マスター方程式の離散幾何学–拡散方程式の厳密な導出–

統計数理研究所　後藤 振一郎, 日野 英逸
Shin-itiro Goto and Hideitsu Hino
The Institute of Statistical Mathematics

概 要

時間連続マスター方程式は非平衡統計力学等で用いられ, 重要なクラスの方程式である. 本研究では特に有限状態を有する場合を考察し, 連続時間マスター方程式の離散幾何学による定式化を提案する. この定式化により, 一般にマスター方程式は連続の式, 詳細釣り合いの条件が満たされる場合ではマスター方程式は (離散) 拡散方程式と等価であることを厳密に示す.

1　導入

マスター方程式は連続時間もしくは離散時間で離散状態空間上の分布関数の時間発展を決定論的に記述し, 主に非平衡統計力学分野において, 物理系の非平衡過程を記述する時間連続モデルとして用いられる [1]. そして古典系のみならず, 量子系やモンテカルロ法への拡張や応用も可能である [2]. 離散時間の場合で考えると, マスター方程式はチャップマン=コルモゴロフの等式を満たし, マルコフ性をもつ時間発展方程式であることが理解される. そしてチャップマン=コルモゴロフの等式の時間連続極限により, 時間連続のマスター方程式が得られる [3]. 時間離散の場合も応用範囲は広く, 例えば数理生物学等の分野で, マルコフ連鎖モデルを使った現象のモデル化が行われる [4]. こういった応用の広さから, マスター方程式の基礎数理の発展は, 応用数理の様々な分野の発展に繋がるだろう. いくつかの未解決問題があるが, その一つとして次が挙げられる. 時間連続のマスター方程式では, いくつかの場合に近似を用いて偏微分方程式である (空間連続) 拡散方程式が導かれる. 拡散方程式は数理物理学で頻繁に現れ, 重要な方程式の一つである. では, 状態空間を連続近似しないとき, (空間離散) 拡散方程式はどのように定義され, どの条件が満たされる場合に導出されるのであろうか.

グラフ理論は位相幾何学と相性がよく, 物理学や数理工学への応用もいくつかある [5, 6]. そのグラフ理論や位相幾何学を基礎にして無限グラフを含む広範な対象に対し, グラフ上の関数とその内積を導入し, 離散幾何学と呼ばれる体系が整備された [7]. 現在までに結晶上のランダムウォークや電気回路への応用がなされている [6, 7]. 通常の多様体上で展開される微分幾何学では, 外微分 d が定義され, 更に内積が導入されていれば, 適当な条件を満たすとき d の随伴 $\mathrm{d}^\dagger$ が誘導される. これらは自己共役演算子であるラプラシアンを誘導する. 多様体上のラプラシアン, d, $\mathrm{d}^\dagger$ に加え, 更なる演算子が導入され, 数学解析のみならず物理学などに応用されてきた [8]. そういった研究の一つとして, 多様体上の拡散方程式 (熱方程式) が調べられた [9]. 離散幾何学の場合においても, d や内積が定義され, 従って d の随伴が定義され, ラプラシアンを誘導する [7, 10]. こういったグラフ上の関数に作用する演算子は通常の連続の場合である微分幾何学と同様に様々な情報を引き出し, 種々の応用が生まれると期待できる [7, 10].

時間連続のマスター方程式において, グラフ理論を用いた解析が知られている [11]. マスター方程式は離散状態空間上での力学系であって, 離散空間はグラフと相性がよいからである. しかし, 近年開発された離散幾何学の知見は活かされていない. 本研究ではそれらの知見を活かすための第一歩として, 離散幾何学を時間連続かつ有限状態を有するマスター方程式へ適用し, 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 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 5).

これ以降の本稿の構成は以下である．2 節で離散幾何学の準備, 3 節でマスター方程式の議論を行い, 上の主張やそれに付随する命題を示す．物理系での例も示す．4 節で本研究のまとめを簡単に述べる．なお, 本稿内容の詳細や, 更なる関連文献は [12] を参照して頂きたい.

2 準備

本節で次節以降で用いる数学の準備を行う.

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 [7] 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：

$$\underset{\mathrm{o}(e)}{\bullet}\xrightarrow[e]{\hspace{2em}}\underset{\mathrm{t}(e)}{\bullet}\ ,\qquad\qquad \underset{\mathrm{t}(\overline{e})}{\bullet}\xleftarrow[\overline{e}]{\hspace{2em}}\underset{\mathrm{o}(\overline{e})}{\bullet}\ .$$

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 $C_0(G)$ や **1-鎖**の群 $C_1(G)$ を

$$C_0(G):=\left\{\sum_{x\in V}a_x x\,\middle|\,a_x\in\mathbb{R}\right\},\qquad C_1(G):=\left\{\sum_{e\in E}a_e e\,\middle|\,a_e\in\mathbb{R}\right\},$$

とする．ただし $\sum_{x\in V}$ は V 内のすべての頂点 x に関して和をとることを表し, $\sum_{e\in E}$ は E 内のすべての辺 e に関して和をとることを表す．集合 $C_0(G)$ や $C_1(G)$ の上の関数が属する集合をそれぞれ

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

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：

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

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

$$(\mathrm{d}f)(e)=f(\mathrm{t}(e))-f(\mathrm{o}(e)),\tag{1}$$

で定義する．**内積** $\langle\cdot,\cdot\rangle_V:\Lambda^0(G)\times\Lambda^0(G)\to\mathbb{R}$, 及び $\langle\cdot,\cdot\rangle_E:\Lambda^1(G)\times\Lambda^1(G)\to\mathbb{R}$ 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

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

と定義する．定義により内積は常に m_V や m_E に依存する．この m_V は m_E を定めたのち, 次のように余微分やラプラシアンが定まる．**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：

$$(\mathrm{d}^\dagger\omega)(x) = \frac{-1}{m_V(x)}\sum_{e\in E_x}\omega(e)m_E(e), \tag{2}$$
$$E_x := \{e\in E \mid \mathrm{o}(e)=x\}.$$

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, 以下が成立することが確認できる：

$$\langle\Delta_V f_1, f_2\rangle_V = \langle f_1, \Delta_V f_2\rangle_V,\qquad \langle\Delta_E\omega_1,\omega_2\rangle_E = \langle\omega_1,\Delta_E\omega_2\rangle_E.$$

更に, ラプラシアン Δ_V の $f\in\Lambda^0(G)$ の作用は $x\in V$ で以下のように表すことができる：

$$(\Delta_V f)(x) = \frac{1}{m_V(x)}\sum_{e\in E_x}(\mathrm{d}f)(e)\,m_E(e) = \frac{1}{m_V(x)}\sum_{e\in E_x}[\,f(\mathrm{t}(e)) - f(\mathrm{o}(e))\,]\,m_E(e). \tag{3}$$

演算 d が線形性をもち, (3) から Δ_V は線形である, $\Delta_V(c_1f_1+c_2f_2) = c_1\Delta_Vf_1+c_2\Delta_Vf_2$, $(c_1,c_2\in\mathbb{R})$. また, ラプラシアン Δ_V 及び Δ_E は, m_V 及び m_E の指定後に定まることを改めて注意しておく.

3 マスター方程式

本節では, まず時間連続のマスター方程式の必要最低限の説明し, 次にマスター方程式を 2 節で導入した空間や演算子で記述する. そして主定理を示す. また例も与える.

マスター方程式とは以下の形の常微分方程式系のことである [1, 2, 13]

$$\dot{p}_t(x) = -\sum_{x'(\neq x)} w_{x\to x'}p_t(x) + \sum_{x'(\neq x)} w_{x'\to x}\,p_t(x'), \tag{4}$$

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し, 本稿を通して w は時間によらず一定であるとする. また w は $\sum_{x\in\Gamma}\dot{p}_t(x)=0$ なる確率保存則を満たすように選ばれているとする.

3.1 離散幾何学的表示

式 (4) をグラフや離散幾何学の言葉で書こう. 与えられたデータ $\{x\}$, $\{w_{x\to x'}\}$ に付随したグラフ $G=(V,E)$ と $w\in C^1(G)$ を以下のように導入する：

- 状態 x を V の元とみなす, すなわち, $x\in V$.
- $w\in C^1(G)$ と $e\in E$ を $w(e)=w_{x\to x'}$ かつ $\mathrm{o}(e)=x$, $\mathrm{t}(e)=x'$ 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, $w(\overline{e})=w_{x'\to x}$ が存在しない場合, $w(\overline{e})=0$.

グラフ G 上に p_t 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 $p_t(x)$.

これにより, (4) は以下のように書ける：

$$\dot{p}_t(x) = -\sum_{e\in E_x} p_t(\mathrm{o}(e))\,w(e) + \sum_{e\in E^x} p_t(\mathrm{o}(e))\,w(e), \quad \text{ここで} \quad E^x := \{e \in E \,|\, \mathrm{t}(e) = x\}. \tag{5}$$

式 (5) と (4) の対応は次に述べるように明らかである．式 (5) での初めの (つまり $e \in E_x$ での) 頂点 $\mathrm{o}(e)$ と次の (つまり $e \in E^x$ での) 頂点 $\mathrm{o}(e)$ はそれぞれ (4) における x と x' に対応する．また, (5) での初めの $w(e)$ と 次の $w(e)$ はそれぞれ (4) における $w_{x\to x'}$ と $w_{x'\to x}$ に対応する．式 (5) はグラフの構成の仕方から以下のように更に変形できる．与えられた $x \in V$ と $e \in E^x$ に対して次のような $e' \in E_x$ が存在する：

$$x = \mathrm{t}(e) = \mathrm{o}(e'), \qquad \text{つまり} \qquad \begin{tikzcd} \underset{x'}{\bullet} \arrow[r, bend left, "e"] & \underset{x}{\bullet} \arrow[l, bend left, "e'"] \end{tikzcd}.$$

これにより, $\mathrm{o}(e) = \mathrm{t}(e')$ 及び $e = \overline{e'}$ であるから (5) の $\sum_{e\in E^x}\cdots$ の部分は以下のように書ける：

$$\sum_{e\in E^x} p_t(\mathrm{o}(e))\,w(e) = \sum_{e'\in E_x} p_t(\mathrm{t}(e'))\,w(\overline{e'}).$$

この書き換えを用いて以下を得る：

$$\dot{p}_t(x) = -\sum_{e\in E_x} \mathcal{I}_t(e), \qquad \mathcal{I}_t(e) := p_t(\mathrm{o}(e))\,w(e) - p_t(\mathrm{t}(e))\,w(\overline{e}). \tag{6}$$

ここで (6) の $\mathcal{I}_t$ の性質を調べよう．すべての $e \in E$ に対して $\mathrm{o}(\overline{e}) = \mathrm{t}(e)$, $\mathrm{t}(\overline{e}) = \mathrm{o}(e)$, $\overline{\overline{e}} = e$ であるから

$$\mathcal{I}_t(\overline{e}) = p_t(\mathrm{o}(\overline{e}))\,w(\overline{e}) - p_t(\mathrm{t}(\overline{e}))\,w(\overline{\overline{e}}) = p_t(\mathrm{t}(e))\,w(\overline{e}) - p_t(\mathrm{o}(e))\,w(e) = -\mathcal{I}_t(e),$$

となる．よって $\mathcal{I}_t \in \Lambda^1(G)$ であり, 余微分 $\mathrm{d}^\dagger : \Lambda^1(G) \to \Lambda^0(G)$ の $\mathcal{I}_t$ に対する作用が定まる．

定理を述べるために記号を準備する．V と E 上の関数

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

をすべての $x \in V$ と $e \in E$ で,

$$1_V(x) = 1, \qquad 1_E(e) = 1,$$

が成立するものとする．また以下も用いる．$0_V \in \Lambda^0(G)$ と $0_E \in S^1(G)$ をすべての $x \in V$ と $e \in E$ で

$$0_V(x) = 0, \qquad 0_E(e) = 0,$$

を満たすものとして定義しておく．

以上の準備のもと, 以下の定理が得られる．

定理 1． 3 (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 (6) は

$$\dot{p}_t = \mathrm{d}^\dagger \mathcal{I}_t. \tag{7}$$

証明． 余微分の表示 (2) において $m_V = 1_V$, $m_E = 1_E$ の場合, 任意の $x \in V$ で $(\mathrm{d}^\dagger\mathcal{I}_t)(x) = -\sum_{e\in E_x}\mathcal{I}_t(e)$. これと (6) を比べ, x が任意であったことを使うと題意が示される． □

注意 2． 連続体力学との対比では, (7) は以下に説明するように連続の式に対応する．なお, 微分幾何学を使って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．離散幾何学の場合でも div を $\mathrm{div} : \Lambda^1(G) \to \Lambda^0(G)$ を $\mathrm{div} = -\mathrm{d}^\dagger$ で定めれば, (7) は $\dot{p}_t + \mathrm{div}\mathcal{I}_t = 0$ であり, 連続の式とみなすことができる．

注意 3. 確率保存則を以下のように確かめることができる．まず, (7) と $\mathrm{d}^\dagger$ が d の随伴であることにより,

$$\sum_{x\in V}\dot{p}_t(x)=\langle\,\dot{p}_t\,,\,1_V\,\rangle_V=\left\langle\,\mathrm{d}^\dagger\mathcal{I}_t\,,\,1\,\right\rangle_V=\langle\,\mathcal{I}_t\,,\,\mathrm{d}1_V\,\rangle_E\,. \tag{8}$$

この (8) の最右辺がゼロであることを示す．まず 1_V の定義と d の定義の (1) により任意の $e\in E$ に対し

$$(\mathrm{d}1_V)(e)=1_V(\mathrm{t}(e))-1_V(\mathrm{o}(e))=1-1=0. \tag{9}$$

すなわち, $\mathrm{d}1_V=0_E$. これにより, $\langle\,\mathcal{I}_t\,,\,\mathrm{d}1_V\,\rangle_E=\langle\,\mathcal{I}_t\,,\,0_E\,\rangle_E=0$ となり, (8) の最右辺は消える．

3.2 詳細釣り合い条件を満たす場合

この小節では, マスター方程式をある条件を満たす場合を考察することにより, 定理 1 が変数変換と内積の重みをうまく選ぶと, 拡散方程式と等価であることを示す．ここで「ある条件」とは, 「詳細釣り合い条件」と呼ばれる条件である．その後, 導出された拡散方程式の性質を述べる．

詳細釣り合い条件とは $p^{\mathrm{eq}}\in\Lambda^0(G)$ があってマスター方程式における $w\in C^1(G)$ が任意の $e\in E$ で

$$p^{\mathrm{eq}}(\mathrm{o}(e))\,w(e)=p^{\mathrm{eq}}(\mathrm{t}(e))\,w(\overline{e}), \tag{10}$$

を満たす場合のことをいう．本小節では詳細釣り合い条件は常に満たされるとし, 更にどんな $x\in V$ に対しても $p^{\mathrm{eq}}(x)\neq 0$ と仮定する．任意の $x\in V$ や $e\in E$ に対して以下のように置く：

$$m_V(x)=p^{\mathrm{eq}}(x),\quad m_E(e)=w(e)\,p^{\mathrm{eq}}(\mathrm{o}(e)). \tag{11}$$

この (11) のとき, ラプラシアン Δ_V は以下で表されることが代入により確かめられる：

補題 4. ラプラシアンの表示 (3) において (11) の場合は

$$(\Delta_V f)(x)=\sum_{e\in E_x}w(e)\,[\,f(\mathrm{t}(e))-f(\mathrm{o}(e))\,]\,. \tag{12}$$

以下が本稿の主定理である：

定理 5. (拡散方程式). マスター方程式が詳細釣り合い条件を満たし, $p^{\mathrm{eq}}\in\Lambda^0(G)$ が与えられており, 条件 $p^{\mathrm{eq}}(x)\neq 0$ をどんな $x\in V$ でも満たすとする．このとき, $\psi_t\in\Lambda^0(G)$ を

$$p_t(x)=p^{\mathrm{eq}}(x)\,\psi_t(x) \tag{13}$$

となるように定義し, 内積の重みを (11) で定める．このとき ψ_t は以下を満たす：

$$\dot{\psi}_t=\Delta_V\,\psi_t. \tag{14}$$

証明. 式 (13) を (6) へ代入し, 条件 (10) による $w(\overline{e})=p^{\mathrm{eq}}(\mathrm{o}(e))\,w(e)/p^{\mathrm{eq}}(\mathrm{t}(e))$ を用いると任意の $x\in V$ で

$$\begin{aligned}
p^{\mathrm{eq}}(x)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\psi_t(x) &= \sum_{e\in E_x}w(e)\,\left[\frac{p^{\mathrm{eq}}(\mathrm{o}(e))}{p^{\mathrm{eq}}(\mathrm{t}(e))}p^{\mathrm{eq}}(\mathrm{t}(e))\,\psi_t(\mathrm{t}(e))-p^{\mathrm{eq}}(\mathrm{o}(e))\psi_t(\mathrm{o}(e))\right]\\
&= \sum_{e\in E_x}w(e)\,\left[\,p^{\mathrm{eq}}(\mathrm{o}(e))\,\psi_t(\mathrm{t}(e))-p^{\mathrm{eq}}(\mathrm{o}(e))\psi_t(\mathrm{o}(e))\,\right].
\end{aligned}$$

両辺を $p^{\mathrm{eq}}(x)$ で割り, そして $\sum_{x\in E_x}[\cdots]$ の中では $p^{\mathrm{eq}}(x)=p^{\mathrm{eq}}(\mathrm{o}(e))$ であることを使うと,

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

ラプラシアンの表示 (12) と x が任意であったことから (14) が得られる． □

注意 6. 式 (14)w は左辺に時間微分, 右辺にラプラシアンが現れ, 本稿では (11) を (空間離散) 拡散方程式と呼ぶ.

注意 7. 確率保存則を以下のように確かめることができる. まず (13),(14), 及び内積の定義等から

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\sum_{x\in V} p_t(x) = \sum_{x\in V} p^{\mathrm{eq}}(x)\dot{\psi}_t(x) = \langle\, \Delta_V\psi_t\,,\, 1_V\,\rangle_V = \langle\, \psi_t\,,\, \Delta_V 1_V\,\rangle_V\,.$$

上式最右辺での $\Delta_V 1_V$ を d と $\mathrm{d}^\dagger$ で書くと $\Delta_V 1_V = -\mathrm{d}^\dagger\,\mathrm{d}1_V$ であり, さらに (9) から $\mathrm{d}1_V = 0_E$ である. 式 (2) から $\mathrm{d}^\dagger 0_E = 0_V$. よって $\Delta_V 1_V = -\mathrm{d}^\dagger 0_E = 0_V$. これから $\langle\, \psi_t\,,\, \Delta_V 1_V\,\rangle_V = 0$.

また, リアプノフ関数が見つかり, 以下が証明できる [12]：

$$\lim_{t\to\infty} p_t(x) = p^{\mathrm{eq}}(x), \qquad \forall x\in V. \tag{15}$$

性質 (15) を緩和という. また, (15) を踏まえ p^{eq} を平衡分布関数と呼ぶ. 緩和に付随して以下がいえる：

命題 8. (KL ダイバージェンスに対する不等式).

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}D(\,p_t\,\|\,p^{\mathrm{eq}}\,) \le 0, \qquad \text{ここで} \qquad D(\,p_t\,\|\,p^{\mathrm{eq}}\,) := \sum_{x\in V} p_t(x)\ln\frac{p_t(x)}{p^{\mathrm{eq}}(x)}.$$

証明. 時間微分を実行し (13) を使うと,

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}D(\,p_t\,\|\,p^{\mathrm{eq}}\,) = \sum_{x\in V} p^{\mathrm{eq}}(x)\dot{\psi}_t(1+\ln\psi_t(x)).$$

この等式に不等式 $1+\ln\xi\le\xi$, $(\xi\ge 0)$, $\psi_t(x)\ge 0$, (14), 等を適用して以下を得る：

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}D(\,p_t\,\|\,p^{\mathrm{eq}}\,) \le \sum_{x\in V} p^{\mathrm{eq}}(x)\dot{\psi}_t\psi_t(x) = \left\langle\, \dot{\psi}_t\,,\, \psi_t\,\right\rangle_V = \langle\, \Delta_V\,\psi_t\,,\, \psi_t\,\rangle_V = -\,\langle\, \mathrm{d}\psi_t\,,\, \mathrm{d}\psi_t\,\rangle_E\,.$$

不等式 $\langle\, \mathrm{d}\psi_t\,,\, \mathrm{d}\psi_t\,\rangle_E \ge 0$ を上式の最右辺に適用すると題意が示される. □

ラプラシアン固有値問題とその応用

ラプラシアンの固有値問題の解析は, 通常のリーマン幾何学ではよく知られており, 離散幾何学での対応物を調べる問題は基本的である. また, 拡散方程式 (14) は線形であるため, $\Lambda^0(G)$ や $\Lambda^1(G)$ 等は以後全て (実) 線形空間とする. また有限グラフを考えているので有限次元の線形空間である. この場合, 固有値問題の解とそれに関わる情報がどのように拡散方程式 (14) の解の表示に現れるかを以下で概観する.

ラプラシアン $\Delta_V : \Lambda^0(G)\to\Lambda^0(G)$ は計量線形空間に作用する線形演算子である. ここでも m_V や m_E は (11) で定まっていることを注意しておく. 以下の補題は後の解析で役立つ.

補題 9. 固有値問題

$$\Delta_V\phi_V^{(s)} = \lambda_V^{(s)}\phi_V^{(s)}, \tag{16}$$

において s でラベル付けされる固有値 $\lambda_V^{(s)}$ は実数で特に, $\lambda_V^{(s)}\le 0$ である, ここで $\phi_V^{(s)}\in\Lambda^0(G)$ は恒等的にゼロにならないものとする. また, $\{\phi_V^{(s)}\}$ は $\Lambda^0(G)$ を張る基底になり, 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

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

証明. 固有値がゼロではないと仮定する, $\widetilde{\lambda}_V^{(s)} \neq 0$. そしてすべての $\phi_V^{(s)}(\neq 0_V)$ に対して (16) を使うと,

$$\widetilde{\lambda}_V^{(s)} \left\langle \widetilde{\phi}_V^{(s)}, \widetilde{\phi}_V^{(s)} \right\rangle_V = \left\langle \widetilde{\lambda}_V^{(s)} \widetilde{\phi}_V^{(s)}, \widetilde{\phi}_V^{(s)} \right\rangle_V = \left\langle \Delta_V \widetilde{\phi}_V^{(s)}, \widetilde{\phi}_V^{(s)} \right\rangle_V = -\left\langle \mathrm{d}\widetilde{\phi}_V^{(s)}, \mathrm{d}\widetilde{\phi}_V^{(s)} \right\rangle_E .$$

仮定の $\phi_V^{(s)} \neq 0_V$ より, $\left\langle \widetilde{\phi}_V^{(s)}, \widetilde{\phi}_V^{(s)} \right\rangle_V \in \mathbb{R}$ 及び $\left\langle \mathrm{d}\widetilde{\phi}_V^{(s)}, \mathrm{d}\widetilde{\phi}_V^{(s)} \right\rangle_E \in \mathbb{R}$ だから $\widetilde{\lambda}_V^{(s)} \in \mathbb{R}$. そして $\left\langle \mathrm{d}\widetilde{\phi}_V^{(s)}, \mathrm{d}\widetilde{\phi}_V^{(s)} \right\rangle_E > 0$ より

$$\widetilde{\lambda}_V^{(s)} \left\langle \widetilde{\phi}_V^{(s)}, \widetilde{\phi}_V^{(s)} \right\rangle_V = -\left\langle \mathrm{d}\widetilde{\phi}_V^{(s)}, \mathrm{d}\widetilde{\phi}_V^{(s)} \right\rangle_E \leq 0. \tag{17}$$

かつ $\widetilde{\lambda}_V^{(s)} \neq 0$, $\left\langle \widetilde{\phi}_V^{(s)}, \widetilde{\phi}_V^{(s)} \right\rangle_V > 0$, $\left\langle \mathrm{d}\widetilde{\phi}_V^{(s)}, \mathrm{d}\widetilde{\phi}_V^{(s)} \right\rangle_E > 0$ を (17) に使うと, $\widetilde{\lambda}_V^{(s)} < 0$. よって固有値がゼロである可能性を含めると, $\widetilde{\lambda}_V^{(s)} \leq 0$. 線形変換 Δ_V は計量線形空間の正規変換であることが確かめられ $(\Delta_V^{\dagger}\Delta_V = \Delta_V \Delta_V^{\dagger})$, 線形代数学の一般論を適用すると, Δ_V の固有ベクトルからなる正規直交基底が存在する [14]. 1_V が正規性をもつゼロ固有関数であることは以下のように示される：

$$\langle 1_V, 1_V \rangle_V = \sum_{x \in V} p^{\mathrm{eq}}(x) = 1, \qquad \text{及び} \qquad \Delta_V 1_V = -\mathrm{d}^{\dagger}\mathrm{d}1_V = -\mathrm{d}^{\dagger}0_E = 0_V .$$

□

補題 9 を用いて以下を示すことができる.

命題 10. (固有分解). $\{\lambda_V^{(s)}\}_{s \in \mathcal{N}_V}$ を 0 ではない, $s \in \mathcal{N}_V$ でラベル付けされる Δ_V の固有値全体とする. すると (14) の初期値問題の解は $a^{(s)}(0) \in \mathbb{R}$ を定数として

$$\psi_t = \sum_{s \in \mathcal{N}_V} a^{(s)}(0)\, \mathrm{e}^{-|\lambda_V^{(s)}|t} \phi_V^{(s)} + 1_V . \tag{18}$$

証明. 証明は空間連続の拡散方程式のフーリエ解析と同様の手順で行われる. 適当な実数値をとる時間 $t \in \mathbb{R}$ の関数 $a^{(s)} : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$(ただし s はゼロ固有値も含むすべての固有値のラベル), 及び補題 9 を使って拡散方程式の解 ψ_t を以下のように展開する：

$$\psi_t = \sum_s a^{(s)}(t) \phi_V^{(s)} = \sum_{s \in \mathcal{N}_V} a^{(s)}(t) \phi_V^{(s)} + a^{(0)}(t) \phi_V^{(0)} .$$

この展開を (14) へ代入し, 内積を $\phi_V^{(s)}$ ととること, 補題 9 の正規直交性や $\lambda_V^{(s)} \leq 0$ を使って以下を得る：

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} a^{(s)} = \lambda_V^{(s)} a^{(s)}, \qquad \text{つまり} \quad a^{(s)}(t) = a^{(s)}(0)\, \mathrm{e}^{-|\lambda_V^{(s)}|t} .$$

特にゼロ固有値については任意の時刻 t で $a^{(0)}(t) = a^{(0)}(0)$. これと (15) による $\lim_{t\to\infty} \psi_t = 1_V$ により $a^{(0)}(t)\, \phi_V^{(0)} = 1_V$. よって証明が完了する. □

命題 10 において Δ_V のゼロ固有ベクトル $\phi_V^{(0)} = 1_V$ は平衡状態に対応する. 一方, 非ゼロ固有ベクトルは非平衡状態に対応し, 非ゼロ固有値は緩和への収束を特徴付ける.

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 11. (超対称性). ラプラシアン Δ_V と Δ_E の 0 以外の固有値は全て一致する.

証明. 文献 [8] にある手順と同様にして証明される [12]. □

命題 11 により Δ_V と Δ_E の非ゼロ固有値は区別する必要はない. そして, 拡散方程式 (14) から $\Lambda^1(G)$ 上の拡散方程式も得られることを注意しておく：

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

期待値に対する閉じた方程式

物理学では分布関数が与えられたとき, 物理量の期待値が従う時間発展方程式を知りたい場合がある. ここではそのような方程式を期待値方程式と呼び, それが厳密に導出されるクラスを以下で与える.

マスター方程式の解 $p_t = p^{\rm eq}\psi_t$ と $\mathcal{O}^{(0)} \in \Lambda^0(G)$ が与えられたとき, $\mathcal{O}^{(0)}$ の時刻 $t \in \mathbb{R}$ での期待値は以下のように書くことができる：

$$\mathbb{E}[\mathcal{O}^{(0)}](t) = \sum_{x\in V} p_t(x)\mathcal{O}^{(0)}(x) = \left\langle \psi_t\,,\,\mathcal{O}^{(0)} \right\rangle_V .$$

このとき, (18) もしくは (15) から $t \to \infty$ では

$$\lim_{t\to\infty} \mathbb{E}[\mathcal{O}^{(0)}](t) = \sum_{x\in V} p^{\rm eq}(x)\,\mathcal{O}^{(0)}(x) = \left\langle 1_V\,,\,\mathcal{O}^{(0)} \right\rangle_V .$$

本稿では $\mathcal{O}^{(0)}$ を (頂点上で定義された) 物理量と呼ぶことにする. 任意の時刻 t については系を制限すれば期待値の時間発展を厳密に議論することができる. 特に以下のような力学系が厳密に導出される：

命題 12. (期待値方程式). 物理量 $\mathcal{O}^{(0)}$ の時刻 t での期待値 $\mathbb{E}[\mathcal{O}^{(0)}](t)$ を $\langle \mathcal{O}^{(0)} \rangle_V(t)$ と書くとする. 以下の 2 条件を考える. (1) $\mathcal{O}^{(0)}$ そのものが時間に依存しない場合, (2) $|\mathcal{N}_V| = 1$ と非ゼロ固有値の数がただ 1 つの場合で, それを $\lambda^{(1)}(<0)$ と表す. この条件 2 つを同時に満たすとき, $\langle \mathcal{O}^{(0)} \rangle_V(t)$ は以下の $\mathbb{R}$ 上の常微分方程式系の解になる：

$$\frac{\rm d}{{\rm d}t}\left\langle \mathcal{O}^{(0)} \right\rangle_V = \lambda^{(1)}\left(\left\langle \mathcal{O}^{(0)} \right\rangle_V - \left\langle \mathcal{O}^{(0)} \right\rangle_V^{\rm eq} \right), \quad ここで \quad \left\langle \mathcal{O}^{(0)} \right\rangle_V^{\rm eq} = \sum_{x\in V} \mathcal{O}^{(0)}(x)\,p^{\rm eq}(x). \tag{19}$$

証明. 変数 $\langle \mathcal{O}^{(0)} \rangle_V(t)$ の時間微分を計算すれば証明できる. まず, 微分を実行して

$$\frac{\rm d}{{\rm d}t}\left\langle \mathcal{O}^{(0)} \right\rangle_V(t) = \left\langle \dot\psi_t\,,\,\mathcal{O}^{(0)} \right\rangle_V = \left\langle \lambda^{(1)}a^{(1)}(t)\,\phi_V^{(1)}\,,\,\mathcal{O}^{(0)} \right\rangle_V = \lambda^{(1)}a^{(1)}(t)\left\langle \phi_V^{(1)}\,,\,\mathcal{O}^{(0)} \right\rangle_V .$$

上式最右辺は $\langle \mathcal{O}^{(0)} \rangle_V(t)$ で書きかえることができる. その書き換えのために

$$\left\langle \mathcal{O}^{(0)} \right\rangle_V(t) = \left\langle a^{(1)}(t)\phi_V^{(1)} + 1_V\,,\,\mathcal{O}^{(0)} \right\rangle_V = a^{(1)}(t)\left\langle \phi_V^{(1)}\,,\,\mathcal{O}^{(0)} \right\rangle_V + \left\langle \mathcal{O}^{(0)} \right\rangle_V^{\rm eq},$$

を用いると題意が示される. □

なお, (19) の解は以下で与えられる：

$$\left\langle \mathcal{O}^{(0)} \right\rangle_V(t) = {\rm e}^{-|\lambda^{(1)}|\,t}\left\langle \mathcal{O}^{(0)} \right\rangle_V(0) + \left(1 - {\rm e}^{-|\lambda^{(1)}|\,t}\right)\left\langle \mathcal{O}^{(0)} \right\rangle_V^{\rm eq}.$$

動的イジング模型での例

動的イジング模型 (もしくはキネティックイジング模型 [13]) 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 [15] を考察し, 本稿で定式化した方法がどのように機能するかを概観する. まずその模型を導入しよう.

定義 13. $\sigma = \pm 1$ をスピン変数と呼び, 平衡分布関数 $p_{\rm I}^{\rm eq}(\sigma)$ が与えられているとする. 分布関数 $p_{t\,{\rm I}}(\sigma)$ の発展方程式は以下で与えられているとする：

$$\dot p_{t,{\rm I}}(\sigma) = -\,w^{\rm I}_{\sigma\to-\sigma}\,p_{t,{\rm I}}(\sigma) + w^{\rm I}_{-\sigma\to\sigma}\,p(-\sigma), \quad \sigma = \pm 1. \tag{20}$$

ここで, $w^{\rm I}_{-1\to 1} \in \mathbb{R}$ 及び $w^{\rm I}_{1\to -1} \in \mathbb{R}$ は詳細釣り合いの条件を満たす t によらない定数とする. すなわち,

$$w^{\rm I}_{\sigma\to-\sigma}\,p_{\rm I}^{\rm eq}(\sigma) = w^{\rm I}_{-\sigma\to\sigma}\,p_{\rm I}^{\rm eq}(-\sigma), \tag{21}$$

この力学系を本稿では (スピン間結合なし) **動的イジング模型**と呼ぶ.

以下では本稿で議論した一般論のいくつかを, この動的イジング模型に適用する. 動的イジング模型 (20) でのグラフ表示は

$$\begin{tikzcd} \underset{\sigma=1}{\bullet} \arrow[r, bend left, "e'"] & \underset{\sigma=-1}{\bullet} \arrow[l, bend left, "e''"] \end{tikzcd}, \quad \{e'\}=E_1, \quad \{e''\}=E_{-1}, \quad w(e')=w^{\mathrm{I}}_{1\to-1}, \quad w(e'')=w^{\mathrm{I}}_{-1\to 1}.$$

変数 $\psi_{t,\mathrm{I}}\in\Lambda^0(G)$ を (13) に従い

$$p_{t,\mathrm{I}}(\sigma)=p^{\mathrm{eq}}_{\mathrm{I}}(\sigma)\,\psi_{t,\mathrm{I}}(\sigma), \quad \sigma=\pm1,$$

と導入する. この変数 $\psi_{t,\mathrm{I}}$ の満たす方程式は上式の (20) への代入と (21) により

$$\dot{\psi}_{t,\mathrm{I}}(\sigma)=w^{\mathrm{I}}_{\sigma\to-\sigma}[\,\psi_{t,\mathrm{I}}(-\sigma)-\psi_{t,\mathrm{I}}(\sigma)\,], \qquad \sigma=\pm1,$$

である. 右辺を (12) と比較することにより, 上式は (14) の拡散方程式であることが確認できる. 補題 9 はこのモデルの場合どのようになるかみるために行列表示

$$\begin{pmatrix} \dot{\psi}_{t,\mathrm{I}}(-1) \\ \dot{\psi}_{t,\mathrm{I}}(+1) \end{pmatrix} = M_{\mathrm{I}} \begin{pmatrix} \psi_{t,\mathrm{I}}(-1) \\ \psi_{t,\mathrm{I}}(+1) \end{pmatrix}, \qquad \text{ここで} \quad M_{\mathrm{I}} := \begin{pmatrix} -w_{-1\to+1} & w_{-1\to+1} \\ w_{+1\to-1} & -w_{+1\to-1} \end{pmatrix},$$

をとる. すると M_{I} の固有値

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

は確かに実数であり, 固有ベクトルは以下である：

$$\begin{pmatrix} \phi^{(0)}_{\mathrm{I}}(-1) \\ \phi^{(0)}_{\mathrm{I}}(+1) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \phi^{(1)}_{\mathrm{I}}(-1) \\ \phi^{(1)}_{\mathrm{I}}(+1) \end{pmatrix} = c_{\mathrm{I}} \begin{pmatrix} w^{\mathrm{I}}_{-1\to+1} \\ -w^{\mathrm{I}}_{+1\to+1} \end{pmatrix}, \text{ ここで } c_{\mathrm{I}} := \left[\sum_{\sigma=\pm1}(w^{\mathrm{I}}_{\sigma\to-\sigma})^2\,p^{\mathrm{eq}}_{\mathrm{I}}(\sigma)\right]^{-1/2}.$$

正規直交性は例えば以下のように確認できる：

$$\begin{aligned} \left\langle \phi^{(0)}_{\mathrm{I}}, \phi^{(0)}_{\mathrm{I}} \right\rangle_V &= \sum_{\sigma=\pm1} p^{\mathrm{eq}}_{\mathrm{I}}(\sigma)=1, \\ \left\langle \phi^{(0)}_{\mathrm{I}}, \phi^{(1)}_{\mathrm{I}} \right\rangle_V &= \sum_{\sigma=\pm1} \phi^{(0)}_{\mathrm{I}}(\sigma)\,\phi^{(1)}_{\mathrm{I}}(\sigma)\,p^{\mathrm{eq}}_{\mathrm{I}}(\sigma) = c_{\mathrm{I}}\left[\,w^{\mathrm{I}}_{-1\to+1}\,p^{\mathrm{eq}}_{\mathrm{I}}(-1)-w^{\mathrm{I}}_{+1\to-1}\,p^{\mathrm{eq}}_{\mathrm{I}}(+1)\,\right]=0, \end{aligned}$$

ここで $p^{\mathrm{eq}}_{\mathrm{I}}$ の規格化条件や (21) を用いた.

モデルを更に具体的にしてみよう. 文献 [15] ではパラメーター $\theta\in\mathbb{R}$, $\gamma\in\mathbb{R}_+$ を用い

$$p^{\mathrm{eq}}_{\mathrm{I}}(\sigma;\theta)=\frac{\exp(\,\theta\sigma\,)}{2\cosh\theta}, \qquad w^{\mathrm{I}}_{\sigma\to-\sigma}(\theta,\gamma)=\frac{\gamma}{2}(1-\sigma\tanh\theta),$$

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：

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

命題 12 を用いて期待値方程式を導出しよう. ここでは物理量 $\mathcal{O}^{(0)}$ として $\mathcal{O}^{(0)}(\sigma)=\sigma$ の場合を考える. この場合, 時間の関数である期待値 $\langle\,\sigma\,\rangle_V\,(t)$ が従う力学系が次のように得られる. まず $\lambda^{(1)}=-\gamma$, かつ

$$\langle\,\sigma\,\rangle^{\mathrm{eq}}_V=\sum_{\sigma=\pm1}p^{\mathrm{eq}}_{\mathrm{I}}(\sigma)\sigma=\tanh(\theta),$$

である. そして, (19) の適用により以下のように期待値方程式が得られる [15, 12]：

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\,\sigma\,\rangle_V=-\gamma\,(\langle\,\sigma\,\rangle_V-\tanh\theta)\,.$$

4 結語

本稿では [12] に従い, 非平衡統計力学で用いられる時間連続のマスター方程式において, 特に有限状態を有する場合について離散幾何学を用いた定式化の解説をした. まずマスター方程式を離散幾何学の手法で記述することが可能で, 一般の場合と詳細釣り合いを満たす場合で論じた. 特に詳細釣り合い条件を満たす場合, (離散) 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, 動的イジング模型での解析例を示した. 拡散方程式が広いクラスのマスター方程式から導出されたことは意義深いであろう. なぜなら拡散方程式はいろいろな数理で現れ, さまざまな数理的知見が既に知られているからである. 離散拡散方程式の数理をマスター方程式の数理へと組みこむことは, マスター方程式の適用される非平衡統計力学やその他の分野の数理の発展に繋がると期待できる. また, 本稿で示した離散幾何学の手法を時間離散や無限状態を有するマスター方程式系の定式化に使ったり, 古典系のみならず量子系や無限系に拡張するのは重要になるであろう. これらは離散幾何学の知見をそれらの系の定式化に取り込むことにつながり, 発展した離散幾何学の数理的手法によって他種多様な現象を記述するマスター方程式の解析を可能にすると期待できるからである.

謝辞

著者の一人後藤は, この研究を遂行するために部分的に JSPS 科研費 JP19K03635 の助成を受けました. また, この研究に関わる結果に関して様々なコメントをして頂いた間野修平教授に感謝いたします. また日野は, 部分的に JSPS 科研費 JP17H01793 の助成を受けました.

参考文献

[1] N.G. Van Kampen, *Stochastic Processes in Physics and Chemistry*, 3rd edition, North Holland, (2007).

[2] 宮下 精二, 「統計力学」, 東京図書, (2020).

[3] 増山 幸一, 「経済現象の確率力学系によるモデル化」, 産業経済研究所年報, (2007).

[4] 成田 清正, 「確率モデル」, 共立出版, (2010).

[5] 小沢 哲也, 「平面図形の位相幾何」, 培風館, (1997).

[6] 砂田 利一, 「数学から見た古典力学」, 岩波書店, (2004).

[7] T. Sunada, *Topological Crystallography*, Springer, (2013).

[8] 中原 幹夫, 「理論物理学のための幾何学とトポロジー I」, ピアソン · エデュケーション, (2000).

[9] 北原 晴夫, 河上 肇, 「調和積分論」, 近代科学社, (1991).

[10] 浦川 肇, 「ラプラス作用素とネットワーク」, 裳華房, (1996).

[11] J. Schnakenberg, Rev. Mod. Phys., **48**, 571–585, (1976).

[12] S. Goto and H. Hino, J. Math. Phys., **61**, 113301 [27 pages], (2020).

[13] 鈴木 増雄, 「統計力学」, 岩波書店, (1994).

[14] 足助 太郎, 「線型代数学」, 東京大学出版会, (2012).

[15] S. Goto, J. Math. Phys., **56**, 073301 [30 pages], (2015).