マスター方程式と離散拡散方程式の関係
―離散幾何学による解析―

後藤　振一郎　統計的機械学習研究センター　特任准教授

【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．

【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. 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 1).

なお，本稿の内容の詳細は[3]を参照して頂きたい．

【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：

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

グラフ$G=(V,E)$の$\mathbb{R}$係数の**0-鎖**の群や**1-鎖**の群を

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

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

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

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$\mathrm{d}$の随伴で定義する．　すなわち，$\langle\mathrm{d}f,\omega\rangle_E=\left\langle f,\mathrm{d}^\dagger\omega\right\rangle_V$.　**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$\Delta_V:=-\mathrm{d}^\dagger\mathrm{d}$, $\Delta_E:=-\mathrm{d}\mathrm{d}^\dagger$と定義する．

【マスター方程式】
マスター方程式とは次の方程式である：

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

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．

【マスター方程式の離散幾何学的記述】
式(1)を離散幾何学の言葉で書こう．与えられたデータ $\{x\}$, $\{w_{x\to y}\}$ 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：• $p_t\in\Lambda^0(G)$ はxでの(1)の解 $p_t(x)$を与える．• $w\in C^1(G)$ が遷移確率$w(e)$を与える．

これらにより，(1)は以下のように$I_t\in\Lambda^1(G)$を使って書ける：

$$\dot{p}_t(x)=\sum_{e\in E_x}I_t(e),\quad I_t(e):=\left[-p_t(\mathrm{o}(e))\,w(e)+p_t(\mathrm{t}(e))\,w(\overline{e})\right]. \tag{2}$$

定理を述べるために準備する．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．　以下で任意の$x\in V$や $e\in E$に対して$m_V(x)=p^{\mathrm{eq}}(x)$, および$m_E(e)=w(e)\,p^{\mathrm{eq}}(\mathrm{o}(e))$, とおく．

以下が主定理である

定理 1. *(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．すると詳細釣り合い条件を満たし，$p^{\mathrm{eq}}(x)\neq 0$である時，*(2)* から以下の離散拡散方程式が得られる：

$$\dot{\psi}_t=\Delta_V\,\psi_t. \tag{3}$$

式(3)の解は自己共役演算子であるラプラシアンΔ_Vの固有値をを用いて書くことができ，その固有値は実である．

【謝辞】
本研究は統計数理研究所，日野英逸教授との共同研究に基づくものであり，科研費JP19K03635及びJP17H01793 の助成を部分的に受けました．間野修平教授から本研究に対する有益なコメントに感謝いたします．

References

[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.