計数統計における非周期的幾何学的位相について

京都大学 大学院情報学研究科　大久保 潤[1]
東京大学 物性研究所　Thomas Eggel [2]

マスター方程式で記述される確率過程系では，遷移行列の設定によって容易に非平衡定常状態を実現することが可能である．そのため，このような確率過程系の数理的な構造を調べることが非平衡系に関して重要な知見を与えてくれると期待できる．

ここでは，確率過程系が外部から摂動を受けた場合の数理構造について研究を行う．例えば時間に依存する遷移行列 $\{K_{nm}(t)\}$ を持つ確率過程系のマスター方程式は，次のように記述される．

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}p_n(t) = \sum_m K_{nm}(t)p_m(t). \tag{1}$$

ここで，$p_n(t)$ は時刻 t において系が状態 n にいる確率であり，行列の要素 $K_{nm}(t)$ は時刻 t において単位時間あたりに遷移 $m \to n$ が生じる平均数を表す．

非平衡現象としては「どのような状態にいるか」よりも「どのような流れが存在するか」に興味が持たれる場合が多い．流れに関して調べるためには，時間 T の間に，ある注目している状態 i' から別の状態 j' に遷移した回数に関する統計量を計算できればよい．遷移 $i' \to j'$ と $j' \to i'$ の回数の差を計算すれば，状態 i' と j' の間の流れについて調べることができるからである．マスター方程式で記述される確率過程系において，そのような統計量を計算する枠組みが計数統計と呼ばれるものであり，様々な文脈において研究が行われている（例えば [1] を参照）．遷移の回数の統計量を求めるために，次のような母関数を考える．

$$F(\chi, T) \equiv \sum_{k=0}^{\infty} \mathrm{e}^{k\chi} P(k|T) \tag{2}$$

ここで，$P(k|t)$ は注目している遷移 $i' \to j'$ が時刻 T の間に k 回生じる回数である．さらに，キュムラント母関数は $\mu(\chi, T) \equiv \ln F(\chi, T)$ で定義される．このキュムラント母関数を χ で微分することなどにより，遷移 $i' \to j'$ に関する統計量や分布を計算できる．また，母関数 $F(\chi, T)$ を計算するために，遷移行列 $\{K_{nm}(t)\}$ を若干修正した行列を用いた時間発展方程式を考えればよいことが示されている [1]．

これまでの研究により，外部から周期的な摂動を受ける場合には，キュムラント母関数を次のように分解できることが知られている [2–5]．

$$\mu(\chi, t) = (\text{動的位相}) + (\text{幾何学的位相}) \tag{3}$$

---

[1]E-mail: ohkubo@i.kyoto-u.ac.jp
[2]E-mail: et@issp.u-tokyo.ac.jp

これは，量子系における幾何学的位相の枠組みと類似した数理的構造を持っており，数学的にはファイバー束の枠組みを利用できることを意味している [6]．例えば非常にゆっくりとした摂動（断熱）の場合には，動的位相は各時刻における定常流からの寄与を表し，それ以外の寄与が幾何学的位相で記述されることが示されている [2]．上記のようなキュムラント母関数の分割は数学的な意味合いだけではなく物理的にも意味のある結果を与え，幾何学的位相からの寄与がポンプカレント現象や分子モータなどと関係している [3]．摂動の周期性により状態も周期的に変化するため，結果として，幾何学的位相はベクトルポテンシャルの閉路積分で与えられるという数理的な構造を持つ．この数理的な構造が「幾何学的」という用語と関係している．

本研究では，この枠組みを非周期的な摂動の場合に拡張できることを示す [7]．非周期的な場合には，一般には状態が元に戻ることはないため，周期的な場合に定義したような幾何学的位相の枠組みは単純には当てはまらない．ここでは量子系における非周期的幾何学的位相の議論を援用し [8]，非周期的な場合においても動的位相と幾何学的位相という分割が成立することを示す．具体的には，適切に導入された計量の測地線に基づく仮想的な経路を考えることにより，実際の時間発展と仮想的な経路を合わせて閉経路を形成することで，幾何学的位相を閉路積分で表すことが可能となる．

以上の拡張により，非周期的な場合においても，マスター方程式で記述される確率過程の計数統計において幾何学的位相という数理構造が現れることが示された．しかし，周期的な摂動の場合とは異なり，非周期的な場合におけるこのような分割の物理的意味はまだはっきりとしておらず，今後のさらなる研究が必要である．

参考文献

[1] I. Gopich and A. Szabo, J. Chem. Phys. **122** (2005), 014707.

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

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

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

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

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

[7] J. Ohkubo and T. Eggel, J. Phys. A: Math. Theor. **43** (2010), 425001.

[8] J. Samuel and R. Bhandari, Phys. Rev. Lett. **60** (1988), 2339.