

閉じた境界条件における 吸脱着つき ASEP の定常状態

佐藤純 (Jun Sato)

東京大学 先端科学技術研究センター

概要

閉じた境界条件における ASEP は、古くから知られているように $U_q(\mathfrak{sl}_2)$ の対称性を持ち、それを用いて厳密に定常状態が構成される。今回我々は、これに吸脱着の効果を取り入れたモデルの定常状態を考察する。吸着と脱着の比を有限に保ったまま吸脱着を無限小にする極限を考えると、定常状態が閉じた形に書けることを提案する。これを用いて粒子分布を計算し、超幾何関数およびその q 変形が現れることを見出した。

1 はじめに

非対称単純排他過程 (Asymmetric Simple Exclusion Process = ASEP) とは、一次元の格子を排除体積効果を持った粒子が左右非対称なレートで拡散していくという確率過程モデルである。時間発展は連続時間とし、微小時間 dt の間に確率 dt で右に、確率 qdt ($0 \leq q \leq 1$) で左にホップするとする。ただし、排除体積効果があって、右(左)に既に粒子がいる場合には右(左)へのホッピングは起こらない。図 1(a) に示してあるのは、開いた境界条件の ASEP の模式図である。左端での流入レートを α 、右端での流出レートを β とし、 $q \leq 1$ より全体として左から右への流れを想定している。このモデルは行列積表示 [1]、直交多項式 [2]、ベータ仮説 [3] 等を用いた厳密な解析が可能であり、かつ境界における粒子の流出入レートによる渋滞相と自由相の相分離 (図 1(c)) や衝撃波のダイナミクスなど、興味深い非平衡物理現象を記述する。

一方、図 1(b) に示した閉じた境界条件の場合には、系は $U_q(\mathfrak{sl}_2)$ の対称性を獲得し、それを用いて定常状態の構成、粒子密度分布、相関関数が厳密に議論できる [4]。本稿では、この事実についての簡単な解説を行う。今回我々は、これに吸脱着の効果 [5] を取り入れたモデルを取り扱う (図 2)。系は $U_q(\mathfrak{sl}_2)$ の対称性を失い、粒子の出入りによって粒子数も保存しなくなる。これにより厳密な解析は困難になるが、吸着と脱着の比を有限に保ったまま吸脱着を無限小にする極限で、定常状態は $U_q(\mathfrak{sl}_2)$ によって構成されたベクトルの重ね合わせで構成できるという仮説を提案する。この重ね合わせ状態は、大分配関数の fugacity 展開で理解することが可能である。この定常状態の表式を用いて、粒子分布関数を厳密に計算することに成功した。これについて、本稿の最後で議論する。

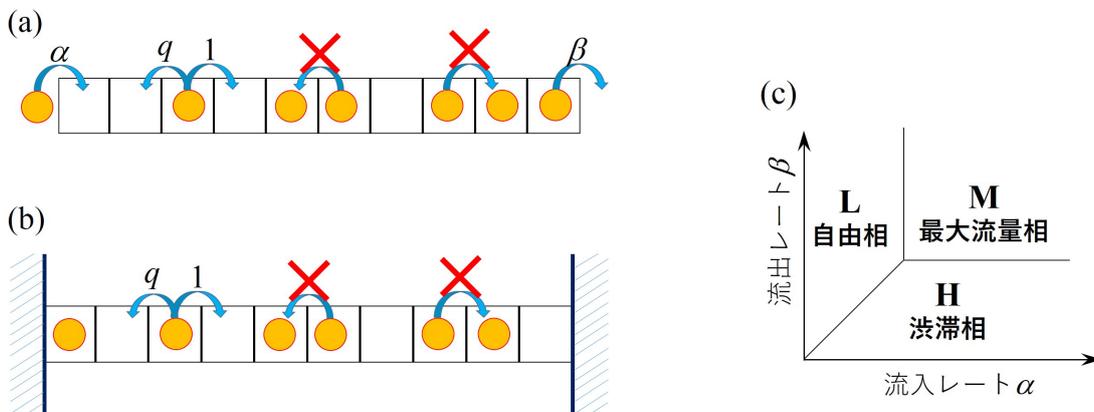


図 1: (a) 開いた境界条件の ASEP の模式図 (b) 閉じた境界条件の ASEP の模式図
(c) 開いた境界条件の ASEP の相図の概略図

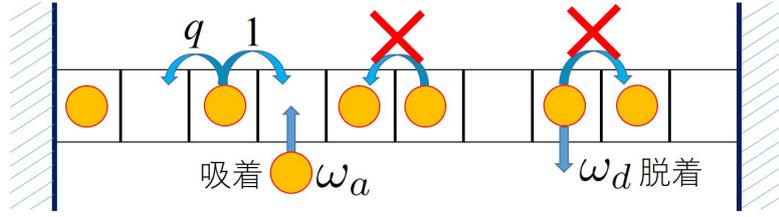


図 2: 今回考える閉じた境界条件の吸脱着つき ASEP の模式図

2 状態ベクトルと確率遷移行列

まず準備として、系の各時刻における確率的状態を状態ベクトルで表す記法と、確率遷移行列による時間発展の記述について簡単に説明する。

2.1 状態ベクトル

簡単のために格子数を $L = 3$ とする。すると、 i 番目の格子は粒子がいる状態 ($\tau_i = 1$) といない状態 ($\tau_i = 0$) の 2 通りをとるので、系全体としては以下の $2^3 = 8$ 通りの状態をとる： $(\tau_1, \tau_2, \tau_3) = (000), (001), (010), (011), (100), (101), (110), (111)$ 。今、確率的時間発展を考えているので、系はこれら 8 状態のうちのどれかに確定しているわけではなく、ある確率で“混じり合っている”。

ある時刻 t において、系が状態 (τ_1, τ_2, τ_3) をとる確率を、 $P(t|\tau_1, \tau_2, \tau_3)$ と書こう。これが確率を表すためには、条件

$$0 \leq P(t|\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_L) \leq 1 \quad \text{かつ} \quad \sum_{\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_L=0,1} P(t|\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_L) = 1 \quad (2.1)$$

を満たす必要がある。これらの条件を満たす 8 つの実数の組 $\{P(t|\tau_1, \tau_2, \tau_3) | \tau_1, \tau_2, \tau_3 = 0, 1\}$ を定めると、時刻 t における系の“確率的”状態がひとつ定まることになる。これら 8 つの実数をまとめてひとつのベクトル

$$|P(t)\rangle = \begin{pmatrix} P(t|000) \\ P(t|001) \\ \vdots \\ P(t|111) \end{pmatrix} \quad (2.2)$$

で表し、これを状態ベクトルと呼ぶ。

これをベクトル空間とそのテンソル積の言葉で述べよう。 V を $|0\rangle, |1\rangle$ を基底とする \mathbb{C} 上の 2 次元ベクトル空間とする。それぞれ粒子がいない状態、いる状態に対応している。系全体の状態は $\underbrace{V \otimes V \otimes \dots \otimes V}_L = V^{\otimes L}$ の元となり、その基底を $|\tau_1 \tau_2 \dots \tau_L\rangle := |\tau_1\rangle \otimes |\tau_2\rangle \otimes \dots \otimes |\tau_L\rangle$ と書く。すると、上で述べた系の状態ベクトルは

$$|P(t)\rangle = \sum_{\tau_1 \tau_2 \dots \tau_L} P(t|\tau_1 \tau_2 \dots \tau_L) |\tau_1 \tau_2 \dots \tau_L\rangle \quad (2.3)$$

と書ける。ここで、確率的状態として物理的に意味があるのは条件 (2.1) を満たすベクトルだけであるが、便宜上、 \mathbb{C} 上の 2^L 次元ベクトル空間 $V_L := V^{\otimes L}$ 全体を状態ベクトル空間とする。また、確率の規格化は問題にせず、定数倍だけ違う 2 つのベクトルは同じ状態を表すとしよう。ただし、物理量の期待値を計算する際には、確率の規格化に注意を払う必要がある。

また、 V の双対 $V^* := \text{Hom}(V, \mathbb{C})$ の正規直交基底を $\langle 0|, \langle 1|$ とし ($\langle 0|0\rangle = 1, \langle 0|1\rangle = 0, \langle 1|0\rangle = 0, \langle 1|1\rangle = 1$)、 $(V_L)^*$ の基底を $\langle \tau_1 \tau_2 \dots \tau_L| := \langle \tau_1| \otimes \langle \tau_2| \otimes \dots \otimes \langle \tau_L|$ と書く。

2.2 マスター方程式

次に、系の時間発展について考えよう。ここでは、閉じた境界条件の吸脱着つき ASEP を考え、右へのホッピングレートを p 、左へのホッピングレートを q 、吸着レートを ω_a 、脱着レートを ω_d とする。(図 2 では、 $p = 1$ になるように時間スケールを規格化してある。)

例として、 $P(t+\Delta t|010)$ を考える。まず、時刻 t において状態 (100) にあった場合を考えると、時間 Δt の間に右にホップする確率は $p\Delta t$ なので、 $P(t+\Delta t|010) = P(t|100)p\Delta t + \dots$ となる。次に、時刻 t において状態 (010) にあった場合を考えると、時間 Δt の間に右にホップして別の状態になってしまう確率は $p\Delta t$ なので、元の状態を維持する確率は $1 - p\Delta t$ となる。したがって、 $P(t+\Delta t|010) = P(t|100)p\Delta t + P(t|010)1(1 - p\Delta t) + \dots$ を得る。同様に全ての過程を考慮すると、

$$P(t+\Delta t|010) = P(t|100)p\Delta t + P(t|001)q\Delta t + \{P(t|110) + P(t|011)\}\omega_d\Delta t + P(t|000)\omega_a\Delta t + P(t|010)\{1 - (p + q + 2\omega_a + \omega_d)\Delta t\} \quad (2.4)$$

となる。したがってこれの時間微分は

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}P(t|010) &= \{P(t+\Delta t|010) - P(t|010)\}/\Delta t \\ &= pP(t|100) + qP(t|001) + \omega_d\{P(t|110) + P(t|011)\} + \omega_aP(t|000) \\ &\quad - (p + q + 2\omega_a + \omega_d)P(t|010) \end{aligned} \quad (2.5)$$

とかける。これをマスター方程式という。これは量子力学の言葉では「第一量子化」の形式に相当する。

2.3 確率遷移行列

上で得られたマスター方程式は、前述のベクトル記法を用いて

$$\frac{d}{dt}|P(t)\rangle = \mathcal{M}|P(t)\rangle, \quad \mathcal{M} = \begin{pmatrix} \mathcal{D}_1 & \omega_d & \omega_d & 0 & \omega_d & 0 & 0 & 0 \\ \omega_a & \mathcal{D}_2 & p & \omega_d & 0 & \omega_d & 0 & 0 \\ \omega_a & q & \mathcal{D}_3 & \omega_d & p & 0 & \omega_d & 0 \\ 0 & \omega_a & \omega_a & \mathcal{D}_4 & 0 & p & 0 & \omega_d \\ \omega_a & 0 & q & 0 & \mathcal{D}_5 & \omega_d & \omega_d & 0 \\ 0 & \omega_a & 0 & q & \omega_a & \mathcal{D}_6 & p & \omega_d \\ 0 & 0 & \omega_a & p & \omega_a & q & \mathcal{D}_7 & \omega_d \\ 0 & 0 & 0 & \omega_a & 0 & \omega_a & \omega_a & \mathcal{D}_8 \end{pmatrix},$$

$$\{\mathcal{D}_1, \dots, \mathcal{D}_8\} = \{-3\omega_a, -2\omega_a - \omega_d - q, -2\omega_a - \omega_d - p - q, -\omega_a - 2\omega_d - q, -2\omega_a - \omega_d - p, -\omega_a - 2\omega_d - p - q, -\omega_a - 2\omega_d - p, -3\omega_d\} \quad (2.6)$$

とまとめて書くことができる。これは量子力学の言葉では「第二量子化」の形式に相当する。確率遷移行列の性質から、各列の要素を全て足すと 0 になることに注意。

さて、このように $2^L \times 2^L$ サイズの行列として表示しては、 L が大きくなればすぐに破綻し、 $L \rightarrow \infty$ の熱力学極限が議論できない。そこで、部分行列とテンソル記法で確率遷移行列を表そう。粒子のホッピングは隣接 2 サイト間のみの状態変化を引き起こすので、 4×4 の行列で表すことができる。第 n 格子と第 $(n+1)$ 格子の隣接 2 サイトに注目すると、この部分系は (00), (01), (10), (11) の 4 状態をとる。この部分系でのホッピングの過程を書き出すと、

$$\begin{cases} \text{右へのホッピング} & (1,0) \rightarrow (0,1) & p \\ \text{左へのホッピング} & (0,1) \rightarrow (1,0) & q \end{cases} \quad (2.7)$$

であるので、ここでの部分確率遷移行列は

$$\mathcal{M}_{n,n+1} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -q & p & 0 \\ 0 & q & -p & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}_{n,n+1} \quad (2.8)$$

と書ける．ここで，行列の右下の添え字 $n, n+1$ は，この部分行列が作用する格子の位置を表し，その他の格子には恒等演算子として作用することを表す．すなわち，この部分行列は全体の状態ベクトルの空間 V_L には

$$\mathcal{M}_{n,n+1} = \underbrace{\text{id} \otimes \text{id} \otimes \cdots \otimes \text{id}}_{n-1} \otimes \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -q & p & 0 \\ 0 & q & -p & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \otimes \underbrace{\text{id} \otimes \text{id} \otimes \cdots \otimes \text{id}}_{L-n-1} \quad (2.9)$$

として作用する．ここで， id は 2×2 の単位行列 $\text{id} := \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ を表す．

同様に，第 n 格子における吸脱着の効果は

$$h_n = \begin{pmatrix} -\omega_a & \omega_d \\ \omega_a & -\omega_d \end{pmatrix}_n = \underbrace{\text{id} \otimes \text{id} \otimes \cdots \otimes \text{id}}_{n-1} \otimes \begin{pmatrix} -\omega_a & \omega_d \\ \omega_a & -\omega_d \end{pmatrix} \otimes \underbrace{\text{id} \otimes \text{id} \otimes \cdots \otimes \text{id}}_{L-n} \quad (2.10)$$

と表される．これらを用いて，全体の確率遷移行列 \mathcal{M} は，

$$\mathcal{M} = \sum_{n=1}^{L-1} \mathcal{M}_{n,n+1} + \sum_{n=1}^L h_n \quad (2.11)$$

と部分行列の和で表すことができる．

3 定常状態と物理量のダイナミクス

3.1 定常状態と緩和時間

前節で議論した時間発展の行列表示により，この確率過程模型の時間発展を解く問題が，確率遷移行列の対角化の問題に帰着したことになる．ここでは証明は省略するが，確率遷移行列に対する Perron-Frobenius の定理により，

1. 実部が最大の固有値は 0 で，対応する固有ベクトルの成分は全て非負の実数にとることができる
2. その他の全ての固有値の実部は負になる

ことが保障されている．すなわち，物理的に意味のある unique な定常状態の存在が保証されていることになる．

確率遷移行列が対角化できれば，系のダイナミクスが完全に分かったことになる．以下，それを解説する．確率遷移行列の固有値を実部が大きい順に E_0, E_1, E_2, \dots とし，対応する固有ベクトルを $|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle, \dots$ とする．ここでは簡単のために縮退は考えない．前述のように，Perron-Frobenius の定理によって固有値は実数 $\{x_n, y_n\}$ を使って

$$E_0 = 0, \quad E_1 = -x_1 + iy_1, \quad E_2 = -x_2 + iy_2, \dots \quad (0 < x_1 < x_2 < \dots) \quad (3.1)$$

という形に書くことができる．

系をある初期状態 $|P(0)\rangle$ に用意し，そこからの時間発展を考える．この初期状態を確率遷移行列の固有ベクトルを用いて展開して

$$|P(0)\rangle = c_0|0\rangle + c_1|1\rangle + c_2|2\rangle + \dots \quad (3.2)$$

と書く．すると，マスター方程式 (2.6) より，

$$|P(t)\rangle = c_0|0\rangle + c_1 e^{-x_1 t} e^{iy_1 t} |1\rangle + c_2 e^{-x_2 t} e^{iy_2 t} |2\rangle + \dots \quad (3.3)$$

を直ちに得る．この式から明らかなように， $|0\rangle$ が定常状態 $|P(t \rightarrow \infty)\rangle$ に対応し， x_1^{-1} が緩和時間に対応していることが分かる．

マスター方程式 (2.6) は，ハミルトニアンを $\mathcal{H} = -\mathcal{M}$ とする量子系の (虚時間発展の) Schrödinger 方程式とみなすことができる．すると，この量子系の基底状態がもとの確率過程模型の定常状態に，第一励起エネルギー (の実部の逆数) が緩和時間に対応していることが分かる．このようにして，確率過程模型の定常状態と緩和時間を求めよ，という問題が， $2^L \times 2^L$ という巨大なサイズの行列で表されるハミルトニアンの基底状態と第一励起エネルギーを求めよ，という問題に帰着したわけである．この問題に関しては，量子多体系の分野における膨大な量の研究の蓄積があり，そこで得られた手法や結果を拝借して与えることができる．

3.2 物理量のダイナミクス

さて、系の定常状態をあらためて $|S\rangle$ と書こう。すなわち、 $|S\rangle$ は遷移行列 \mathcal{M} の 0 固有値に対応する固有ベクトル

$$\mathcal{M}|S\rangle = 0 \quad (3.4)$$

であるとする。また、全ての状態が等確率に混じり合っている状態を $|T\rangle$ と書こう

$$|T\rangle := \sum_{\tau_1 \tau_2 \cdots \tau_L} |\tau_1 \tau_2 \cdots \tau_L\rangle. \quad (3.5)$$

すると、一般の状態ベクトル $|P\rangle \in V_L$ の規格化条件は $\langle T|P\rangle = 1$ と書ける。また、確率遷移行列の性質より、 $\langle T|\mathcal{M} = 0$ が成り立つので、初期時刻 $t = 0$ で $\langle T|P(0)\rangle = 1$ と規格化しておけば、任意の時刻 t において $\langle T|P(t)\rangle = \langle T|e^{\mathcal{M}t}|P(0)\rangle = \langle T|P(0)\rangle = 1$ と規格化されていることが分かる。

次に、物理量 A の期待値の時間発展 $\langle A(t)\rangle$ を考えよう。状態 $\tau := (\tau_1, \dots, \tau_L)$ において物理量 A がとる値を $A(\tau)$ と書こう。そして A をあらためて、 V_L の基底 $|\tau\rangle$ に対角的に $A|\tau\rangle = A(\tau)|\tau\rangle$ と作用する演算子 $A \in \text{End}V_L$ であるとみなす。すると、状態 $|P\rangle = \sum_{\tau} P(\tau)|\tau\rangle$ における物理量 A の期待値は

$$\langle A\rangle := \frac{\sum_{\tau} P(\tau)A(\tau)}{\sum_{\tau} P(\tau)} = \frac{\langle T|A|P\rangle}{\langle T|P\rangle} \quad (3.6)$$

と書ける。また、系が初期状態 $|P(0)\rangle$ から時間発展する場合の A のダイナミクスは

$$\langle A(t)\rangle := \frac{\langle T|A|P(t)\rangle}{\langle T|P(t)\rangle} = \frac{\langle T|Ae^{\mathcal{M}t}|P(0)\rangle}{\langle T|P(0)\rangle} \quad (3.7)$$

と書ける。

4 量子群 $U_q(\mathfrak{sl}_2)$ の対称性

まずは吸脱着のない通常の ASEP を考える。序論でも述べたように、閉じた境界条件の ASEP は量子群 $U_q(\mathfrak{sl}_2)$ の対称性を持つ。これについて簡単に説明する。

4.1 量子群 $U_q(\mathfrak{sl}_2)$ の定義

まず、リー代数 \mathfrak{sl}_2 とは、 e, f, h を基底とする \mathbb{C} 上のベクトル空間で、括弧積

$$[h, e] = 2e, \quad [h, f] = -2f, \quad [e, f] = h \quad (4.1)$$

によって定められる。ただし、括弧積とは双線形、反対称で、ヤコビ恒等式を満たす 2 項演算である。よく知られているように、2 次元表現をとれば

$$e = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad f = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad h = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (4.2)$$

となる。このリー代数 \mathfrak{sl}_2 の普遍包絡代数 $U(\mathfrak{sl}_2)$ を q -変形したものが $U_q(\mathfrak{sl}_2)$ である。ここで、 q の範囲を $0 < q < 1$ とし、 q の値を固定しよう。 $U_q(\mathfrak{sl}_2)$ とは、 e, f, k, k^{-1} を生成元とし、関係式

$$[e, f] = \frac{k - k^{-1}}{q^{\frac{1}{2}} - q^{-\frac{1}{2}}}, \quad kk^{-1} = k^{-1}k = 1, \quad kek^{-1} = qe, \quad kfk^{-1} = q^{-1}f \quad (4.3)$$

で定められる代数のことである。ここで、 $q = 1 + \epsilon$ として、 $k^{\pm 1} \mapsto "q^{\pm h/2}" = 1 \pm \epsilon h/2 + O(\epsilon^2)$ とおいて $q \rightarrow 1 (\epsilon \rightarrow 0)$ の極限をとれば先に定義した \mathfrak{sl}_2 の交換関係を回復することが確認できる。

さて、今扱っているモデルは、それぞれの格子に粒子がいる、いないの 2 状態をとるので、 $U_q(\mathfrak{sl}_2)$ の 2 次元表現

$$e = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad f = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad k = \begin{pmatrix} q^{\frac{1}{2}} & 0 \\ 0 & q^{-\frac{1}{2}} \end{pmatrix}, \quad k^{-1} = \begin{pmatrix} q^{-\frac{1}{2}} & 0 \\ 0 & q^{\frac{1}{2}} \end{pmatrix} \quad (4.4)$$

をとろう。ここで、後の便宜のため、規格化を少し変更して g, \tilde{g}

$$g = q^{\frac{1}{2}}k^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & q \end{pmatrix}, \quad \tilde{g} = q^{\frac{1}{2}}k = \begin{pmatrix} q & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (4.5)$$

を導入すると、定義関係式は

$$[e, f] = \frac{g - \tilde{g}}{1 - q}, \quad g\tilde{g} = \tilde{g}g = q, \quad \tilde{g}eg = q^2e, \quad \tilde{g}fg = f \quad (4.6)$$

となる。

4.2 テンソル積表現

さて、先に述べた代数関係を保ったまま、系全体に作用する演算子を構成したい。これは、

$$\Delta(e) = e \otimes 1 + g \otimes e, \quad \Delta(f) = f \otimes \tilde{g} + 1 \otimes f, \quad \Delta(g) = g \otimes g, \quad \Delta(\tilde{g}) = \tilde{g} \otimes \tilde{g}, \quad (4.7)$$

で定められる余積 Δ によって実現される。余結合律 $(\Delta \otimes \text{id}) \circ \Delta = (\text{id} \otimes \Delta) \circ \Delta$ により、系全体に作用するテンソル積表現が

$$\begin{aligned} E &:= \Delta^{(L-1)}(e) = e_1 + g_1 e_2 + \cdots + g_1 \cdots g_{L-1} e_L, & F &:= \Delta^{(L-1)}(f) = f_1 \tilde{g}_2 \cdots \tilde{g}_L + \cdots + f_{L-1} \tilde{g}_L + f_L, \\ G &:= \Delta^{(L-1)}(g) = g_1 \cdots g_L, & \tilde{G} &:= \Delta^{(L-1)}(\tilde{g}) = \tilde{g}_1 \cdots \tilde{g}_L \end{aligned} \quad (4.8)$$

と構成できる。ここで、 x_n は n 番目の格子のみに x として作用し、その他の格子には恒等演算子として作用する

$$x_n := \underbrace{\text{id} \otimes \text{id} \otimes \cdots \otimes \text{id}}_{n-1} \otimes x \otimes \underbrace{\text{id} \otimes \text{id} \otimes \cdots \otimes \text{id}}_{L-n} \quad (4.9)$$

ことを表す。余積 Δ は

$$\Delta([e, f]) = \Delta\left(\frac{g - \tilde{g}}{1 - q}\right), \quad \Delta(g\tilde{g}) = \Delta(\tilde{g}g) = q, \quad \Delta(\tilde{g}eg) = q^2\Delta(e), \quad \Delta(\tilde{g}fg) = \Delta(f) \quad (4.10)$$

と関係式を保存するので、(4.8) は V_L 全体に作用するテンソル積表現となることが分かる。すなわち、 E, F, G, \tilde{G} は生成元と同じ関係式

$$[E, F] = \frac{G - \tilde{G}}{1 - q}, \quad G\tilde{G} = \tilde{G}G = q, \quad \tilde{G}EG = q^2E, \quad \tilde{G}FG = F \quad (4.11)$$

を満たす。

4.3 量子群 $U_q(\mathfrak{sl}_2)$ による定常状態の構成

さて、吸脱着がない場合の閉じた境界条件の ASEP の確率遷移行列を \mathcal{M}_0 と書こう：

$$\mathcal{M}_0 := \sum_{n=1}^{L-1} \mathcal{M}_{n, n+1} = \sum_{n=1}^{L-1} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -q & 1 & 0 \\ 0 & q & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}_{n, n+1}. \quad (4.12)$$

ただし、右へのホッピングレートが $p = 1$ となるように時間スケールを規格化した。すると、式 (4.8) で定義された $U_q(\mathfrak{sl}_2)$ の生成子 E, F, G, \tilde{G} と交換すること

$$[\mathcal{M}_0, E] = [\mathcal{M}_0, F] = [\mathcal{M}_0, G] = [\mathcal{M}_0, \tilde{G}] = 0, \quad (4.13)$$

を簡単な計算により示すことができる。すなわち、系は $U_q(\mathfrak{sl}_2)$ 対称性を持つ。この事実から、系の定常状態を $U_q(\mathfrak{sl}_2)$ のテンソル積表現によって構成することができる。

吸脱着がない場合、粒子数 $N := \sum_{n=1}^L \tau_n$ は系の保存量となる。したがって、全体の $2^L \times 2^L$ サイズの遷移行列は、粒子数 N の部分空間ごとに $\binom{L}{N}$ サイズの部分行列にブロック対角化されている。粒子が一個もない場合、 $|0\rangle$ が自明な定常状態となる： $\mathcal{M}_0|0\rangle = 0$ 。さて、テンソル積表現 F は粒子をひとつ生成し、 E は粒子をひとつ消滅させることに注意しよう。また、交換関係 $[\mathcal{M}_0, F] = 0$ より $\mathcal{M}_0 F^N |0\rangle = F^N \mathcal{M}_0 |0\rangle = 0$ となることは明らかであろう。これらのことから、 N 粒子定常状態 $|S_N\rangle$ は、規格化定数を C_N として

$$\begin{aligned} |S_N\rangle &= C_N F^N |0\rangle, \\ F^N |0\rangle &= [N]_q! \sum_{1 \leq n_1 < \dots < n_N \leq L} q^{\sum_{j=1}^N (\tilde{n}_j - j)} |n_1, \dots, n_N\rangle, \end{aligned} \quad (4.14)$$

と構成される。ただし、 $\tilde{n}_{N-j+1} = L - n_j + 1$ であり、

「左から j 番目の粒子が左から n_j 番目の格子にいる \Leftrightarrow 右から j 番目の粒子が右から \tilde{n}_j 番目の格子にいる」

ことを表す。

ここで、 q -階乗

$$[N]_q! = [1]_q [2]_q \dots [N]_q, \quad [n]_q = 1 + q + \dots + q^{n-1} \quad (4.15)$$

を導入した。 q が 0 と 1 の場合には

$$\begin{aligned} [n]_q &= n, \quad [N]_q! = N! \quad (q = 1), \\ [n]_q &= 1, \quad [N]_q! = 1 \quad (q = 0) \end{aligned} \quad (4.16)$$

となる。規格化定数 C_N は、規格化条件

$$\langle T_N | S_N \rangle = 1 \quad (4.17)$$

から決まる。ここで、 $|T_N\rangle$ は周期的 ASEP の N 粒子定常状態

$$|T_N\rangle := \sum_{1 \leq n_1 < \dots < n_N \leq L} |n_1, \dots, n_N\rangle \quad (4.18)$$

である。恒等式

$$\sum_{1 \leq n_1 < \dots < n_N \leq L} q^{\sum_{j=1}^N (\tilde{n}_j - j)} = \sum_{1 \leq n_1 < \dots < n_N \leq L} q^{\sum_{j=1}^N (n_j - j)} = \binom{L}{N}_q, \quad (4.19)$$

を用いて、規格化された定常状態

$$|S_N\rangle = \frac{[L-N]_q!}{[L]_q!} F^N |0\rangle = \binom{L}{N}_q^{-1} \sum_{1 \leq n_1 < \dots < n_N \leq L} q^{\sum_{j=1}^N (\tilde{n}_j - j)} |n_1, \dots, n_N\rangle, \quad (4.20)$$

を得る。ここで、 q -2 項係数を

$$\binom{L}{N}_q := \frac{[L]_q!}{[N]_q! [L-N]_q!}. \quad (4.21)$$

で定義した。因子 $q^{\sum_{j=1}^N (\tilde{n}_j - j)}$ のために、 q が小さい場合には粒子は系の右側にたまりやすい傾向があることが分かる。その極端な状況として、粒子が右にのみ流れる TASEP (Totally Asymmetric SEP) の場合 ($q = 0$) には、 $\tilde{n}_j = j$, $[n]_q = 1$ となり、

$$|S_N\rangle = F^N |0\rangle = |L-N+1, \dots, L-1, L\rangle \quad (4.22)$$

を得る。これは、 N 粒子の全てが右側に詰まり、完全に粒子の流れがなくなった状態である (図 3)。

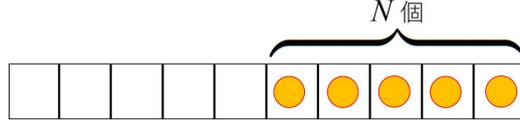


図 3: 閉じた境界条件における TASEP の定常状態

5 吸脱着を入れた場合

5.1 定常状態

さて、図 3 の状態に、吸脱着による粒子の流出入の効果を導入することによって、再び系に流れを発生させることができる。ただし、系のサイズ L を大きくしていったとき、吸脱着の効果が有限に入っていると、系のダイナミクスはホッピングよりも吸脱着の効果が優勢となり、両者の競合が起こらない [5]。そこで、以下のように無限小の吸脱着を考えよう。

吸脱着の強さを $\omega := \omega_a + \omega_d$ で表し、吸着の脱着に対する比を $\alpha := \omega_a/\omega_d$ と書こう。吸脱着を入れた場合の定常状態を $|S\rangle$ と書く ($M|S\rangle = 0$)。ここで、 α を有限に保ったまま $\omega \rightarrow 0$ とする極限を考える。この極限で定常状態が

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} |S\rangle = \frac{1}{(1+\alpha)^L} \sum_{N=0}^L \binom{L}{N} \alpha^N |S_N\rangle \quad (5.1)$$

と書けることを conjecture として提案する。TASEP の場合 ($q = 0$) には、

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} |S\rangle = \frac{1}{(1+\alpha)^L} \sum_{N=0}^L \binom{L}{N} \alpha^N F^N |0\rangle = \left(\frac{1+\alpha F}{1+\alpha} \right)^L |0\rangle. \quad (5.2)$$

となる。この式は、fugacity を α とする大分配関数と類推できることに注意しよう。この conjecture は、少数系 ($L \leq 4$) において確率遷移行列を直接対角化して得られた結果と整合していることを確認済みである。

5.2 粒子密度分布

吸脱着がない場合の粒子密度分布 ρ_n は以下の式 [4]

$$\begin{aligned} \rho_n &:= \sum_{\tau_1, \dots, \tau_L} \tau_n \langle \tau_1, \dots, \tau_L | S_N \rangle \\ &= \binom{L}{N}_q^{-1} \sum_{k=0}^{N-1} (-1)^{N-k+1} q^{(N-k)(L-n-\frac{N+k-1}{2})} \binom{L}{k}_q \end{aligned} \quad (5.3)$$

で与えられる。この式と、定常状態の conjecture (5.1) を用いて、吸脱着がある場合の粒子密度分布の式が

$$\begin{aligned} \rho_n &:= \sum_{\tau_1, \dots, \tau_L} \tau_n \langle \tau_1, \dots, \tau_L | S \rangle \\ &= \frac{1}{(1+\alpha)^L} \sum_{N=0}^L \binom{L}{N} \alpha^N \binom{L}{N}_q^{-1} \sum_{k=0}^{N-1} (-1)^{N-k+1} q^{(N-k)(L-n-\frac{N+k-1}{2})} \binom{L}{k}_q \end{aligned} \quad (5.4)$$

と得られる。

TASEP の場合 ($q = 0$) には、

$$\begin{aligned} \rho_n &:= \lim_{\omega \rightarrow 0} \sum_{\tau_1, \dots, \tau_L} \tau_n \langle \tau_1, \dots, \tau_L | S \rangle \\ &= \frac{1}{(1+\alpha)^L} \sum_{N=\tilde{n}}^L \binom{L}{N} \alpha^N \\ &= \binom{L}{\tilde{n}} \alpha^{\tilde{n}} F(L+1, \tilde{n}, \tilde{n}+1; -\alpha). \end{aligned} \quad (5.5)$$

となる。ここで、 $F(a, b, c; z)$ は超幾何関数

$$F(a, b, c; z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a)_n (b)_n}{(c)_n n!} z^n, \quad (a)_n = a(a+1) \cdots (a+n-1) \quad (5.6)$$

である。この結果から、粒子の流入入の比 α を変えることによって、渋滞長の変化が超幾何関数で表される様子を観測することができた。

粒子数 N の期待値は

$$\langle N \rangle = \sum_{n=1}^L \rho_n = \frac{\alpha L}{1 + \alpha} \quad (5.7)$$

となり、物理的に整合した結果

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} \langle N \rangle = 0, \quad \lim_{\alpha \rightarrow \infty} \langle N \rangle = L. \quad (5.8)$$

を確認できる。

6 まとめ

本稿では、まず確率過程模型における連続時間発展の行列記法について解説を行った。続けて、閉じた境界条件の場合には量子群 $U_q(\mathfrak{sl}_2)$ の対称性を持つことを示し、この事実から定常状態が厳密に構成できることを示した。今回我々は、無限小の吸脱着を導入した模型を考え、定常状態および粒子密度分布を解析的に計算することに成功した。今後の課題は、多点相関関数、物理量の時間発展の厳密計算を行うことである。

参考文献

- [1] R.A. Blythe, M.R. Evans, J. Phys. A: Math. Theor. 40 R333 (2007).
- [2] T. Sasamoto, J. Phys. A: Math. Gen. 32 7109 (1999).
- [3] O. Golinelli, K. Mallick, J. Phys. A: Math. Gen. 39 12679 (2006).
- [4] S. Sandow and G. Schütz, Europhys. Lett. 26 7 (1994).
- [5] A. Parmegianni, T. Franosh, E. Frey, Phys. Rev. Lett. 90 086601 (2003).