンネル以外はずっと基底状態に留まり続けるため、量子ジャンプなしに時間発展する状態  $|\Psi_0\rangle$  と 1 回量子ジャンプが起こった状態  $|\Psi_1\rangle = C|\Psi_0\rangle / \|C|\Psi_0\rangle\|$  のみ用意すればよい。これらの状態によって、(2)式は

$$\rho(t) = d_0 |\Psi_0(t)\rangle\langle\Psi_0(t)| + d_1 |\Psi_1(t)\rangle\langle\Psi_1(t)| \quad (18)$$

と簡単になる。ここで、 $d_0$ 、 $d_1$  は

$$d_0 = \frac{N_0}{N}, d_1 = \frac{N_1}{N}, N = N_0 + N_1 \quad (19)$$

であり、 $N_0$  と  $N_1$  は、それぞれ  $|\Psi_0\rangle$  と  $|\Psi_1\rangle$  の状態数である。 $|\Psi_0\rangle$  は(4)式

$$|\Psi_0(t + \delta t)\rangle = \left(1 - \frac{iH\delta t}{\hbar}\right) |\Psi_0(t)\rangle, \quad (20)$$

$$H = H_0 + i\lambda(t) + \frac{1}{2}\gamma(t) \quad (21)$$

により時間発展する。一方量子ジャンプは、 $\gamma(t) > 0$  の場合は確率

$$P_{0 \rightarrow 1}(t) = \gamma(t) \delta t \langle\Psi_0(t)|C^\dagger C|\Psi_0(t)\rangle \quad (22)$$

で  $|\Psi_0\rangle \rightarrow |\Psi_1\rangle$  となり、 $N_0 \rightarrow N_0 - 1$ 、

$N_1 \rightarrow N_1 + 1$  となる。 $\gamma(t) < 0$  の非マルコフ量子ジャンプの場合は、確率

$$P_{1 \rightarrow 0}(t) = \frac{N_0(t)}{N_1(t)} |\gamma(t)| \delta t \langle\Psi_1(t)|C^\dagger C|\Psi_1(t)\rangle \quad (23)$$

で  $|\Psi_1\rangle \rightarrow |\Psi_0\rangle$  となり、 $N_0 \rightarrow N_0 + 1$ 、

$N_1 \rightarrow N_1 - 1$  となる。数値計算では、初期状態を

$|\Psi_0(0)\rangle = (2|g\rangle + 3|e\rangle) / \sqrt{13}$  とし、

$\delta = \omega_{cav} - \omega = 5\Gamma$ 、 $\delta t = 0.01/\Gamma$ 、 $N = 10^5$  と選ん

だ。図 2 に減衰係数  $\gamma(t)$  の計算結果を示す。

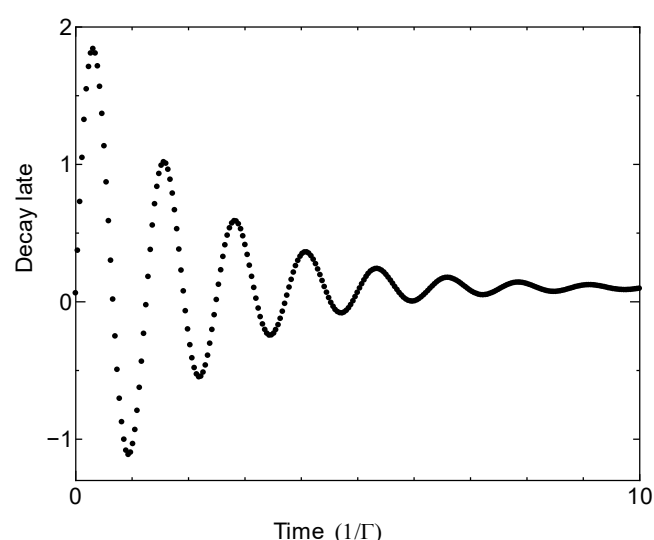


図 2. 減衰係数  $\gamma(t)$

図2において、 $\gamma(t)$ が負になっている部分が、非マルコフ量子ジャンプが起こっている領域である。長時間領域では、マルコフ近似に対応する一定値に近づいていくが、初期には非マルコフ効果が大きく効いていることがわかる。図3は励起状態と基底状態の分布  $\rho_{ee}$  と  $\rho_{gg}$  の時間変化を示したものである。

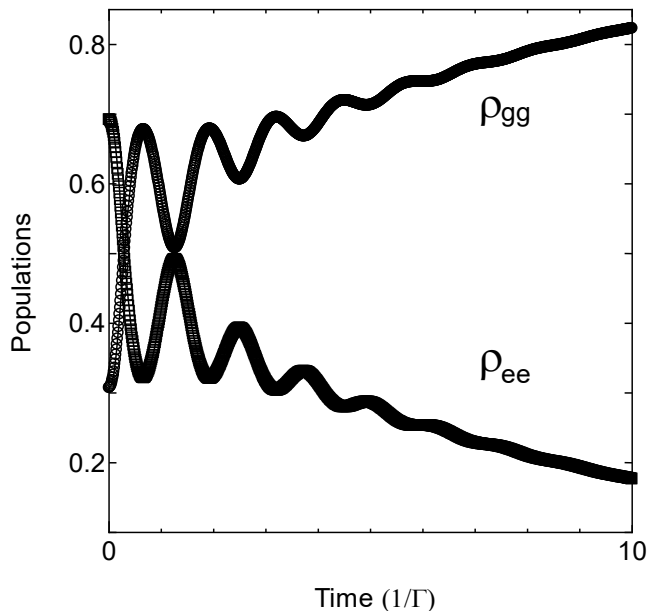


図3. 励起状態  $\rho_{ee}$  と基底状態  $\rho_{gg}$  の時間発展

数値計算の結果を黒丸で、解析解<sup>5</sup>を実線で重ねているが、両者はよく一致していることがわかる。このことから、NMQMが非マルコフ効果を取り込んで、系を正しく記述していることがわかる。図3に見られる振動が非マルコフ効果を表している。すなわち、図2の非マルコフ量子ジャンプが起こる領域 ( $\gamma(t) < 0$ ) では、基底状態から励起状態へという通常の減衰とは逆の遷移が起こるため、非マルコフ効果により励起状態の分布が回復するのである。一方、マルコフ近似のもとでは、このような振動は見られず、指数関数的に単調減衰するだけとなる。

## おわりに

ここで示した NMQM 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。本稿では、NMQM を JC model へ適用し、

解析解と比較した。両者はよく一致しており、この手法が非マルコフ効果を取り入れる有効な手法であることがわかった。非マルコフ効果を厳密に扱う理論はすでにいくつかあるが、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、NMQM 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り、様々な系に適用可能な手法である<sup>6</sup>。

数値計算でみられたように、非マルコフ効果は励起状態の指数関数的減衰を一時的に引き戻す効果がある。これはデコヒーレンスを抑制しているともいえる。量子コンピュータや量子暗号等の量子情報では、量子系のデコヒーレンスをいかに食い止めるかが重要なポイントとなっており、デコヒーレンスの制御に非マルコフ効果が利用できる可能性がある。これは今後の課題としていきたい。

最後に、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<sup>7,8</sup>。あらゆる自然現象に内在しているといってもよいだろう。ここで示した方法は、解析的には解くことが難しい多自由度系について、数値的にはあるが厳密に解くことができる。対象となる系や相互作用の形について特別な制約はないため、ここで示した非マルコフ性を取り込んだ手法は物理の枠を超えて、様々な自然現象に適用することができるだろう。

## 参考文献

- 1) 統計物理学, 1978, 岩波書店
- 2) H. -P. Breuer and F. Petruccione, The Theory of Open Quantum Systems (Oxford University Press, Oxford, 2002).
- 3) J. Piilo et al., Phys. Rev. A 79 (2009) p. 062112.
- 4) W. Ahang et al., Phys. Rev. Lett. 109, 170402 (2012)
- 5) H. -I. Yoo and J. H. Eberly, Phys. Reports 118, (1985) p. 239.
- 6) H. Ezaki, Nonlinear Opt. and Quantum Opt. 48 (2017) p.147.
- 7) E. C. Collini et al., Nature 463 (2010) p.644
- 8) A. W. Chin et al., J. Math. Phys. 51 (2010) p. 092109.