確率過程と微分型非線形シュレディンガー方程式

佐藤 純 (Jun Sato)
東京工芸大学 工学部工学科 情報コース

概 要

非対称単純排他過程 (Asymmetric Simple Exclusion Process: ASEP) は，排除体積効果を持つ粒子が左右に非対称なレートでホッピングする古典確率過程模型である．この排除体積効果をボソン系の相互作用で擬似的に表せることが知られている [1]．本レポートでは，その詳細な計算を紹介する．このボソン場の運動方程式は，微分型非線形シュレディンガー方程式 (Derivative Non-Linear Schrödinger equation: DNLS) という可積分な非線形偏微分方程式で記述される．逆散乱法を用いてこの初期値問題の解を構成し，元々の確率過程のダイナミクスとの対応を議論することを試みる．

1 ASEP

まず，確率過程模型である ASEP を解説する．セル数が L の 1 次元格子を考え，各セルは粒子が「いる」か「いない」かの 2 状態をとり，各粒子は左右に確率的にホッピングする．左右へのホッピングレートを q, p とする．ただし，ホッピングの行き先のセルに既に粒子がいる場合には，ホッピングは起こらないとする（排除体積効果）．

1.1 状態ベクトル

セル i の粒子数を表す変数 n_i を導入する．今の場合，$n_i = 0, 1$ の 2 通りの値をとる．すなわち，粒子が「いる」,「いない」状態をそれぞれ $n_i = 1, 0$ で表すことにする．系全体の状態をまとめて $n := (n_1, n_2, \cdots, n_L)$ と書くことにする．この状態に確定した状態ベクトルを

$$|n\rangle = |n_1, n_2, \cdots, n_L\rangle$$

と書く．これが確率的状態ベクトル空間の基底をなす．すなわち，時刻 t において系が状態 n をとる確率を $\psi(n,t)$ と書けば，系の確率的状態ベクトルは

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n \psi(n,t)|n\rangle \tag{1.1}$$

と書ける．

1.2 マスター方程式

系の時間発展はマスター方程式

$$\frac{\partial}{\partial t}\psi(n,t) = \sum_{\substack{n' \\ n' \neq n}} \psi(n',t)\mathfrak{W}(n' \to n) - \sum_{\substack{n' \\ n' \neq n}} \psi(n,t)\mathfrak{W}(n \to n')$$

に従う．ただし，n は粒子の配置パターンを表し，$\psi(n,t)$ は時刻 t において配置 n を取る確率を表す．$\mathfrak{W}(n \to n')$ は配置 n から n' への遷移レートを表す．確率遷移行列 $\hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{ASEP}}$ を使ってベクトル形式で書くと，

$$\boxed{\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi(t)\rangle = -\hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{ASEP}}|\psi(t)\rangle} \tag{1.2}$$

となる．

1.3 確率遷移行列

セル i にいる粒子を「消す」演算子を $\hat{s}_i^+$, セル i に粒子を「付ける」演算子を $\hat{s}_i^-$, セル i の粒子数を「数える」演算子を $\hat{n}_i$ とする．基底ベクトル $|n_1, n_2, \cdots, n_L\rangle$ への作用は，

$$\hat{s}_i^+|\cdots,0,\cdots\rangle = 0, \quad \hat{s}_i^+|\cdots,1,\cdots\rangle = |\cdots,0,\cdots\rangle,$$
$$\hat{s}_i^-|\cdots,0,\cdots\rangle = |\cdots,1,\cdots\rangle, \quad \hat{s}_i^-|\cdots,1,\cdots\rangle = 0,$$
$$\hat{n}_i|\cdots,0,\cdots\rangle = 0, \quad \hat{n}_i|\cdots,1,\cdots\rangle = |\cdots,1,\cdots\rangle$$

で与えられ，基底を

$$|n_i=0\rangle=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix},\quad |n_i=1\rangle=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$$

ととって行列表示すれば，

$$\hat{s}_i^+=\begin{pmatrix}0&1\\0&0\end{pmatrix},\quad \hat{s}_i^-=\begin{pmatrix}0&0\\1&0\end{pmatrix},\quad \hat{n}_i=\begin{pmatrix}0&0\\0&1\end{pmatrix}$$

となる．これを使って確率遷移行列 $\hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{ASEP}}$ は，

$$\begin{aligned}-\hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{ASEP}}=\sum_{j=1}^{L-1}\Big[p\big\{\hat{s}_j^+\hat{s}_{j+1}^- -\hat{n}_j(1-\hat{n}_{j+1})\big\}+q\big\{\hat{s}_j^-\hat{s}_{j+1}^+-(1-\hat{n}_j)\hat{n}_{j+1}\big\}\Big]\\ +\alpha\big\{\hat{s}_1^- -(1-\hat{n}_1)\big\}+\gamma(\hat{s}_1^+-\hat{n}_1)+\beta(\hat{s}_L^+-\hat{n}_L)+\delta\big\{\hat{s}_L^- -(1-\hat{n}_L)\big\}\end{aligned}\tag{1.3}$$

と書ける．ただし，左端での流入レート，右端での流出レート，左端での流出レート，右端での流入レートをそれぞれ $\alpha,\beta,\gamma,\delta$ とした．ここで極限 $L\to\infty$ を考え，簡単のため境界の影響を無視すると

$$\boxed{-\hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{ASEP}}=\sum_j\left[p\hat{s}_j^+\hat{s}_{j+1}^-+q\hat{s}_j^-\hat{s}_{j+1}^+-(p+q)\hat{n}_j(1-\hat{n}_{j+1})\right]}\tag{1.4}$$

と書ける．

1.4 状態ベクトルの規格化

$\psi(n,t)$ は確率を表すので，任意の時刻 t で

$$\sum_n\psi(n,t)=1$$

を満たす必要がある．したがって，状態ベクトルの規格化条件は

$$\langle s|\psi(t)\rangle=1$$

と書ける．ここで，射影状態 $\langle s|$ を

$$\langle s|:=\langle 0|\exp\left(\sum_{j=1}^L\hat{s}_j^+\right)=\sum_n\langle n|$$

で定めた．これは，任意の粒子配置が等確率で実現している状態を表している．ここで，確率遷移行列の性質 $\langle s|\hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{ASEP}}=0$ より

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle s|\psi(t)\rangle=\langle s|\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi(t)\rangle\right)=-\langle s|\hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{ASEP}}|\psi(t)\rangle=0$$

が成り立つので，ある時刻 t で規格化されていれば，任意の時刻での規格化が保証される．

1.5 物理量の期待値

ある物理量 A が粒子配置 n でとる値を $A(n)$ と書き，状態ベクトル $|n\rangle$ に

$$\hat{A}|n\rangle=A(n)|n\rangle$$

と対角に作用する対角行列を $\hat{A}$ と書くことにする．

確率的状態 $|\psi(t)\rangle=\sum_n\psi(n,t)|n\rangle$ における物理量 A の期待値は

$$\langle A\rangle=\sum_n\psi(n,t)A(n)$$

と書けるので，これは射影状態 $\langle s|$ を使って

$$\langle A\rangle=\langle s|\hat{A}|\psi(t)\rangle$$

と書ける．

1.6　粒子密度の時間発展

位置 k の粒子密度（粒子の存在確率）の時間発展を考える．位置 k の粒子数 n_k の期待値

$$\langle n_k \rangle = \sum_n \psi(n,t) n_k$$

が粒子の存在確率を表すが，これの時間発展は，

$$\partial_t \langle n_k \rangle = \sum_n \left\{ \partial_t \psi(n,t) \right\} n_k$$

に従う．ここで，$\partial_t \psi(n,t)$ の情報はマスター方程式から得られるはずである．展開式 (1.1) をマスター方程式 (1.2) に代入して，

$$\sum_n \left\{ \partial_t \psi(n,t) \right\} |n\rangle = -\sum_n \psi(n,t) \hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{ASEP}} |n\rangle$$

となるが，これに左から $\langle n|$ を作用させて，

$$\partial_t \psi(n,t) = \sum_{n'} \psi(n',t) \langle n| - \hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{ASEP}} |n'\rangle \tag{1.5}$$

を得る．したがって粒子密度の時間発展は

$$\partial_t \langle n_k \rangle = \sum_{n,n'} n_k \psi(n',t) \langle n| - \hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{ASEP}} |n'\rangle = \sum_n \psi(n,t) \sum_{n'} n'_k \langle n'| - \hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{ASEP}} |n\rangle$$

と書けるので，

$$A_k(n) := \sum_{n'} n'_k \langle n'| - \hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{ASEP}} |n\rangle \tag{1.6}$$

を定義すれば

$$\partial_t \langle n_k \rangle = \langle A_k \rangle$$

と書ける．$A_k(n)$ の定義式 (1.6) に $\hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{ASEP}}$ の表式 (1.3) を代入すると，境界の影響がない $(2 \leq k \leq L-1)$ とき

$$\begin{aligned}
A_k(n) = \sum_{j=1}^{L-1} \Big[& p\big\{ n_j(1-n_{j+1})(n_k - \delta_{k,j} + \delta_{k,j+1}) - n_j(1-n_{j+1}) n_k \big\} \\
& + q\big\{ (1-n_j) n_{j+1} (n_k + \delta_{k,j} - \delta_{k,j+1}) - (1-n_j) n_{j+1} n_k \big\} \Big] \\
= {} & p\big\{ n_{k-1}(1-n_k) - n_k(1-n_{k+1}) \big\} + q\big\{ (1-n_k) n_{k+1} - (1-n_{k-1}) n_k \big\} \\
= {} & p n_{k-1} + q n_{k+1} - (p+q) n_k + (p-q) n_k (n_{k+1} - n_{k-1})
\end{aligned}$$

より，

$$\boxed{\partial_t \langle n_k \rangle = p \langle n_{k-1} \rangle + q \langle n_{k+1} \rangle - (p+q) \langle n_k \rangle + (p-q) \langle n_k (n_{k+1} - n_{k-1}) \rangle} \tag{1.7}$$

を得る．右辺最初の 3 項は左右への非対称ホッピングを表し，第 4 項は排除体積効果による非線形相互作用を表す．

2　非排他的ボソン系

非排他的に 1 次元格子をホップするボソン系を考える．ASEP における排他的効果をボソンの非線形相互作用項によって表し，同じ運動方程式 (1.7) を与えることを考える．

2.1 生成消滅演算子

生成消滅演算子 $\hat{a}$, $\hat{a}^\dagger$ を交換関係

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$$

で定める．よく知られているように，真空状態 $|0\rangle$ が関係式

$$\hat{a}|0\rangle = 0, \quad \langle 0|0\rangle = 1$$

により定まり，n 粒子状態は真空に生成演算子 $\hat{a}^\dagger$ を n 回かけることによって

$$|n\rangle := \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(\hat{a}^\dagger\right)^n |0\rangle, \quad \langle n|m\rangle = \delta_{n,m}$$

と構成される．n 粒子状態 $|n\rangle$ への生成消滅演算子の作用は

$$\begin{aligned}\hat{a}^\dagger|n\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(\hat{a}^\dagger\right)^{n+1} |0\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \\ \hat{a}|n\rangle &= \frac{n}{\sqrt{n!}} \left(\hat{a}^\dagger\right)^{n-1} |0\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle\end{aligned}$$

となる．

2.2 正規直交基底

サイト数 L の 1 次元格子を考える．サイト j における生成消滅演算子を $\hat{a}_j$, $\hat{a}_j^\dagger$ とする．サイト j の粒子数が n_j である状態を

$$|n_1, \cdots, n_L\rangle := \frac{1}{\sqrt{n_1! \cdots n_L!}} \left(\hat{a}_1^\dagger\right)^{n_1} \cdots \left(\hat{a}_L^\dagger\right)^{n_L} |0\rangle$$

で定めれば，規格化条件

$$\langle n_1, \cdots, n_L|n_1', \cdots, n_L'\rangle = \delta_{n_1,n_1'} \cdots \delta_{n_L,n_L'}$$

を満たす．排他的な ASEP の場合は $n_j = 0, 1$ の 2 通りのみであったが，今の場合は非負の全整数 $n_j = 0, 1, 2, \cdots$ をとりうることに注意.

2.3 射影状態

ASEP の場合と同様に射影状態 $\langle s|$ を

$$\langle s| := \langle 0| \exp\left(\sum_{j=1}^{L} \hat{a}_j\right)$$

で定める．ASEP の場合と違って，高次の項が消えないことに注意して展開すると

$$\begin{aligned}\langle s| &= \cdots + \left(\frac{1}{N!}\langle 0| \left(\hat{a}_1\right)^{n_1} \cdots \left(\hat{a}_L\right)^{n_L}\right) \times \frac{N!}{n_1! \cdots n_L!} + \cdots \qquad (N = n_1 + n_2 + \cdots + n_L) \\ &= \sum_{n_1=0}^{\infty} \cdots \sum_{n_L=0}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{n_1! \cdots n_L!}} \langle n_1, \cdots, n_L|\end{aligned}$$

となる．ここで，ASEP の場合と同様に，全系の粒子配置を表す変数を $n := (n_1, \cdots, n_L)$ と略記して

$$\langle s| = \sum_n \frac{1}{\sqrt{n!}} \langle n|$$

と書くことにする．ただし，

$$\sqrt{n!} := \sqrt{n_1! \cdots n_L!} \qquad \Big(n = (n_1, \cdots, n_L)\Big)$$

と略記した.

2.4　確率状態ベクトル

時刻 t において粒子配置 $n=(n_1,\cdots,n_L)$ をとる確率が $\psi(n,t)$ となるような確率的状態ベクトルを

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n \psi(n,t)\left(\hat{a}_1^\dagger\right)^{n_1}\cdots\left(\hat{a}_L^\dagger\right)^{n_L}|0\rangle = \sum_n \sqrt{n!}\,\psi(n,t)|n\rangle \tag{2.1}$$

で定めれば，規格化条件は射影状態 $\langle s| = \sum_n \frac{1}{\sqrt{n!}}\langle n|$ を使って

$$\langle s|\psi(t)\rangle = \sum_n \psi(n,t) = 1$$

と書ける．

2.5　物理量の期待値

ある物理量 A が粒子配置 n でとる値を $A(n)$ と書き，状態ベクトル $|n\rangle$ に

$$\hat{A}|n\rangle = A(n)|n\rangle$$

と対角に作用する対角行列を $\hat{A}$ と書くことにする．

確率的状態 $|\psi(t)\rangle = \sum_n \sqrt{n!}\,\psi(n,t)|n\rangle$ における物理量 A の期待値は

$$\langle A\rangle = \sum_n \psi(n,t)A(n)$$

と書けるので，これは射影状態 $\langle s| = \sum_n \frac{1}{\sqrt{n!}}\langle n|$ を使って

$$\langle A\rangle = \langle s|\hat{A}|\psi(t)\rangle$$

と書ける．

2.6　マスター方程式

非排他的ボソン系のハミルトニアン $\hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{boson}}$ を

$$\boxed{-\hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{boson}} := \sum_j \left[p\hat{a}_{j-1}\hat{a}_j^\dagger + q\hat{a}_j^\dagger\hat{a}_{j+1} - (p+q)\hat{n}_j + (p-q)(\hat{a}_j^\dagger\hat{a}_{j+1}\hat{n}_j - \hat{n}_j\hat{n}_{j+1})\right]} \tag{2.2}$$

で定める．式 (1.4) および (1.7) との類似性に注意．系の確率的状態ベクトル $|\psi(t)\rangle$ がマスター方程式

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi(t)\rangle = -\hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{boson}}|\psi(t)\rangle \tag{2.3}$$

に従って時間発展するとすると，粒子数の期待値の時間発展が ASEP の場合 (式 (1.7)) と同じになることを，次節で示す．

2.7　粒子数の時間発展

位置 k の粒子数 n_k の期待値

$$\langle n_k\rangle = \sum_n \psi(n,t)n_k$$

の時間発展は，

$$\partial_t\langle n_k\rangle = \sum_n \left\{\partial_t\psi(n,t)\right\}n_k$$

に従う．ここで，$\partial_t\psi(n,t)$ の情報はマスター方程式 (2.3) から得られる．展開式 (2.1) をマスター方程式 (2.3) に代入して，

$$\sum_n \sqrt{n!}\,\{\partial_t\psi(n,t)\}|n\rangle = -\sum_n \sqrt{n!}\,\psi(n,t)\hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{boson}}|n\rangle$$

となるが，これに左から $\langle n|$ を作用させて，

$$\sqrt{n!}\,\partial_t\psi(n,t) = \sum_{n'} \sqrt{n'!}\,\psi(n',t)\langle n| - \hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{boson}}|n'\rangle$$

を得る．したがって粒子密度の時間発展は

$$\begin{aligned}\partial_t\langle n_k\rangle &= \sum_{n,n'} \frac{\sqrt{n'!}}{\sqrt{n!}} n_k \psi(n',t)\langle n| - \hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{boson}}|n'\rangle \\ &= \sum_n \psi(n,t) \sum_{n'} \frac{\sqrt{n!}}{\sqrt{n'!}} n'_k \langle n'| - \hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{boson}}|n\rangle\end{aligned}$$

と書けるので，

$$A_k(n) := \sum_{n'} \frac{\sqrt{n!}}{\sqrt{n'!}} n'_k \langle n'| - \hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{boson}}|n\rangle \tag{2.4}$$

を定義すれば

$$\partial_t\langle n_k\rangle = \langle A_k\rangle$$

と書ける．$A_k(n)$ の定義式 (2.4) に $\hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{boson}}$ の表式 (2.2) を代入すると，

$$\begin{aligned}A_k(n) = \sum_j \Bigg[&\sqrt{\frac{n_{j-1}}{n_j+1}} p \sqrt{n_{j-1}}\sqrt{n_j+1}(n_k + \delta_{k,j} - \delta_{k,j-1}) \\ &+ \sqrt{\frac{n_{j+1}}{n_j+1}} q \sqrt{n_{j+1}}\sqrt{n_j+1}(n_k + \delta_{k,j} - \delta_{k,j+1}) \\ &- (p+q)n_j n_k \\ &+ (p-q)\left(\sqrt{\frac{n_{j+1}}{n_j+1}}\sqrt{n_j+1}\sqrt{n_{j+1}} n_j(n_k + \delta_{k,j} - \delta_{k,j+1}) - n_j n_{j+1} n_k\right)\Bigg] \\ = \sum_j \Big[&p n_{j-1}(\delta_{k,j} - \delta_{k,j-1}) + q n_{j+1}(\delta_{k,j} - \delta_{k,j+1}) + (p-q)\left(n_{j+1} n_j (\delta_{k,j} - \delta_{k,j+1})\right)\Big] \\ = p(&n_{k-1} - n_k) + q(n_{k+1} - n_k) + (p-q)(n_k n_{k+1} - n_{k-1} n_k)\end{aligned} \tag{2.5}$$

より，

$$\boxed{\partial_t\langle n_k\rangle = p\langle n_{k-1}\rangle + q\langle n_{k+1}\rangle - (p+q)\langle n_k\rangle + (p-q)\langle n_k(n_{k+1} - n_{k-1})\rangle}$$

となり，ASEP の場合の式 (1.7) と完全に一致する．

3 まとめ

本レポートではまず，古典確率過程である ASEP とそのダイナミクスの定式化を紹介した．その後，1 点関数が同じダイナミクスに従うボソン系の構成法 [1] を紹介した．これを連続化して場の理論に移行すると，微分型非線形 Schrödinger 方程式が現れる．有限粒子数の効果と非平衡ダイナミクスの数値的な解析は，文献 [2] によってなされている．逆散乱法によるソリトン解の構成と確率過程におけるその対応物の研究は，重要な問題として残されている．

参考文献

[1] T. Sasamoto and M. Wadati, J. Phys. Soc. Jpn **67** 3 784 (1998)

[2] Y. Ishiguro, J. Sato, K. Nishinari, J. Phys. Soc. Jpn **90** 114008 (2021).