

吸脱着つき ASEP の緩和ダイナミクス

佐藤純, 西成活裕

東京大学 先端科学技術研究センター

概要

通常の ASEP では一次元格子の両端のみから粒子が入り出る系を考えるが、ここでは系の任意の場所で粒子が吸脱着するような拡張された ASEP (ASEP with Langmuir kinetics = ASEP-LK) を考える。これは交通流の観点からは、車線変更による車の流入出を考慮したモデルに相当する。本稿では、2 粒子まとめて吸脱着するプロセスを考え、系の時間発展が量子スピン系の言葉でいう非エルミート XYZ スピン鎖で記述されることを示し、定常状態および緩和時間を厳密に解析する。

Relaxation dynamics of the ASEP with Langmuir kinetics

Jun Sato¹, Katsuhiro Nishinari¹

Research Center for Advanced Science and Technology, University of Tokyo

Abstract

We consider the ASEP with Langmuir kinetics (ASEP-LK), where a particle attaches at a certain rate if the site is empty, and detaches if it is occupied. From the point of view of traffic flow, this process corresponds to the inflow and outflow by the lane change. If we consider the process with simultaneous attachment and detachment of neighboring two particles, the time evolution of the system is described by the non-Hermitian XYZ spin chain, which enables the exact analysis of the relaxation dynamics of the model.

1 はじめに

非対称単純排除過程 (Asymmetric Simple Exclusion Process = ASEP) は、厳密な取り扱いができる非平衡統計力学モデルとして、近年盛んに研究されている。

ASEP は、一次元の格子上で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。このモデルは行列積表示 [1] やベータ仮説 [2] 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入出レートによる渋滞相と自由相の相分離 (図 1 の左側参照) 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。

最近、図 2 で表されるような、境界のみならず一次元格子上の任意の場所で粒子の吸脱着が可能

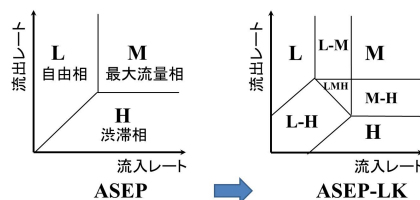


図 1: ASEP と ASEP-LK の相図

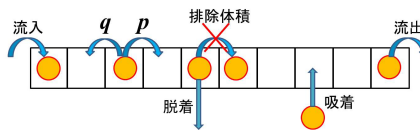


図 2: ASEP-LK の模式図

な ASEP (ASEP with Langmuir kinetics = ASEP-LK) が提案された [3]. この場合, 3 相が共存するような新しい相が現れ, ダイナミクスがより豊かになる (図 1 の右側参照). 車線変更を考慮した交通流モデルなど, 応用上の観点からも非常に興味深いモデルであるが, 厳密な取り扱いには途端に困難になる. 周期境界条件における定常状態の厳密解は得られているが [4], 緩和時間などのダイナミクスに関してはまだ調べられていない.

本稿では特に, 2 粒子まとめて吸脱着するようなプロセスを考え, このモデルの緩和ダイナミクスを厳密に解析することを試みる. なお, 本稿では以下簡単のため, 周期境界条件のみを取り扱う.

2 量子力学的定式化

まず準備として, ASEP のような確率過程モデルを取り扱う際に便利な量子力学的定式化 (Quantum Formalism) について簡単に説明する.

2.1 状態ベクトル

簡単のためにセル数を $L = 3$ とする. すると, i 番目のセルは粒子がいる状態 ($\tau_i = 1$) 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, 確率過程モデルを考えているので, 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 $0 \leq P(t|\tau_1, \tau_2, \tau_3) \leq 1$ と規格化条件 $\sum_{\tau_1, \tau_2, \tau_3=0,1} P(t|\tau_1, \tau_2, \tau_3) = 1$ 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

$$|P(t)\rangle = \begin{pmatrix} P(t|000) \\ P(t|001) \\ \vdots \\ P(t|111) \end{pmatrix} \quad (1)$$

で表し, これを状態ベクトルと呼ぶ.

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, 周期境界条件の通常の ASEP-LK 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 0, 吸着レートを ω_a , 脱着レートを ω_d とする.

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. 同様に全ての過程を考慮すると,

$$\begin{aligned} P(t + \Delta t|010) &= P(t|100)p\Delta t \\ &+ \{P(t|110) + P(t|011)\}\omega_d\Delta t \\ &+ P(t|000)\omega_a\Delta t \\ &+ P(t|010)\{1 - (p + 2\omega_a + \omega_d)\Delta t\} \end{aligned} \quad (2)$$

となる. したがってこれの時間微分は

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}P(t|010) &= \{P(t + \Delta t|010) - P(t|010)\}/\Delta t \\ &= pP(t|100) \\ &+ \omega_d\{P(t|110) + P(t|011)\} \\ &+ \omega_aP(t|000) \\ &+ (-p - 2\omega_a - \omega_d)P(t|010) \end{aligned} \quad (3)$$

とかける. これをマスター方程式という.

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

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}|P(t)\rangle &= M|P(t)\rangle, \quad (4) \\ M &= \begin{pmatrix} M_1 & \omega_d & \omega_d & 0 & \omega_d & 0 & 0 & 0 \\ \omega_a & M_2 & p & \omega_d & 0 & \omega_d & 0 & 0 \\ \omega_a & 0 & M_3 & \omega_d & p & 0 & \omega_d & 0 \\ 0 & \omega_a & \omega_a & M_4 & 0 & p & 0 & \omega_d \\ \omega_a & p & 0 & 0 & M_5 & \omega_d & \omega_d & 0 \\ 0 & \omega_a & 0 & 0 & \omega_a & M_6 & p & \omega_d \\ 0 & 0 & \omega_a & p & \omega_a & 0 & M_7 & \omega_d \\ 0 & 0 & 0 & \omega_a & 0 & \omega_a & \omega_a & M_8 \end{pmatrix}, \\ M_1 &= -3\omega_a, M_2 = -2\omega_a - \omega_d - p, \dots \end{aligned} \quad (5)$$

とまとめて書くことができる. したがって, このモデルの時間発展を解く問題は, 確率遷移行列の対角化の問題に帰着することになる. ここでは詳細は省くが, Perron-Frobenius の定理により, 確率遷移行列の実部が最大の固有値はゼロであり, 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.

2.4 定常状態と緩和時間

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

$$E_0 = 0, E_1 = -x_1 + iy_1, E_2 = -x_2 + iy_2, \dots$$

$$0 < x_1 < x_2 < \dots \quad (6)$$

という形に書くことができる。

ある初期状態 $|P(0)\rangle$ 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

$$|P(0)\rangle = c_0|0\rangle + c_1|1\rangle + c_2|2\rangle + \dots \quad (7)$$

と書く。すると、マスター方程式 (4) より、

$$|P(t)\rangle = c_0|0\rangle + c_1 e^{-x_1 t} e^{iy_1 t} |1\rangle + c_2 e^{-x_2 t} e^{iy_2 t} |2\rangle + \dots \quad (8)$$

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。

2.5 量子力学的定式化

マスター方程式 (4) は、ハミルトニアンを $\mathcal{H} = -M$ 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モデルの定常状態に、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、確率過程モデル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、特にこの場合には量子スピン系であるが、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行くことができる。次節において、この方法を用いて吸脱着つき ASEP のダイナミクスを解析する。

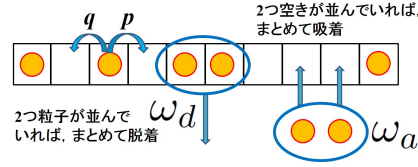


図 3: ASEP-LK の模式図

3 2粒子吸脱着型 ASEP

前節で議論した量子力学的定式化を用いて、2粒子吸脱着型 ASEP を解析する。図 3 で表されるように、2粒子まとめて吸脱着するような ASEP を考える。ここでは簡単のために周期境界条件のみを考える。

3.1 確率遷移行列

第 n セルと第 $(n+1)$ セルの隣接 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。この部分系での全ての過程を書き出すと、

$$\begin{cases} \text{右へのホッピング} & (1,0) \rightarrow (0,1) & p \\ \text{左へのホッピング} & (0,1) \rightarrow (1,0) & q \\ \text{2粒子吸着} & (0,0) \rightarrow (1,1) & \omega_a \\ \text{2粒子脱着} & (1,1) \rightarrow (0,0) & \omega_d \end{cases} \quad (9)$$

であるので、ここでの部分確率遷移行列は

$$M_{n,n+1} = \begin{pmatrix} -\omega_a & 0 & 0 & \omega_d \\ 0 & -q & p & 0 \\ 0 & q & -p & 0 \\ \omega_a & 0 & 0 & -\omega_d \end{pmatrix} \quad (10)$$

と書ける。これを用いて、全体の確率遷移行列 M は、

$$M = \sum_{n=1}^L M_{n,n+1} \quad (11)$$

と書ける。ここで、 $M_{n,n+1}$ は第 n セルと第 $(n+1)$ セルに式 (10) として作用し、その他の空間には恒等演算子として作用する。

3.2 量子スピン系へのマップ

ここで、スピン-1/2 の演算子であるパウリ行列

$$\sigma^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma^y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (12)$$

を用いて確率遷移行列を書き直すと,

$$M = \sum_{n=1}^L \frac{1}{4} \left[(1+\omega)(\sigma_n^x \sigma_{n+1}^x - 1) + (1-\omega)(\sigma_n^y \sigma_{n+1}^y + \sigma_n^z \sigma_{n+1}^z) - i \left\{ (p-q) + (\omega_a - \omega_d) \right\} (\sigma_n^x \sigma_{n+1}^y - \sigma_n^y \sigma_{n+1}^x) \right] - \frac{1}{2}(\omega_a - \omega_d) \sum_{n=1}^L \sigma_n^z$$

となる。ただし, $\omega := \omega_a + \omega_d$ とおいた。ここで, $p+q=1$ としても一般性を失わない。スピン演算子 σ_n^α は, 第 n セルにパウリ行列として作用し, その他の空間には恒等演算子として作用するものとする。これは, “有限磁場下の非エルミート XYZ スピン鎖ハミルトニアン” とみなすことができる。このままでは厳密に解くことは難しいので, 本稿では以下パラメータを特殊化し, 可解にした場合のみを考察する。

3.3 可解な模型の構成

ここでは簡単のために, 左右のホッピングが対称 ($p=q$) かつ吸脱着レートが等しい ($\omega_a = \omega_d$) 場合を考える。このとき確率遷移行列は

$$M = \sum_{n=1}^L \frac{1}{4} \left[(1+\omega)(\sigma_n^x \sigma_{n+1}^x - 1) + (1-\omega)(\sigma_n^y \sigma_{n+1}^y + \sigma_n^z \sigma_{n+1}^z) \right] \quad (13)$$

と書き直される。ここで, スピン空間の回転を表すユニタリ変換

$$\mathcal{H} = -U^{-1} M U, \quad U = 2^{-L/2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}^{\otimes L} \quad (14)$$

を施してやると,

$$\mathcal{H} = \sum_{n=1}^L \frac{1}{4} \left[(\omega-1)(\sigma_n^x \sigma_{n+1}^x + \sigma_n^y \sigma_{n+1}^y) - (\omega+1)(\sigma_n^z \sigma_{n+1}^z - 1) \right] \quad (15)$$

を得る。ここで, $-(\omega+1) < 0$ かつ $\left| \frac{\omega+1}{\omega-1} \right| > 1$ に注意すると, これは“強”磁性 XXZ スピン鎖になっていることが分かる。この場合, ここでは詳細は省くが, ベーテ仮設で可解であり, ベーテ仮設方程式を解くことによって固有値と固有ベクトルが厳密に構成できる。

3.4 定常状態と緩和時間

最後に, この模型の定常状態と緩和時間を厳密に解析し, 本稿を締めくくる。

まず, 強磁性スピン鎖なので, 全てのスピンのそろった状態 $|\uparrow\uparrow\cdots\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\cdots\downarrow\rangle$ が基底状態になっていることがすぐに分かる。2重に縮退しているのは, 2粒子まとめた吸脱着のみを考えているので, 粒子数が奇数の部分空間と偶数の部分空間に分かれるためである。これにユニタリ変換を施して元の基底で表示してやれば, 全ての状態が等確率で混じり合った状態が定常状態となることが分かる。

次に, 緩和時間を厳密に求める。磁性体の理論でよく知られているように, 強磁性体の低励起状態は, スピン波励起と呼ばれる波数 $k = 2\pi\ell/L$ ($\ell = 0, 1, \dots, L-1$) の平面波の重ね合わせ状態になる:

$$|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{n=1}^L e^{ikn} \sigma_n^- |\uparrow\uparrow\cdots\uparrow\rangle, \quad (16)$$

エネルギー固有値は $(\omega-1) \cos k + (\omega+1)$ となる。前述のように緩和時間は第一励起エネルギー $\Delta E = 2 \min(\omega, 1)$ を使って, $\tau = (\Delta E)^{-1}$ と厳密に求まる。通常の ASEP の場合と違って, 指数的に急速に定常状態に緩和することが分かる。

4 まとめ

本稿では, まず確率過程模型における量子力学的定式化の手法について解説を行った。続けて, ベーテ仮設で可解な模型として2粒子吸脱着つきの ASEP を提案し, 定常状態と緩和時間を厳密に求めた。非対称なレートの場合への拡張, 境界条件が開放端の場合への拡張, 具体的な物理量のダイナミクスの解析, などは応用上の観点からも重要な今後の課題である。

参考文献

- [1] R.A. Blythe, M.R. Evans, J. Phys. A: Math. Theor. 40 R333 (2007).
- [2] O. Golinelli, K. Mallick, J. Phys. A: Math. Gen. 39 12679 (2006).
- [3] A. Parmegianni, T. Franosh, E. Frey, Phys. Rev. Lett. 90 086601 (2003).
- [4] T. Ezaki, K. Nishinari, J. Phys. A: Math. Theor. 45 185002 (2012).