

# 確率過程における weak value とその応用

富田 博之

近畿大学総合理工学研究科オープンリサーチセンター

## 概要

確率過程におけるマスター方程式は、従属変数の変換により実時間のシュレディンガー方程式に変換される。これを用いると、2時点条件付確率が量子力学に類似の干渉効果をもつことが示される。以上はすでによく知られた話であるが、さらに2時点条件付確率を密度行列に拡張すれば非対角的な物理量を扱うことができ、量子力学で知られた weak value [1] と同様の特異な振る舞い——見かけ上の「負の確率」や期待値の異常増大など——を導くことができる。Weak value を理解する一助となろう。

## 1 マスター方程式の量子力学形式化

確率変数（の組）を  $x$  として、通常の条件付確率  $P(x, t | x_i, t_i)$ ,  $t \geq t_i$  は以下の形のマスター方程式（前進方程式）に従う：

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} P(x, t | x_i, t_i) &= - \sum_{x'} W(x \rightarrow x') P(x, t | x_i, t_i) + \sum_{x'} W(x' \rightarrow x) P(x', t | x_i, t_i) \\ &= - \sum_{x'} L(x, x') P(x', t | x_i, t_i). \end{aligned} \quad (1)$$

ここで、 $L$  は遷移確率  $W$  と

$$L(x, x') = \left[ \sum_{x''} W(x \rightarrow x'') \right] \delta_{x, x'} - W(x' \rightarrow x),$$

で関係づけられた行列であって、確率の保存則から

$$\sum_x L(x, x') = 0, \quad \forall x',$$

が成り立つため、 $L$  は固有値  $\lambda_0 = 0$  の固有状態をもつ。これは定常状態、

$$P_0(x) = \lim_{t-t_i \rightarrow \infty} P(x, t | x_i, t_i),$$

に対応する。ここで  $\phi_0(x) = \sqrt{P_0(x)}$  を用いて従属変数を

$$\psi(x, t | x_i, t_i) = \phi_0(x)^{-1} P(x, t | x_i, t_i), \quad (t \geq t_i) \quad (2)$$

と変換すれば,  $\psi$  は以下の「前進波動方程式」に従う:

$$\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{x}, t) = -\sum_{\mathbf{x}'} H(\mathbf{x}, \mathbf{x}')\psi(\mathbf{x}', t). \quad (3)$$

ただし  $H$  は以下で与えられる:

$$H(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \phi_0(\mathbf{x})^{-1}L(\mathbf{x}, \mathbf{x}')\phi_0(\mathbf{x}'). \quad (4)$$

簡単のため当分の間,  $\psi$  中の初期条件  $(x_i, t_i)$  は省略している。 $\phi_0(\mathbf{x})$  は (3) の固有値  $\lambda_0 = 0$  の固有状態である。この変換のメリットは, もし  $H$  が対称 (エルミート)

$$H(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = H(\mathbf{x}', \mathbf{x})$$

であれば, マスター方程式の固有値問題が扱いやすくなることである。この対称性は「詳細釣り合い条件」

$$P_0(\mathbf{x})W(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}') = P_0(\mathbf{x}')W(\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x}),$$

または同じことであるが

$$L(\mathbf{x}, \mathbf{x}')P_0(\mathbf{x}') = L(\mathbf{x}', \mathbf{x})P_0(\mathbf{x}), \quad (5)$$

が成り立てば成り立ち, 広く期待できる条件である。この場合  $H$  の固有値は実で, 定常状態の安定性から非負であり,  $\phi_0$  は基底状態である。

最も簡単な例は, 連続変数の 1 次元 Fokker-Planck 方程式,

$$\frac{\partial}{\partial t}P(x, t) = -\mathcal{L}[x]P(x, t), \quad \mathcal{L}[x] = -\frac{\partial}{\partial x} \left( F'(x) + \frac{\epsilon}{2} \frac{\partial}{\partial x} \right), \quad (6)$$

である。これは 1 次元ポテンシャル  $F(x)$  の中でのブラウン運動を記述する。この場合の上記の変換は

$$\begin{aligned} P_0(x) &\propto \exp \left[ -\frac{2}{\epsilon} F(x) \right], \quad \text{または} \quad \phi_0(x) \propto \exp \left[ -\frac{1}{\epsilon} F(x) \right], \\ \mathcal{H}[x] &= \frac{1}{\epsilon} \left[ -\frac{\epsilon^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right], \\ V(x) &= \frac{1}{2} \left[ F'(x)^2 - \epsilon F''(x) \right], \end{aligned} \quad (7)$$

であり, 最終的には実時間の Schrödinger 方程式

$$-\epsilon \frac{\partial}{\partial t}\psi(x, t) = \left[ -\frac{\epsilon^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \psi(x, t),$$

が得られる。図 1 は, 準安定状態の確率論的崩壊定数が対応する Schrödinger 方程式の固有値 (第一励起状態  $\lambda_1$ : ほとんど  $\lambda_0$  と縮退) で与えられることを示す例である。[2]

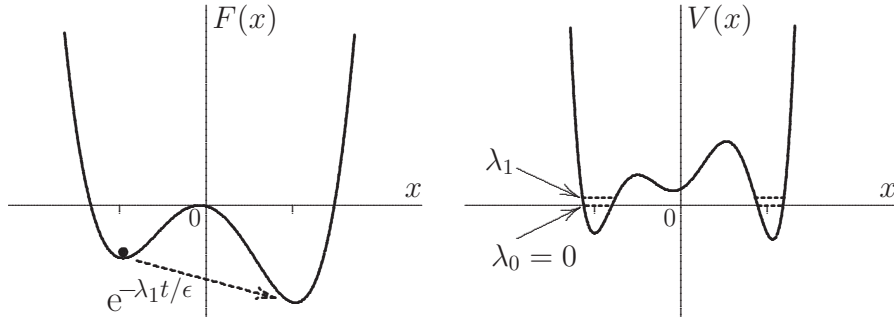


図 1: 準安定状態の確率論的崩壊過程の固有値問題

## 2 2時点条件付確率 (TPCP)

ここまでなら対称化することによりマスター方程式の固有値問題を慣れた量子力学の固有値問題で考えようというだけにすぎない。波動関数の干渉など量子力学独特の振舞いは2時点条件付確率 (Two Point Conditional Probability – TPCP)

$$P(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_i, t_i; \mathbf{x}_f, t_f), \quad t_i \leq t \leq t_f, \quad ( ; \text{は 'and' を表す}) \quad (8)$$

に初めて現れる。ここで、よく知られたベイズの関係式を導くのに用いられる恒等式、

$$P(A \cap B) = P(A|B)P(B) = P(B|A)P(A)$$

とマルコフ性を繰り返し用いれば、TPCPは先の「波動関数」 $\psi$ と以下で関係づけられる：

$$P(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_i, t_i; \mathbf{x}_f, t_f) = \frac{1}{\langle \psi_f | \psi_i \rangle} \bar{\psi}(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_f, t_f) \psi(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_i, t_i). \quad (9)$$

ここで  $\bar{\psi}$  は先見的 (posterior) 条件付確率  $\bar{P}(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_f, t_f)$ ,  $t \leq t_f$  を用いて

$$\bar{\psi}(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_f, t_f) = \phi_0(\mathbf{x})^{-1} \bar{P}(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_f, t_f), \quad (10)$$

で定義される (後退) 波動関数であり、以下の「後退波動方程式」に従う：

$$\frac{\partial}{\partial t} \bar{\psi}(\mathbf{x}, t) = \sum_{\mathbf{x}'} H^\dagger(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \bar{\psi}(\mathbf{x}', t). \quad (11)$$

$H^\dagger$  は  $H$  のエルミート共役 (ここでは単に転置) で、 $H$  がエルミート (対称) な今の場合、前進・後退波動方程式で固有値と固有関数は共通である。(9) 式の分母は

$$\langle \psi_f | \psi_i \rangle = \sum_{\mathbf{x}'} \bar{\psi}(\mathbf{x}', t | \mathbf{x}_f, t_f) \psi(\mathbf{x}', t | \mathbf{x}_i, t_i), \quad (12)$$

であり、前進・後退波動関数の重なりを表す量である。

ここで量子力学的手法を扱いやすくするため、ブラ・ケットベクトル

$$|\psi_i(t)\rangle = \{\psi(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_i, t_i)\}^\dagger, \quad \langle \psi_f(t) | = \{\bar{\psi}(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_f, t_f)\},$$

を導入すれば, (3), (11) は

$$\frac{\partial}{\partial t}|\psi_i(t)\rangle = -H|\psi_i(t)\rangle, \quad \frac{\partial}{\partial t}\langle\psi_f(t)| = \langle\psi_f(t)|H, \quad (13)$$

と書き表すことができる。そこで以後では  $H$  をハミルトニアンと呼ぶことにする。これを用いれば, 重なり積分 (内積) (12) は

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle\psi_f|\psi_i\rangle = \langle\psi_f(t)|H|\psi_i(t)\rangle - \langle\psi_f(t)|H|\psi_i(t)\rangle = 0$$

を満たし, 途中の時間  $t$  に依存しないことがわかる。さらに以下の極限的性質をもつ:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{(i)} \quad \lim_{t_f-t_i \rightarrow \infty} \langle\psi_f|\psi_i\rangle = 1, \\ \text{(ii)} \quad \lim_{t_f-t_i \rightarrow 0} \langle\psi_f|\psi_i\rangle = \phi_0(\mathbf{x}_i)^{-1}\phi_0(\mathbf{x}_f)^{-1}\delta_{\mathbf{x}_i,\mathbf{x}_f}. \end{array} \right. \quad (14)$$

また, TPCP による物理量の期待値 (Two Point Conditional Expectation – TPCE) はブラ・ケットを用いて

$$\langle A \rangle_{(i;f)} = \sum_{\mathbf{x}'} A(\mathbf{x}')P(\mathbf{x}', t|\mathbf{x}_i, t_i; \mathbf{x}_f, t_f) = \frac{\langle\psi_f(t)|A|\psi_i(t)\rangle}{\langle\psi_f|\psi_i\rangle}, \quad (15)$$

と表され, まさに量子力学の weak value の形になっていることがわかる。

このように, 前進・後退波動関数はそれぞれ閉じた線形発展方程式に従うため重ね合わせの原理が成り立つが, その積で与えられる TPCP は閉じた一つの線形発展方程式では記述できない。その結果, 重ね合わせの原理は一般に成り立たず, 波動関数の干渉に類似した振舞いが現れることが予想される。

## 2.1 例 1 : 1次元自由ブラウン運動

図 2 の左は初期条件  $\{x_i = \pm a \text{ at } t_i = 0\}$  のときの通常の条件付確率

$$P(x, t|x = \pm a \text{ at } t_i = 0),$$

である。太い実線は各ゲート  $x = \pm a$  から出発した場合の確率であり, 細い点線は全確率である。この場合は確率の重ねあわせ (足し算) が成り立っている。

右はこれに終端条件  $\{x_f = \pm a \text{ at } t = t_f\}$  を加えた TPCP,

$$P(x, t|x = \pm a \text{ at } t_i = 0 \text{ and } t_f),$$

で, 確率の重ねあわせ (足し算) は成り立っておらず, 太い破線で示された波動関数の「干渉部分」が現れている。

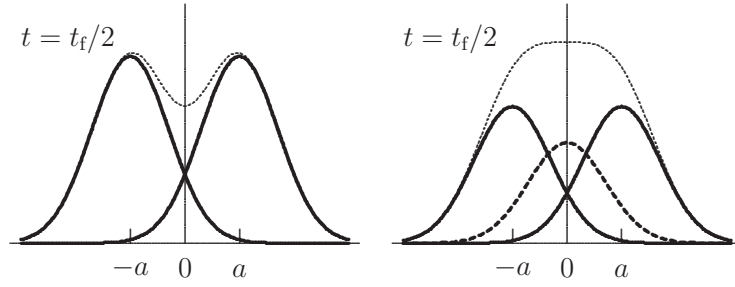


図 2: 1次元自由ブラウン運動における干渉効果 (右が TPCP)

## 2.2 例 2 : 確率論的 Ising モデル ( 2 スピン系 )

交換相互作用をもつ 2 つの確率論的古典的 Ising スピン対 ( $\sigma = \pm 1$ )

$$\mathbf{x} = (\sigma_1, \sigma_2), \quad E(\mathbf{x}) = -J\sigma_1\sigma_2.$$

を考える。確率変数  $\mathbf{x}$  を  $(1, 1), (1, -1), (-1, 1), (-1, -1)$  の順序で並べることにし, マスター方程式 (1) の遷移確率を

$$W = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 \\ p^2 & 0 & 0 & p^2 \\ p^2 & 0 & 0 & p^2 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \text{または} \quad L = \begin{pmatrix} 2p^2 & -1 & -1 & 0 \\ -p^2 & 2 & 0 & -p^2 \\ -p^2 & 0 & 2 & -p^2 \\ 0 & -1 & -1 & 2p^2 \end{pmatrix}, \quad (p = e^{-\beta J}) \quad (16)$$

で与える。これは定常状態 (温度  $\beta = 1/k_B T$  の熱平衡状態) において詳細釣り合いの条件,

$$e^{-\beta E(\mathbf{x})} W(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}') = e^{-\beta E(\mathbf{x}')} W(\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x}),$$

を満たしている。平衡分布

$$P_0(\mathbf{x}) = \frac{1}{2(1+p^2)} (1, p^2, p^2, 1), \quad \phi_0(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{2(1+p^2)}} (1, p, p, 1),$$

を用いれば, ハミルトニアンは以下のように交換相互作用と横磁場をもつ「量子スピン系」の形になる:

$$\begin{aligned} H &= \begin{pmatrix} 2p^2 & -p & -p & 0 \\ -p & 2 & 0 & -p \\ -p & 0 & 2 & -p \\ 0 & -p & -p & 2p^2 \end{pmatrix} \\ &= (1+p^2) \sigma_0 \otimes \sigma_0 - (1-p^2) \sigma_z \otimes \sigma_z - p (\sigma_0 \otimes \sigma_x + \sigma_x \otimes \sigma_0), \end{aligned} \quad (17)$$

ここで  $\sigma_x$  と  $\sigma_z$  は通常のパウリ演算子, また  $\sigma_0 = I_2$  である。固有値と固有ベクトルは簡単に求められ,

$$\left\{ \begin{array}{l} \lambda_0 = 0, \lambda_1 = 2p^2, \lambda_2 = 2, \lambda_3 = 2(1+p^2) \\ |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2(1+p^2)}} [ |\uparrow\uparrow\rangle + p|\uparrow\downarrow\rangle + p|\downarrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\rangle ] \\ |1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [ |\uparrow\uparrow\rangle - |\downarrow\downarrow\rangle ] \\ |2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [ |\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle ] \\ |3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2(1+p^2)}} [ p|\uparrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle + p|\downarrow\downarrow\rangle ] \end{array} \right. \quad (18)$$

である。 $|0\rangle (= |\phi_0\rangle)$  が基底状態である。ここではラベルとして  $\sigma = \pm 1$  の代わりによく使われる  $\uparrow, \downarrow$  を用いた。この固有ベクトル系を用いて量子力学と全く同じ手順で, 任意の初期・終端条件に対する状態ベクトル,  $|\psi_i(t)\rangle, \langle\psi_f(t)|$  を計算することができる。時間  $t$  が実であることだけが異なる。

Weak value の場合と同じく, 初期条件と終端条件が異なる場合に興味ある振舞いが見られる。例えば,  $\{\mathbf{x}_i = (\uparrow\uparrow) \text{ at } t = 0 \text{ and } \mathbf{x}_f = (\downarrow\downarrow) \text{ at } t = t_f\}$ , すなわち

$$P(\mathbf{x}, 0) = (1, 0, 0, 0), \quad \bar{P}(\mathbf{x}, t_f) = (0, 0, 0, 1),$$

したがって

$$|\psi_i(0)\rangle = \sqrt{2(1+p^2)} |\uparrow\uparrow\rangle, \quad \langle\psi_f(t_f)| = \sqrt{2(1+p^2)} \langle\downarrow\downarrow|$$

であるとしよう。通常通り固有ベクトル展開により

$$|\psi_i(t)\rangle = |0\rangle + \sqrt{1+p^2} e^{-\lambda_1 t} |1\rangle + p e^{-\lambda_3 t} |3\rangle, \quad (19)$$

$$\langle\psi_f(t)| = \langle 0| - \sqrt{1+p^2} e^{-\lambda_1(t_f-t)} \langle 1| + p e^{-\lambda_3(t_f-t)} \langle 3|,$$

$$\langle\psi_f|\psi_i\rangle = 1 - (1+p^2) e^{-\lambda_1 t_f} + p^2 e^{-\lambda_3 t_f} (> 0), \quad (20)$$

が得られる。図3に TPCP が示されているが, 容易に納得できる結果であり何ら不審な様子は見られず, 確率は常に非負である。

これに対して, 基底ベクトルをスピン状態  $\{|\mathbf{x}\rangle = |\sigma_1\sigma_2\rangle\}$  ではなくハミルトニアン  $H$  の固有状態  $\{|k\rangle, k = 0, 1, 2, 3\}$  にとったとき, 奇妙な振る舞いが現れる。この場合にはさらに簡単に各状態の「実現確率」を計算することができ, 以下となる:

$$\left. \begin{array}{l} P(0, t) \\ P(1, t) \\ P(2, t) \\ P(3, t) \end{array} \right\} = \frac{1}{\langle\psi_f|\psi_i\rangle} \times \left\{ \begin{array}{l} \langle\psi_f(t)|0\rangle \langle 0|\psi_i(t)\rangle \\ \langle\psi_f(t)|1\rangle \langle 1|\psi_i(t)\rangle \\ \langle\psi_f(t)|2\rangle \langle 2|\psi_i(t)\rangle \\ \langle\psi_f(t)|3\rangle \langle 3|\psi_i(t)\rangle \end{array} \right. = \frac{1}{\langle\psi_f|\psi_i\rangle} \times \left\{ \begin{array}{l} 1 \\ -(1+p^2) e^{-\lambda_1 t_f} (< 0) \\ 0 \\ p^2 e^{-\lambda_3 t_f} \end{array} \right. \quad (21)$$

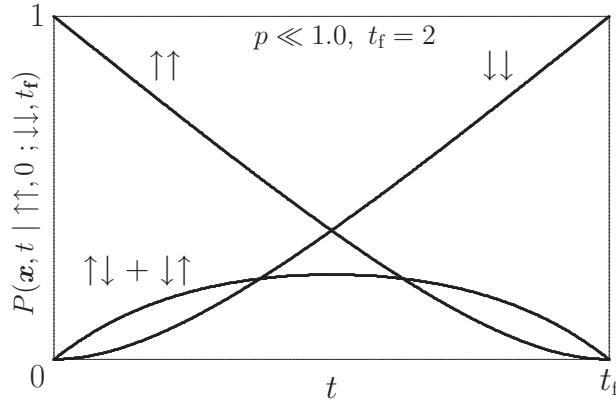


図 3: 確率論的古典 Ising スピン対の TPCP

これは各状態への射影演算子  $|k\rangle\langle k|$  (固有値は 0 と 1) の期待値であるにもかかわらず, 「負の確率」が現れている。もちろん

$$\sum_{k=0}^3 P(k, t) = 1,$$

が成り立っていることは明らかである。

この結果として, ある種のオブザーバブルの期待値 (TPCE) に異常増大が現れることがある。例えば

$$M_x = \frac{1}{2}(\sigma_x \otimes \sigma_0 + \sigma_0 \otimes \sigma_x), \quad (22)$$

は固有値が  $(-1, 0, 0, 1)$  であるにもかかわらず,  $p$  および  $t_f$  が十分小さいとき,

$$\langle M_x \rangle_{(i:f)} = \frac{1}{\langle \psi_f | \psi_i \rangle} \left[ \frac{2p}{1+p^2} (1 - p^2 e^{-\lambda_3 t_f}) - \frac{1-p^2}{1+p^2} (e^{-\lambda_3 t} + e^{-\lambda_3 (t_f-t)}) \right] > 1,$$

となる範囲が存在し,  $p^2 t_f \ll 1$  のとき

$$\langle M_x \rangle_{(i:f)} \gg 1$$

と異常増大を示す。この異常性は分母の重なり積分から来ており,  $x_i \neq x_f$  の場合, (14) の (ii) の性質から一般的に予想されることである。

これに対して, 初期状態と終端状態が同じ場合 (例えば  $x_i = x_f = (\uparrow\uparrow)$ ), 量子力学における普通の期待値と同じで何ら異常性は現れない。

図 4 の左にこの両方の場合の期待値の振る舞いが示されている。図の右は, 別の物理量

$$A = \sigma_x \otimes \sigma_x \text{ (固有値は } \pm 1 \text{)}$$

の期待値である。こちらは保存量であるから時間にはよらない。 $p^2 t_f$  が小さくなるにつれて TPCE が異常増大していることが見てとれよう。

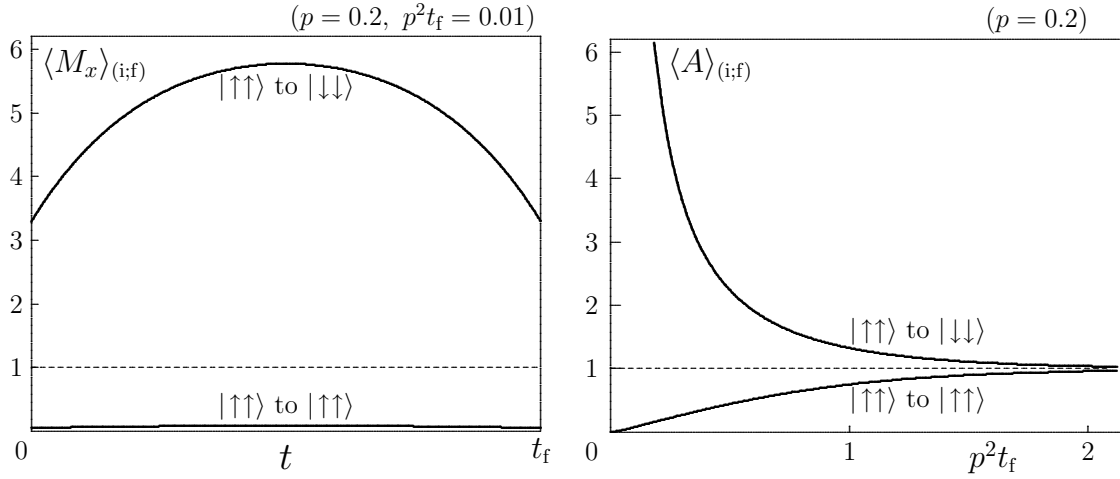


図 4:  $M_x = (\sigma_x \otimes \sigma_0 + \sigma_0 \otimes \sigma_x)/2$ , および  $A = \sigma_x \otimes \sigma_x$  の期待値

### 3 密度行列への拡張

上で見た 2 つの量  $M_x$ ,  $A$  はともにスピン状態表示では非対角的な量であって, 対応する古典的物理量はない。したがって通常の TPCP だけでは期待値は計算できない。実はすでにこれを拡張した「密度行列」

$$\begin{aligned} \rho_{(i:f)}(t) &= \frac{1}{\langle \psi_f | \psi_i \rangle} |\psi_i(t)\rangle \langle \psi_f(t)| \\ &= \frac{1}{\langle \psi_f | \psi_i \rangle} \sum_{\mathbf{x}, \mathbf{x}'} \bar{\psi}(\mathbf{x}', t | \mathbf{x}_f, t_f) \psi(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_i, 0) |\mathbf{x}\rangle \langle \mathbf{x}'| \end{aligned} \quad (23)$$

を導入しているのである。重なり積分  $\langle \psi_f | \psi_i \rangle$  の定義, (12) により

$$\text{Tr } \rho_{(i:f)}(t) = \frac{1}{\langle \psi_f | \psi_i \rangle} \sum_{\mathbf{x}} \bar{\psi}(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_f, t_f) \psi(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_i, 0) = 1$$

が成り立っていることは明らかであり, 「物理量」  $A$  の期待値 (TPCE) は

$$\langle A \rangle_{(i:f)} = \text{Tr } \rho_{(i:f)}(t) A$$

で求められる。もちろん  $A$  が対角的な場合は古典的 TPCE に一致する。

この「密度行列」は普通, 古典的確率過程では扱われてこなかった概念であるが, これ自体は古典的確率過程の範囲内 (例えばモンテカルロシミュレーション) で計算できる量である。実際, 波動関数  $\psi$ ,  $\bar{\psi}$  の定義と定常性および時間反転対称性

$$\bar{\psi}(\mathbf{x}', t | \mathbf{x}_f, t_f) = \psi(\mathbf{x}', t_f | \mathbf{x}_f, t) \left( = \phi_0(\mathbf{x}')^{-1} P(\mathbf{x}', t_f - t | \mathbf{x}_f, 0) \right), \quad (t \leq t_f) \quad (24)$$

すなわち,

$$\bar{P}(\mathbf{x}', t | \mathbf{x}_f, t_f) P_0(\mathbf{x}_f) = P(\mathbf{x}_f, t_f | \mathbf{x}', t) P_0(\mathbf{x}') = P(\mathbf{x}', t_f | \mathbf{x}_f, t) P_0(\mathbf{x}_f), \quad (25)$$



を用いれば，密度行列は

$$\rho_{(i;f)}(t) = \frac{1}{\langle \psi_f | \psi_i \rangle} \sum_{\mathbf{x}, \mathbf{x}'} (\phi_0(\mathbf{x}') \phi_0(\mathbf{x}))^{-1} P(\mathbf{x}', t_f - t | \mathbf{x}_f, 0) P(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_i, 0) |\mathbf{x}\rangle \langle \mathbf{x}'|, \quad (26)$$

で与えられる。この式を用いれば，例えばモンテカルロシミュレーションを実行する場合に，「終端条件を満たさない試行を捨てる」ということはやらなくてもよい。初期条件だけ与えてどんどん走らせ，すべてのデータを蓄積すればよい。

## 4 まとめ

時間発展が実であり，波動関数が常に実で非負であることを除けば，古典的確率過程を量子力学と同等の形式で記述することができ，特に2時点条件付確率には量子力学独特の振る舞いに類似の振る舞いが現れる。今回は，例として量子力学で知られた weak value と類似の異常性が現れる系を示した。この場合の weak value は，例2のように固有値問題が正確に解けて固有ベクトル展開で計算できない場合でも，例えばモンテカルロシミュレーションによって計算可能である。

量子力学における weak value は，「弱い測定」( weak measurement ) という量子力学の観測理論における重要な基本的概念と密接な関係をもっているが，これの古典的対応物は目下のところ見出せていない。

## 参考文献

- [1] Y. Aharonov, D. Z. Albert and L. Vaidman, Phys. Rev. Letters, **60**, 1351, (1988).
- [2] H. Tomita, A. Ito and H. Kidachi, Prog. Theor. Phys. **56**, 786, (1976).