

2012年度 修士論文

戸田格子型相互作用を持つブラウン運動模型の
数値シミュレーション

Monte Carlo simulations of Brownian motion models
with Toda-lattice interactions

中央大学大学院 理工学研究科
博士課程前期課程 物理学専攻
多田 紘樹

目次

第 1 章	非衝突ブラウン運動	1
1.1	漸化式	2
1.2	シューア関数	5
第 2 章	ASEP	9
2.1	定常状態	11
2.2	粒子の出入りがある有限系の定常状態	13
2.3	行列の方法	15
第 3 章	戸田格子型モデル	17
3.1	モンテカルロシミュレーションの手順	17
3.2	時空図	19
3.3	交叉・非交叉相転移	20
3.4	比熱	20
3.5	繰り込みを用いたクラスターの構造解析	21
第 4 章	初期配置の変更	29
第 5 章	付録	33
5.1	粒子密度	33
5.2	2点相関関数	34
5.3	粒子の流れ	34

目 次

1.1	非交叉ランダムウォークの軌跡の例 . $N = 6, t = 6$ の場合	3
2.1	粒子の出入りのある ASEP	13
2.2	ASEP の時間発展の様子	14
3.1	粒子配列の例 . は粒子を表わす	18
3.2	粒子移動の例	18
3.3	$T=0.01$ (低温)	19
3.4	$T=1.0$	19
3.5	$T=100$ (高温)	19
3.6	$T=0.01$ (低温)	19
3.7	$T=1.0$	19
3.8	$T=100$ (高温)	19
3.9	相図	20
3.10	比熱	21
3.11	比熱	21
3.12	繰り込みの例	22
3.13	繰り込み前	22
3.14	繰り込み後	22
3.15	クラスター同士の間隔	23
3.16	クラスター数	23
3.17	1 クラスターあたりの粒子数	23
3.18	最大クラスター	23
3.19	クラスター同士の間隔	24
3.20	クラスター数	24
3.21	1 クラスターあたりの粒子数	24
3.22	最大クラスター	24
3.23	$ (\rho - \rho_c)/\rho_c $ と $ K - K_c $ の関係	24
3.24	交叉回数	25
3.25	クラスター同士の間隔	25
3.26	クラスター数	25
3.27	1 クラスターあたりの粒子数	25

3.28	最大クラスター	25
3.29	交叉回数	26
3.30	クラスター数	26
3.31	相関	26
3.32	クラスターのサイズ分布	27
4.1	T=0.01(低温)	29
4.2	T=1.0	29
4.3	T=100(高温)	29
4.4	T=0.01(低温)	29
4.5	T=1.0	29
4.6	T=100(高温)	29
4.7	T=0.01(低温)	31
4.8	T=1.0	31
4.9	T=100(高温)	31
4.10	T=0.01(低温)	31
4.11	T=1.0	31
4.12	T=100(高温)	31

第1章 非衝突ブラウン運動

まずは、互いに独立に乱歩している N 個の粒子から成る系を考えることにする。1次元格子 $Z = \{\dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots\}$ 上に N 粒子がある。初期時刻 $t = 0$ では、粒子は間隔 2 の等間隔で規則正しく並んでいたが、その後は各時間ステップでそれぞれ独立に右または左にランダムに移動する。時刻 t での i 番目の粒子の位置を $x_i(t)$ と書くことにすると、以上の設定は、 $i = 1, 2, \dots, N$ として

$$\begin{aligned} x_i(0) &= 2(i-1), \\ x_i(t+1) &= \begin{cases} x_i(t) - 1 & \text{確率 } 1/2, \\ x_i(t) + 1 & \text{確率 } 1/2, \end{cases} \quad t = 0, 1, 2, \dots \end{aligned}$$

と書き表わせる。 i 番目の粒子が、時刻 t までに左移動した回数を L_i とすると、右移動した回数は $R_i = t - L_i$ である。よって粒子の到達位置は、 $x_i(t) = x_i(0) + (R_i - L_i) = 2(i-1) + (t - 2L_i)$ となる。つまり粒子数 N と時間間隔 t を固定すると左移動回数のベクトル $\mathbf{L} = (L_1, L_2, \dots, L_N)$ は、 N 粒子系の時刻 t での終配置を一意的に決める。この指定された終配置に到達するような粒子のランダムウォーク全体の集合を $\Omega(N, t, \mathbf{L})$ と書くことにする。すると、この集合の元の数、すなわちランダムウォークのパターンの総数は

$$|\Omega(N, t, \mathbf{L})| \equiv N_{N,t}^0(\mathbf{L}) = \prod_{i=1}^N \binom{t}{L_i} \quad (1.1)$$

である。終配置 \mathbf{L} すべてについての和をとれば、 $\sum_{\mathbf{L}} N_{N,t}^0(\mathbf{L}) = 2^{Nt}$ となる。

ところが、各粒子が離れている間は互いに何もしないが、同じ場所に 2 粒子が到達（衝突）すると両者とも消滅してしまうとする。これを vicious walker 模型と呼ぶ。このモデルにおいても、時刻 t までの間に一度も粒子の衝突がなければ、粒子数 N は保存される。それでは、非衝突条件

$$x_1(\tau) < x_2(\tau) < \dots < x_N(\tau) \quad \tau = 1, 2, 3, \dots, t \quad (1.2)$$

はどのような確率で成り立つのであろうか。

問題は、

$$t \geq L_1 \geq L_2 \geq \dots \geq L_N \geq 0 \quad (1.3)$$

を満たす N 次元ベクトル $\mathbf{L} = (L_1, L_2, \dots, L_N)$ に対して、非衝突条件 (1.2) を満たすランダムウォークの集合

$$\Omega(N, t, \mathbf{L} : \text{非衝突}) = \{\omega \in \Omega(N, t, \mathbf{L}) : \text{非衝突条件 (1.2) を満たす}\}$$

を定め、その元の数、すなわち非衝突ランダムウォークのパターンの総数

$$N_{N,t}(\mathbf{L}) = |\Omega(N, t, \mathbf{L} : \text{非衝突})| = \sum_{\omega \in \Omega(N, t, \mathbf{L} : \text{非衝突})} 1 \quad (1.4)$$

を求めることである。そして、取り得る終配置 (1.3) についての和

$$N_{N,t} = \sum_{\mathbf{L}: t \geq L_1 \geq L_2 \geq \dots \geq L_N \geq 0} N_{N,t}(\mathbf{L}) \quad (1.5)$$

を計算することができれば、時間 t の間はぶつからない確率 $P_{N,t} = N_{N,t}/2^{Nt}$ が得られる。

1.1 漸化式

非衝突条件 (1.2) を満たす N 粒子のランダムウォークの軌跡を時空平面上に描いたとする。その図で $k = 1, 2, \dots, N$ に対してそれぞれ k 番目の粒子の軌跡を左に $2(k-1)$ だけ平行移動させると、図 1.1 のような軌跡の図が得られる。いくつかの軌跡が重なり合っても良いが、非交叉である。 $0 \leq \tau \leq t$ とすると時刻 τ では、粒子は $-\tau, -\tau+2, \dots, \tau-2, \tau$ の $\tau+1$ 個の位置のいずれかに到達する。このうち、右から左へ $i = 0, 1, 2, \dots$ と数えて i 番目の位置を (τ, i) -サイトと呼ぶことにする。時間間隔 $[0, t]$ の間に、粒子が到達することがあり得るサイトは、図 1.1 のような三角形の領域 V を成す。この領域 V 内の各サイトに対して、

$$\begin{aligned} n_i(\tau) &= (\tau, i) \text{ - サイトに到達した粒子の総数} \\ m_i(\tau) &= \sum_{j=i}^{\tau} n_j(\tau) \\ &= \text{時刻 } \tau \text{ で } (\tau, i) \text{ - サイトを含めてこれより左のサイトに} \\ &\quad \text{到達した粒子の総数} \end{aligned} \quad (1.6)$$

と書くことにする。各時刻で粒子数 N は保存されているので、 $m_0(\tau) = N$ である。また、領域 V 内の最近接サイト対を結んだ線分をエッジと呼ぶことにする。各エッジ上を通過する粒子の軌跡の総数を、エッジ上の流れとし、

$$f_{i,j}(\tau) \equiv (\tau-1, i) \text{ - サイトと } (\tau, j) \text{ - サイトを結ぶエッジ上の流れ}$$

と定義する。これらの定義より、サイト上の粒子数とエッジ上の流れについて次の関係式が成り立つことがすぐにわかる（ただし $f_{-1,0}(\tau) \equiv 0$ ）。

$$f_{i,i}(\tau) + f_{i,i+1}(\tau) = n_i(\tau-1), \quad f_{i,i}(\tau) + f_{i-1,i}(\tau) = n_i(\tau).$$

この関係式は次と等価である（ただし、 $m_\tau(\tau-1) \equiv 0$ ）。

$$f_{i,i}(\tau) = m_i(\tau-1) - m_{i+1}(\tau), \quad f_{i-1,i}(\tau) = m_i(\tau) - m_i(\tau-1). \quad (1.7)$$

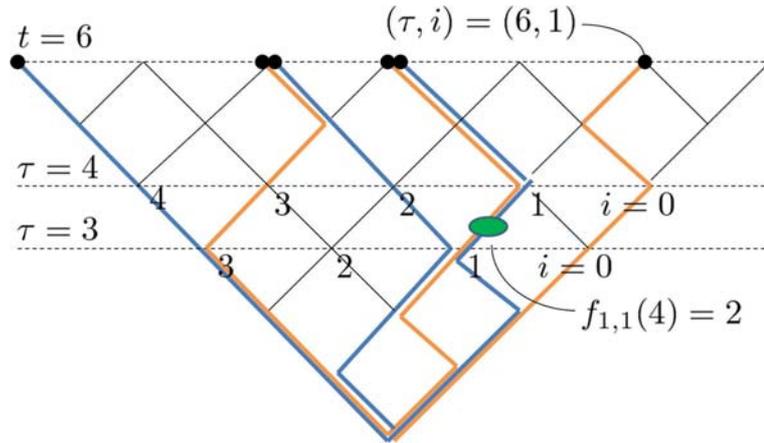


図 1.1: 非交叉ランダムウォークの軌跡の例 . $N = 6, t = 6$ の場合

流れ $f_{i,j}(\tau)$ は非負なので ,

$$m_{i+1}(\tau) \leq m_i(\tau - 1) \leq m_i(\tau) \tag{1.8}$$

でなければならない .

ベクトルの L の各成分は , 粒子が時間 t の間に左移動した回数を表わしていた . したがって , L の成分のうちで i 以上の値を持つ成分の個数は , 時間 t の間に左移動を i 回以上行った粒子の総数である . 時間 t の間に左移動を i 回以上すれば , 時刻 t では (t, i) -サイトかそれよりも左のサイトに到達するはずだから , この数は $m_i(t)$ に他ならない . $m_i(t)$ を \tilde{L}_i と書くことにすると , 以上の考察から関係式

$$\tilde{L}_i = \sum_{j=i}^t |\{k : L_k = j\}|$$

によって N 次元ベクトル L と t 次元ベクトル $\tilde{L} = (\tilde{L}_1, \tilde{L}_2, \dots, \tilde{L}_t)$ とは 1 対 1 に対応することが結論される . また , ベクトル \tilde{L} の成分は

$$N \geq \tilde{L}_1 \geq \tilde{L}_2 \geq \dots \geq \tilde{L}_t \geq 0 \tag{1.9}$$

を満たす .

以上の対応により , 前節で考えた非衝突ランダムウォークの集合 $\Omega(N, t, L : \text{非衝突})$ の代わりに \tilde{L} で終状態が指定される V 上の非交叉軌跡全体の集合 $\tilde{\Omega}(N, t, \tilde{L} : \text{非交叉})$ の元の個数を数え上げれば良いことになる . ここでは単にこの集合の元の個数を数えるだけではなく , t 個の変数 z_1, z_2, \dots, z_t を導入して , この集合で指定される t 変数関数を考えることにする . すなわち , $\omega \in \tilde{\Omega}(N, t, \tilde{L} : \text{非交叉})$, $0 \leq \tau \leq t$ に対して ,

$$l_\tau(\omega) = \text{時刻 } \tau - 1 \text{ と時刻 } \tau \text{ の間に左移動した粒子の総数}$$

として, $z = (z_1, z_2, \dots, z_t)$ の関数

$$s_{\tilde{\mathbf{L}}}(z) = \sum_{\omega \in \tilde{\Omega}(N,t, \tilde{\mathbf{L}}: \text{非交叉})} \prod_{\tau=1}^t z_{\tau}^{l_{\tau}(\omega)} \quad (1.10)$$

を考えることにするのである. これが求められれば, この関数の $z = \mathbf{1} \equiv (1, 1, \dots, 1)$ の点での値として,

$$s_{\tilde{\mathbf{L}}}(z)|_{z=\mathbf{1}} = \sum_{\omega \in \tilde{\Omega}(N,t, \tilde{\mathbf{L}}: \text{非交叉})} 1 = N_{N,t}(\mathbf{L}) \quad (1.11)$$

と言うように, $N_{N,t}(\mathbf{L})$ が定まるはずである.

ところが流れと累積粒子数との間に関係式 (1.7) より

$$\begin{aligned} l_{\tau}(\omega) &= \sum_{i=1}^{\tau} f_{i-1,i}(\tau) \\ &= \sum_{i=1}^{\tau} \{m_i(\tau) - m_i(\tau-1)\} \\ &= m_{\tau}(\tau) - m_{\tau}(\tau-1) + \sum_{i=1}^{\tau-1} \{m_i(\tau) - m_i(\tau-1)\} \\ &= m_{\tau}(\tau) + \sum_{i=1}^{\tau-1} \{m_i(\tau) - m_i(\tau-1)\} \end{aligned}$$

であるから, 関数 $s_{\tilde{\mathbf{L}}}(z)$ は $\tilde{\mathbf{L}} \equiv \tilde{\mathbf{L}}^t, \{m_1(t-1), m_2(t-1), \dots, m_{t-1}(t-1)\} \equiv \tilde{\mathbf{L}}^{t-1}$ と書き直すと, 次の関係式を満たすことになる.

$$s_{\tilde{\mathbf{L}}}(z_1, \dots, z_t) = \sum_{\substack{\tilde{\mathbf{L}}^{t-1} \\ \tilde{L}_j^t \leq \tilde{L}_j^{t-1} \leq \tilde{L}_{j+1}^t \\ 1 \leq j \leq t-1}} s_{\tilde{\mathbf{L}}^{t-1}}(z_1, \dots, z_{t-1}) z_t^{\tilde{L}_t^t + \sum_{i=1}^{t-1} (\tilde{L}_i^t - \tilde{L}_i^{t-1})} \quad (1.12)$$

ただし, 右辺の和における成分間の制限は, (1.8) に由来したものである. この関係式を, t についての漸化式 (1 階の差分方程式) と見なして,

$$s_{\tilde{\mathbf{L}}}(z_1) = z_1^{\tilde{L}_1^1} \quad (1.13)$$

の初期条件の下に解きたい.

1.2 シューア関数

成分が $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_t$ であるようなベクトル $\lambda = (\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_t)$ に対して,

$$a_{\lambda+\delta}(z) = \det_{1 \leq i, j \leq t} (z_j^{\lambda_i+t-i}) = \begin{bmatrix} z_1^{\lambda_1+t-1} & z_2^{\lambda_1+t-1} & \dots & z_t^{\lambda_1+t-1} \\ z_1^{\lambda_2+t-2} & z_2^{\lambda_2+t-2} & \dots & z_t^{\lambda_2+t-2} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ z_1^{\lambda_t} & z_2^{\lambda_t} & \dots & z_t^{\lambda_t} \end{bmatrix} \quad (1.14)$$

とする．特に $\lambda = 0 \equiv (0, 0, \dots, 0)$ のときは, ヴァンデルモンド行列式

$$a_{\delta}(z) = \det_{1 \leq i, j \leq t} (z_j^{t-i}) = \begin{bmatrix} z_1^{t-1} & z_2^{t-1} & \dots & z_t^{t-1} \\ z_1^{t-2} & z_2^{t-2} & \dots & z_t^{t-2} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ z_1 & z_2 & \dots & z_t \\ 1 & 1 & \dots & 1 \end{bmatrix} = \prod_{1 \leq i < j \leq t} (z_i - z_j) \quad (1.15)$$

である． $\lambda \neq 0$ の場合でも, $z_i = z_j$ とすると (1.14) の第 i 列と第 j 列とが等しくなってしまう行列式は零になることから, $a_{\lambda+\delta}(z)$ は, 任意の $1 \leq i < j \leq t$ に対して $z_i - z_j$ の因子を持つことが分かる．つまり, $a_{\lambda+\delta}(z)$ はヴァンデルモンド行列式で割り切れるので,

$$\widehat{s}_{\lambda}(z) = \frac{a_{\lambda+\delta}(z)}{a_{\delta}(z)} \quad (1.16)$$

は z_1, z_2, \dots, z_t の多項式であることが分かる．さらに定義 (1.16) より直ちに, $\widehat{s}_{\lambda}(z)$ は z_1, z_2, \dots, z_t の斉次多項式であり, その次数は $|\lambda| = \sum_{i=1}^t \lambda_i$ であることも分かる．

実は, $\lambda = \widetilde{L}^t$ に対するこの斉次多項式 $\widehat{s}_{\lambda}(z)$ こそが, 前節の漸化式の解である．このことは, $\widehat{s}_{\widetilde{L}^t}(z)$ が実際に漸化式 (1.12) を満たし, かつ初期条件 (1.13) を満たすことから, 1階の差分方程式の解の一意性により結論される．以下にその証明を与える．

まず, $z_t = 1$ とおき, 分母と分子の行列式それぞれにおいて, 1列目から $t-1$ 列目までの各列から t 列を引く

$$\widehat{s}_{\lambda}(z_1, \dots, z_{t-1}, 1) = \frac{\begin{bmatrix} z_1^{\lambda_1+t-1} - 1 & z_2^{\lambda_1+t-1} - 1 & \dots & 1 \\ z_1^{\lambda_2+t-2} - 1 & z_2^{\lambda_2+t-2} - 1 & \dots & 1 \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ z_1^{\lambda_t} - 1 & z_2^{\lambda_t} - 1 & \dots & 1 \end{bmatrix}}{\begin{bmatrix} z_1^{t-1} - 1 & z_2^{t-1} - 1 & \dots & 1 \\ z_1^{t-2} - 1 & z_2^{t-2} - 1 & \dots & 1 \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ z_1 - 1 & z_2 - 1 & \dots & 1 \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix}}$$

ここで

$$z_i^a - 1 = (z_i - 1)(z_i^{a-1} + z_i^{a-2} + \cdots + z_i + 1) \quad (1.17)$$

を用いると

$$\begin{aligned}
& \begin{bmatrix} (z_1 - 1)(z_1^{\lambda_1+t-2} + z_1^{\lambda_1+t-3} + \cdots + z_1 + 1) & (z_2 - 1)(z_2^{\lambda_1+t-2} + z_2^{\lambda_1+t-3} + \cdots + z_2 + 1) & \cdots & 1 \\ (z_1 - 1)(z_1^{\lambda_2+t-3} + z_1^{\lambda_2+t-4} + \cdots + z_1 + 1) & (z_2 - 1)(z_2^{\lambda_2+t-3} + z_2^{\lambda_2+t-4} + \cdots + z_2 + 1) & \cdots & 1 \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ (z_1 - 1)(z_1^{\lambda_t-1} + z_1^{\lambda_t-2} + \cdots + z_1 + 1) & (z_2 - 1)(z_2^{\lambda_t-1} + z_2^{\lambda_t-2} + \cdots + z_2 + 1) & \cdots & 1 \end{bmatrix} \\
= & \frac{\begin{bmatrix} (z_1 - 1)(z_1^{t-2} + z_1^{t-3} + \cdots + z_1 + 1) & (z_2 - 1)(z_2^{t-2} + z_2^{t-3} + \cdots + z_2 + 1) & \cdots & 1 \\ (z_1 - 1)(z_1^{t-3} + z_1^{t-4} + \cdots + z_1 + 1) & (z_2 - 1)(z_2^{t-3} + z_2^{t-4} + \cdots + z_2 + 1) & \cdots & 1 \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ & z_1 - 1 & & z_2 - 1 & \cdots & 1 \\ & 0 & & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix}}{\prod_{i=1}^{t-1} (z_i - 1) \begin{bmatrix} z_1^{\lambda_1+t-2} + z_1^{\lambda_1+t-3} + \cdots + z_1 + 1 & z_2^{\lambda_1+t-2} + z_2^{\lambda_1+t-3} + \cdots + z_2 + 1 & \cdots & 1 \\ z_1^{\lambda_2+t-3} + z_1^{\lambda_2+t-4} + \cdots + z_1 + 1 & z_2^{\lambda_2+t-3} + z_2^{\lambda_2+t-4} + \cdots + z_2 + 1 & \cdots & 1 \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ z_1^{\lambda_t-1} + z_1^{\lambda_t-2} + \cdots + z_1 + 1 & z_2^{\lambda_t-1} + z_2^{\lambda_t-2} + \cdots + z_2 + 1 & \cdots & 1 \end{bmatrix}} \\
= & \prod_{i=1}^{t-1} (z_i - 1) \begin{bmatrix} z_1^{t-2} + z_1^{t-3} + \cdots + z_1 + 1 & z_2^{t-2} + z_2^{t-3} + \cdots + z_2 + 1 & \cdots & 1 \\ z_1^{t-3} + z_1^{t-4} + \cdots + z_1 + 1 & z_2^{t-3} + z_2^{t-4} + \cdots + z_2 + 1 & \cdots & 1 \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ & 1 & & 1 & \cdots & 1 \\ & 0 & & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix}
\end{aligned}$$

次に $i = 2, 3, \dots, t$ に対して順次 i 行を $i - 1$ 行から引く. $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_t$ であったので,

$$\begin{aligned}
& \begin{bmatrix} z_1^{\lambda_1+t-2} + z_1^{\lambda_1+t-3} + \cdots + z_1^{\lambda_2+t-2} & z_2^{\lambda_1+t-2} + z_2^{\lambda_1+t-3} + \cdots + z_2^{\lambda_2+t-2} & \cdots & 0 \\ z_1^{\lambda_2+t-3} + z_1^{\lambda_2+t-4} + \cdots + z_1^{\lambda_3+t-3} & z_2^{\lambda_2+t-3} + z_2^{\lambda_2+t-4} + \cdots + z_2^{\lambda_3+t-3} & \cdots & 0 \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ z_1^{\lambda_t-1} + z_1^{\lambda_t-2} + \cdots + z_1 + 1 & z_2^{\lambda_t-1} + z_2^{\lambda_t-2} + \cdots + z_2 + 1 & \cdots & 1 \end{bmatrix} \\
= & \frac{\begin{bmatrix} z_1^{t-2} & z_2^{t-2} & \cdots & 0 \\ z_1^{t-3} & z_2^{t-3} & \cdots & 0 \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix}}{\prod_{i=1}^{t-1} (z_i - 1) \begin{bmatrix} z_1^{\lambda_1+t-2} + z_1^{\lambda_1+t-3} + \cdots + z_1 + 1 & z_2^{\lambda_1+t-2} + z_2^{\lambda_1+t-3} + \cdots + z_2 + 1 & \cdots & 1 \\ z_1^{\lambda_2+t-3} + z_1^{\lambda_2+t-4} + \cdots + z_1 + 1 & z_2^{\lambda_2+t-3} + z_2^{\lambda_2+t-4} + \cdots + z_2 + 1 & \cdots & 1 \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ z_1^{\lambda_t-1} + z_1^{\lambda_t-2} + \cdots + z_1 + 1 & z_2^{\lambda_t-1} + z_2^{\lambda_t-2} + \cdots + z_2 + 1 & \cdots & 1 \end{bmatrix}}
\end{aligned}$$

ここで分子の1行1列成分は,

$$\begin{aligned}
z_1^{\lambda_1+t-2} + z_1^{\lambda_1+t-3} + \cdots + z_1^{\lambda_2+t-2} &= z_1^{\lambda_1+(t-1)-1} + z_1^{\lambda_1-1+(t-1)-1} + \cdots + z_1^{\lambda_2+(t-1)-1} \\
&= \sum_{\lambda_1 \geq \mu_1 \geq \lambda_2} z_1^{\mu_1+(t-1)-1}
\end{aligned}$$

同様にすべての成分について考えていくと

$$\begin{aligned} \widehat{s}_\lambda(z_1, \dots, z_{t-1}, 1) &= \frac{\sum_{\substack{\lambda_1 \geq \mu_1 \geq \lambda_2, \dots, \\ \lambda_{t-1} \geq \mu_{t-1} \geq \lambda_t}} \begin{bmatrix} z_1^{\mu_1+(t-1)-1} & z_2^{\mu_1+(t-1)-1} & \dots & z_{t-1}^{\mu_1+(t-1)-1} \\ z_1^{\mu_2+(t-1)-2} & z_2^{\mu_2+(t-1)-2} & \dots & z_{t-1}^{\mu_2+(t-1)-2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ z_1^{\mu_{t-1}-1} & z_2^{\mu_{t-1}-1} & \dots & z_{t-1}^{\mu_{t-1}-1} \end{bmatrix}}{\det_{1 \leq i, j \leq (t-1)} (z_j^{(t-1)-i})} \\ &= \frac{\sum_{\substack{\lambda_1 \geq \mu_1 \geq \lambda_2, \dots, \\ \lambda_{t-1} \geq \mu_{t-1} \geq \lambda_t}} \det_{1 \leq i, j \leq (t-1)} (z_j^{\mu_i+(t-1)-i})}{\det_{1 \leq i, j \leq (t-1)} (z_j^{(t-1)-i})} \end{aligned} \quad (1.18)$$

よって

$$\widehat{s}_\lambda(z_1, \dots, z_{t-1}, 1) = \sum_{\mu: \lambda_i \geq \mu_i \geq \lambda_{i+1}, 1 \leq i \leq t-1} \widehat{s}_\mu(z_1, \dots, z_{t-1}) \quad (1.19)$$

これは z_1, z_2, \dots, z_{t-1} の $|\mu| = \sum_{i=1}^{t-1} \mu_i$ 次の斉次多項式であるから z_t を $|\lambda| - |\mu| = \sum_{i=1}^t \lambda_i - \sum_{i=1}^{t-1} \mu_i = \lambda_t + \sum_{i=1}^{t-1} (\lambda_i - \mu_i)$ 乗したものをかければ, z_1, z_2, \dots, z_t の $|\lambda|$ 次の斉次多項式になる.

$$\widehat{s}_\lambda(z_1, \dots, z_{t-1}, z_t) = \sum_{\mu: \lambda_i \geq \mu_i \geq \lambda_{i+1}, 1 \leq i \leq t-1} \widehat{s}_\mu(z_1, \dots, z_{t-1}) z_t^{|\lambda| - |\mu|} \quad (1.20)$$

これは (1.12) で $\widetilde{L}^t = \lambda, \widetilde{L}^{t-1} = \mu$ としたものである. また $\lambda = (\lambda_1, 0, 0, \dots)$ に対しては $\widehat{s}_\lambda(z_1) = z_1^{\lambda_1}$ である.

以上より, (1.10) に対して

$$s_{\widetilde{L}}(z) = \frac{\det_{1 \leq i, j \leq t} (z_j^{\widetilde{L}_i+t-i})}{\det_{1 \leq i, j \leq t} (z_j^{t-i})} \quad (1.21)$$

が得られる. これは t 変数 z_1, \dots, z_t の任意の置換に対して不変であり, シューア関数と呼ばれている.

さて, (1.11) に従って $z = 1$ とすると $N_{N,L}(L)$ が求まるはずだが, 表式 (1.21) で $z = 1$ とすると, 分母と分子の行列式がともに零になって不定形になってしまう.

そこでまず, 列を $1, 2, \dots, t$ から $t, t-1, \dots, 1$ に入れ替える.

$$\begin{aligned} \det_{1 \leq i, j \leq t} (z_j^{t-i}) &= (-1)^{\frac{t(t-1)}{2}} \det_{1 \leq i, j \leq t} (z_j^{t-i-j+1}) \quad (1.22) \\ \begin{bmatrix} z_1^{t-1} & z_2^{t-1} & \dots & z_{t-1}^{t-1} & z_t^{t-1} \\ z_1^{t-2} & z_2^{t-2} & \dots & z_{t-1}^{t-2} & z_t^{t-2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 1 & 1 & \dots & 1 & 1 \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} z_t^{t-1} & z_{t-1}^{t-1} & \dots & z_2^{t-1} & z_1^{t-1} \\ z_t^{t-2} & z_{t-1}^{t-2} & \dots & z_2^{t-2} & z_1^{t-2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 1 & 1 & \dots & 1 & 1 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

同様にして

$$\det_{1 \leq i, j \leq t} (z_j^{\tilde{L}_i + t - i}) = (-1)^{\frac{t(t-1)}{2}} \det_{1 \leq i, j \leq t} (z_{t-j+1}^{\tilde{L}_i + t - i}) \quad (1.23)$$

ここで $z_j = q^{j-1}$ とすると (1.22), (1.23) は

$$(-1)^{\frac{t(t-1)}{2}} \det_{1 \leq i, j \leq t} (q^{t-j})^{t-i} \quad (1.24)$$

$$(-1)^{\frac{t(t-1)}{2}} \det_{1 \leq i, j \leq t} (q^{t-i})^{\tilde{L}_j + t - j} \quad (1.25)$$

となる．これらを (1.21) に代入すると

$$s_{\tilde{\mathbf{L}}}(1, q, q^2, \dots, q^{t-1}) = \frac{\det_{1 \leq i, j \leq t} (q^{t-i})^{\tilde{L}_j + t - j}}{\det_{1 \leq i, j \leq t} (q^{t-j})^{t-i}} \quad (1.26)$$

ヴァンデルモンドの行列式の公式を用いると

$$\begin{aligned} & \prod_{1 \leq i < j \leq t} (q^{\tilde{L}_i + t - i} - q^{\tilde{L}_j + t - j}) \\ &= \frac{\prod_{1 \leq i < j \leq t} (q^{\tilde{L}_i + t - i} - q^{\tilde{L}_j + t - j})}{\prod_{1 \leq i < j \leq t} (q^{t-i} - q^{t-j})} \\ &= \frac{\prod_{1 \leq i < j \leq t} q^{\tilde{L}_j + t - j} \prod_{1 \leq i < j \leq t} (q^{\tilde{L}_i - \tilde{L}_j + j - i} - 1)}{\prod_{1 \leq i < j \leq t} q^{t-j} \prod_{1 \leq i < j \leq t} (q^{j-i} - 1)} \\ &= \frac{q^{\sum_{j=1}^t (j-1)(\tilde{L}_j + t - j)}}{q^{\sum_{j=1}^t (j-1)(t-j)}} \prod_{1 \leq i < j \leq t} \frac{q^{\tilde{L}_i - \tilde{L}_j + j - i} - 1}{q^{j-i} - 1} \\ &= q^{\sum_{j=1}^t (j-1)\lambda_j} \prod_{1 \leq i < j \leq t} \frac{q^{\tilde{L}_i - \tilde{L}_j + j - i} - 1}{q^{j-i} - 1} \end{aligned} \quad (1.27)$$

と変形できるので，ロピタルの定理を用いると

$$N_{N,t}(\mathbf{L}) = \lim_{q \rightarrow 1} s_{\tilde{\mathbf{L}}}(1, q, q^2, \dots, q^{t-1}) = \prod_{1 \leq i < j \leq t} \frac{\tilde{L}_i - \tilde{L}_j + j - i}{j - i} \quad (1.28)$$

第2章 ASEP

1次元格子に、非対称な hop をするランダムウォーカーが沢山いる模型を考える。粒子間には体積排除の相互作用が働いているとする。すなわち、ある粒子が hop しようとした際に、行き先のサイトがすでに別の粒子によって埋まっていた場合はその hop は起こらないとする。このようなモデルを asymmetric simple exclusion process (非対称単純排除過程) を略して ASEP という。特に各粒子の左右の hopping rate が等しい ($p_R = p_L$) 場合は symmetric simple exclusion process (SSEP) と呼び、 $p_R = p_L = 1$ とおくことにする。また粒子が右 (または左) の一方向にしか hop しない場合は totally asymmetric simple exclusion process (TASEP) と呼ぶ。

さて上で述べたモデルの定義をもう少し具体的に記述する。無限に長い1次元格子に粒子が有限個 (N 個とする) だけある場合を考え、時刻 t でサイト x_1, x_2, \dots, x_N (ただし $x_1 < x_2 < \dots < x_N$) に粒子がいる確率 $P(x_1, x_2, \dots, x_N; t)$ が満たす差分方程式を書き下してみる。

まず粒子が2個だけある場合を考えてみると、時刻 t でサイト x_1 と x_2 (ただし $x_1 < x_2$) に粒子がいる確率 $P(x_1, x_2; t)$ が満たす微分差分方程式は、 $x_2 - x_1 \geq 2$ のときは

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}P(x_1, x_2; t) &= p_R P(x_1 - 1, x_2; t) + p_L P(x_1 + 1, x_2; t) + p_R P(x_1, x_2 - 1; t) \\ &\quad + p_L P(x_1, x_2 + 1; t) - 2(p_R + p_L)P(x_1, x_2; t) \end{aligned} \quad (2.1)$$

$x_2 = x_1 + 1$ のときは

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}P(x_1, x_1 + 1; t) &= p_R P(x_1 - 1, x_1 + 1; t) + p_L P(x_1, x_1 + 2; t) \\ &\quad - (p_R + p_L)P(x_1, x_1 + 1; t) \end{aligned} \quad (2.2)$$

となる。

より一般に N 粒子の場合は

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}P(x_1, x_2, \dots, x_N; t) &= \sum_{j=1}^N [p_R P(x_1, \dots, x_j - 1, \dots, x_N; t) + p_L P(x_1, \dots, x_j + 1, \dots, x_N; t) \\ &\quad - (p_R + p_L)P(x_1, \dots, x_N; t)] \end{aligned} \quad (2.3)$$

であり、 $x_{j+1} - x_j = 1$ となる j がある場合にはそれに応じて変更しなくてはならない。

さらに上で得られた N 粒子系に対する微分差分方程式が、虚時間の Schrödinger 方程式の形をしていることに注意すると、対応する“Hamiltonian” H があって、ASEP の時間発展は

$$\frac{d}{dt}|P(t)\rangle = -H|P(t)\rangle \quad (2.4)$$

という形に表されることがわかる．ここで H は遷移率行列， $|P(t)\rangle$ は確率密度を表すベクトルである．

さらに， H や $|P(t)\rangle$ が住んでいる空間は，各サイトに粒子がいるかないかで指定することができるので，スピン $\frac{1}{2}$ 演算子を用いて記述することができる．各サイトにおいてスピン $\frac{1}{2}$ 演算子

$$s^x = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad s^y = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad s^z = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (2.5)$$

を定義する．これらは $su(2)$ 代数

$$[s^x, s^y] = is^z, \quad [s^y, s^z] = is^x, \quad [s^z, s^x] = is^y \quad (2.6)$$

を満たす．これは，

$$s^+ = s^x + is^y = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (2.7)$$

$$s^- = s^x - is^y = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (2.8)$$

を定義すれば

$$[s^z, s^+] = s^+, \quad [s^z, s^-] = -s^-, \quad [s^+, s^-] = 2s^z \quad (2.9)$$

とも書ける．

各サイトにおいて，粒子がいないことを s^+ ，粒子がいることを s^- ，1つも粒子がいない配置を $|\Omega\rangle$ と書くことにすると粒子が x_1, x_2, \dots, x_N にいる配置は

$$s_{x_1}^- s_{x_2}^- \cdots s_{x_N}^- |\Omega\rangle \quad (2.10)$$

と書くことができる．

すると (2.4) で現れた $|P(t)\rangle$ は1粒子のときは

$$|P(t)\rangle = \sum_x P(x; t) s_x^- |\Omega\rangle \quad (2.11)$$

2粒子のときは

$$|P(t)\rangle = \sum_{x_1 < x_2} P(x_1, x_2; t) s_{x_1}^- s_{x_2}^- |\Omega\rangle \quad (2.12)$$

N 粒子のときは

$$|P(t)\rangle = \sum_{x_1 < x_2 < \dots < x_N} P(x_1, x_2, \dots, x_N; t) s_{x_1}^- s_{x_2}^- \dots s_{x_N}^- |\Omega\rangle \quad (2.13)$$

である．また H は ASEP における遷移率行列で

$$\begin{aligned} H_{\text{ASEP}} &= \sum_j \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & p_L & -p_R & 0 \\ 0 & -p_L & p_R & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}_{j,j+1} \\ &= - \sum_j \left[p_R s_j^+ s_{j+1}^- + p_L s_j^- s_{j+1}^+ + (p_R + p_L) s_j^z s_{j+1}^z \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} (p_R - p_L) (s_j^z - s_{j+1}^z) - \frac{p_R + p_L}{4} \right] \end{aligned} \quad (2.14)$$

と与えられる．ただしここで添え字 $j, j+1$ は，この行列が j 番目と $j+1$ 番目のサイトのみ作用することを表している．

さて今後は左右への hopping rate の比 p_L/p_R を q と書くことにし，また時間を rescale することにより $p_R = 1$ とおく．すると上の H_{ASEP} は

$$H_{\text{ASEP}} = \sum_j h_{j,j+1}, \quad h = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & q & -1 & 0 \\ 0 & -q & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (2.15)$$

となる．

2.1 定常状態

格子数が有限の場合，系が取りうる配置の数も有限になり，系は指数関数的に定常状態に近づく．さらに周期境界や左右で粒子の出入りの無い境界条件を取った場合は，粒子数が保存するので各粒子毎に唯一の定常状態がある．遷移率行列 H は closed の場合

$$H_{\text{ASEP}}^{(\text{closed})} = \sum_{j=1}^{L-1} h_{j,j+1} \quad (2.16)$$

である．この場合は右に粒子がつかまっているような定常状態が得られることが予想される．この場合の定常状態がどのように記述されるかは自明ではないが，実は closed ASEP は $U_q(sl_2)$ と呼ばれる対称性を持ち， N 粒子系の定常状態はその対称性から得ることができる [1]．

まず,

$$e = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad f = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad k = \begin{bmatrix} q^{1/2} & 0 \\ 0 & q^{-1/2} \end{bmatrix} \quad (2.17)$$

と定義すると, これらは

$$[e, f] = \frac{k - k^{-1}}{q^{1/2} - q^{-1/2}}, \quad ke = qek, \quad kf = q^{-1}fk \quad (2.18)$$

の代数関係を満たす. この代数を $U_q(sl_2)$ 代数と呼ぶ. この代数は $q \rightarrow 1$ の極限で通常の $sl(2)$ 代数になる.

$q \rightarrow 0$ の極限を取りやすくするために

$$e = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad f = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad g = q^{1/2}k^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & q \end{bmatrix}, \quad \tilde{g} = q^{1/2}k = \begin{bmatrix} q & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (2.19)$$

で考えることにする. これらは

$$[e, f] = \frac{g - \tilde{g}}{1 - q}, \quad eg = qge, \quad fg = q^{-1}gf, \quad e\tilde{g} = q^{-1}\tilde{g}e, \quad f\tilde{g} = q\tilde{g}f \quad (2.20)$$

の代数関係を満たす.

さらに L サイトある場合は

$$E = e_1 + g_1e_1 + \cdots + g_1 \cdots g_{L-1}e_L \quad (2.21)$$

$$F = f_1\tilde{g}_2 \cdots \tilde{g}_L + f_2\tilde{g}_3 \cdots \tilde{g}_L + \cdots + f_{L-1}\tilde{g}_L + f_L \quad (2.22)$$

$$G = g_1 \cdots g_L, \quad \tilde{G} = \tilde{g}_1 \cdots \tilde{g}_L \quad (2.23)$$

と置くとこれらは e, f, g, \tilde{g} を満たし, さらに H と可換であることがわかる. つまり closed ASEP は $U_q(sl_2)$ 対称性を持つ.

closed ASEP の定常状態が

$$|P\rangle = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \otimes \cdots \otimes \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \quad (2.24)$$

の形に書けるとする. するともし

$$h \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = 0 \quad (2.25)$$

つまり $yx = qxy$ なら (2.15) より $H_{\text{ASEP}}^{(\text{closed})}|P\rangle = 0$ となる.

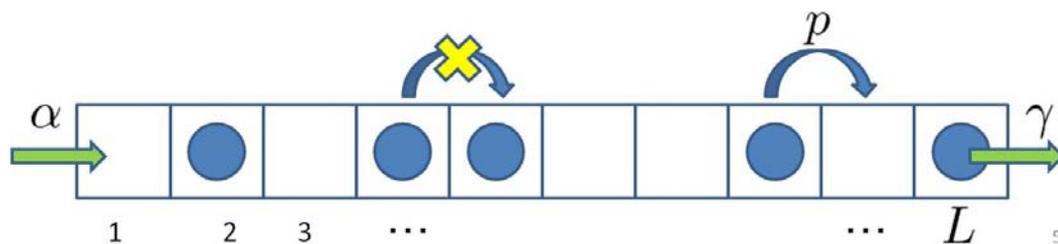


図 2.1: 粒子の出入りのある ASEP

2.2 粒子の出入りがある有限系の定常状態

系の長さは L とし, 系の左の境界では rate α で粒子が入り, 右の境界では rate γ で出て行くものとする.

この場合, 遷移率行列 H は,

$$H_{\text{ASEP}}^{(\text{open})} = h_1^{(L)} + \sum_{j=1}^{L-1} h_{j,j+1} + h_L^{(R)} \quad (2.26)$$

ただし

$$h^{(L)} = \begin{bmatrix} \alpha & 0 \\ -\alpha & 0 \end{bmatrix}, \quad h^{(R)} = \begin{bmatrix} 0 & -\gamma \\ 0 & \gamma \end{bmatrix} \quad (2.27)$$

で与えられる.

$q = 0$ としてモンテカルロシミュレーションを行ってみると 図 2.2 のような図が得られる.

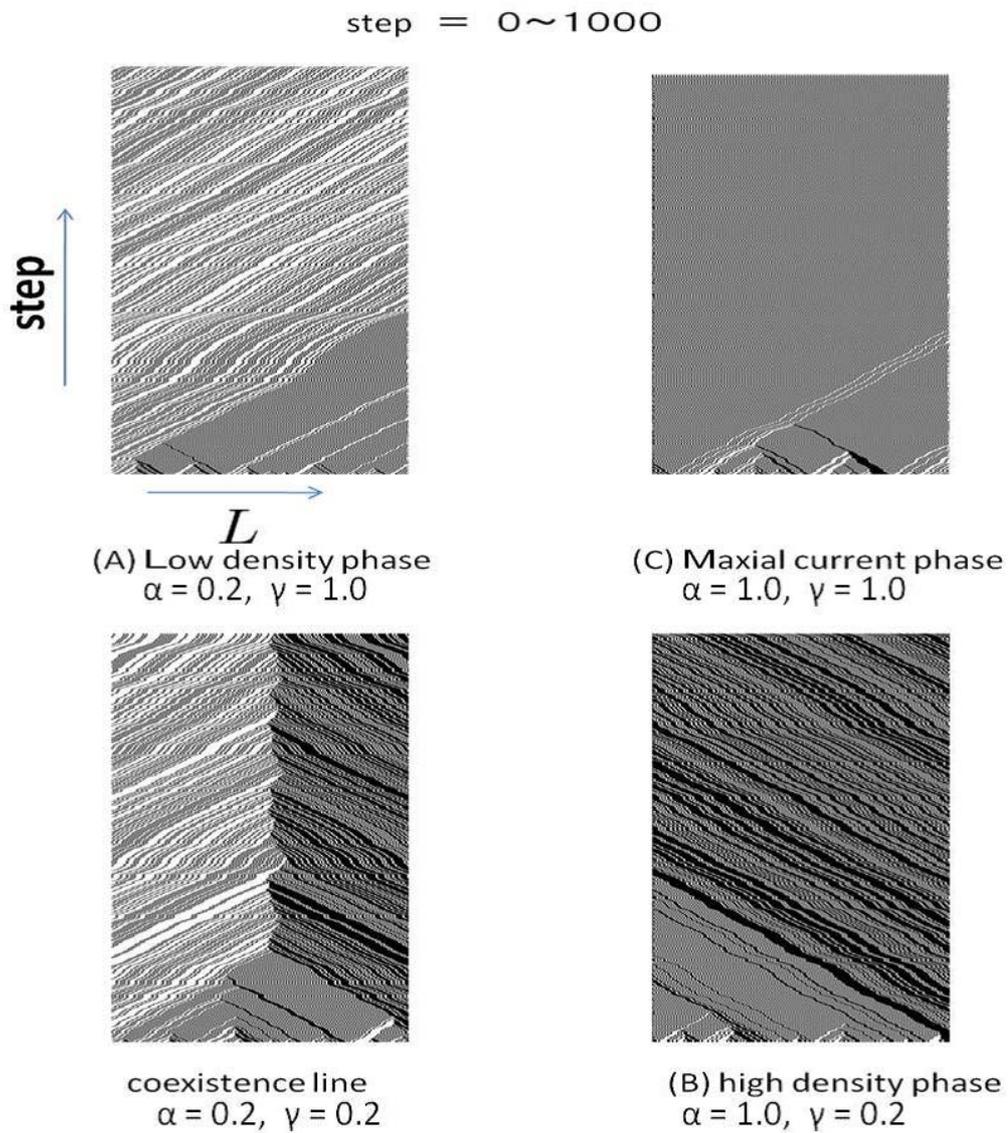


図 2.2: ASEP の時間発展の様子

横軸は空間，縦軸は時間であり，粒子のいるサイトを黒で，粒子のいないサイトを白で示した．格子の長さは $L = 200$ とした．境界パラメータ α, γ の値を変えることによって系の性質が著しく変わっている様子が見て取れる．

2.3 行列の方法

この模型の定常状態は，行列の方法と呼ばれる方法を用いて厳密に求めることができる [2] . closed の場合の代数的な方法をヒントにして，定常状態が

$$|P\rangle\rangle = \frac{1}{Z_L} \langle W| \left(\begin{array}{c} E \\ D \end{array} \right) \otimes \left(\begin{array}{c} E \\ D \end{array} \right) \otimes \cdots \otimes \left(\begin{array}{c} E \\ D \end{array} \right) |V\rangle \quad (2.28)$$

の形に与えられるとしてみよう．ここで D, E はある空間の正方行列， $\langle W|, |V\rangle$ は同じ空間の行ベクトルと列ベクトルである．混乱を避けるために確率密度のベクトルは 2 重ケットで表した．また Z_L は規格化定数で，

$$Z_L = \langle W|C^L|V\rangle \quad (2.29)$$

ただし

$$C = D + E \quad (2.30)$$

で与えられる．(2.28) は，成分で書けば $\tau_j = 0, 1$ (サイト j に粒子がない，又はいるに対応) として

$$P(\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_L) = \frac{1}{Z_L} \langle W| \prod_{j=1}^L (\tau_j D + (1 - \tau_j) E) |V\rangle \quad (2.31)$$

とも書ける．すると，もし ζ を定数として $D, E, \langle W|, |V\rangle$ が

$$h \left(\begin{array}{c} E \\ D \end{array} \right) \otimes \left(\begin{array}{c} E \\ D \end{array} \right) = \zeta \left\{ \left(\begin{array}{c} \bar{E} \\ \bar{D} \end{array} \right) \otimes \left(\begin{array}{c} E \\ D \end{array} \right) - \left(\begin{array}{c} E \\ D \end{array} \right) \otimes \left(\begin{array}{c} \bar{E} \\ \bar{D} \end{array} \right) \right\} \quad (2.32)$$

$$\langle W|h^{(L)} \left(\begin{array}{c} E \\ D \end{array} \right) = -\zeta \langle W| \left(\begin{array}{c} \bar{E} \\ \bar{D} \end{array} \right), \quad h^{(R)} \left(\begin{array}{c} E \\ D \end{array} \right) |V\rangle = \zeta \left(\begin{array}{c} \bar{E} \\ \bar{D} \end{array} \right) |V\rangle \quad (2.33)$$

を満たせば $H|P\rangle\rangle = 0$ が満たされることがわかる． $\bar{E} = -1, \bar{D} = 1$ と置けばこの条件は

$$DE - qED = \zeta(D + E) \quad (2.34)$$

$$\alpha \langle W|E = \zeta \langle W|, \quad \beta D|V\rangle = \zeta|V\rangle \quad (2.35)$$

と書き直せる．以下この代数関係を満たす行列を構成し，定常状態の性質を調べる．上で $\bar{D} = -\bar{E} = 1$ と置いたのは，ASEP の場合は (2.34)，(2.35) を満たす行列が実際に存在し，それを使えば定常状態を表していることがわかるからである．以下 ζ は規格化定数にしか効かないので以下 $\zeta = 1 - q$ と置く．

行列の言葉では，定常状態における物理量は次のように表される．

- 粒子の流れ J_L

$$J_L = (1 - q) \frac{\langle W|C^{L-1}|V\rangle}{\langle W|C^L|V\rangle} = (1 - q) \frac{Z_{L-1}}{Z_L} \quad (2.36)$$

- 粒子密度 $\langle n_j \rangle_L$

$$\langle n_j \rangle_L = \frac{\langle W | C^{j-1} D C^{L-j} | V \rangle}{\langle W | C^L | V \rangle} \quad (2.37)$$

- 2点関数 $\langle n_j n_k \rangle_L$

$$\langle n_j n_k \rangle_L = \frac{\langle W | C^{j-1} D C^{k-j-1} D C^{L-k} | V \rangle}{\langle W | C^L | V \rangle} \quad (2.38)$$

次のような notation を用意する .

$$\tilde{\alpha} = \frac{\alpha}{1-q}, \quad \tilde{\beta} = \frac{\beta}{1-q} \quad (2.39)$$

$$a = \frac{1-\tilde{\alpha}}{\tilde{\alpha}}, \quad b = \frac{1-\tilde{\beta}}{\tilde{\beta}} \quad (2.40)$$

$$c_n = (1-q^n)(1-abq^{n-1}) \quad (2.41)$$

すると

$$D = 1 + \begin{bmatrix} b & \sqrt{c_1} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & bq & \sqrt{c_2} & 0 & \\ 0 & 0 & bq^2 & \sqrt{c_3} & \\ \vdots & & & & \ddots \end{bmatrix}, \quad (2.42)$$

$$E = 1 + \begin{bmatrix} a & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{c_1} & aq & 0 & 0 & \\ 0 & \sqrt{c_2} & aq^2 & 0 & \\ \vdots & & & & \ddots \end{bmatrix}, \quad (2.43)$$

$$\langle W | = \langle 0 | \equiv (1 \ 0 \ 0 \ \cdots), \quad |V\rangle = |0\rangle \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (2.44)$$

と置くとこれらが代数関係 (2.34),(2.35) を満たしていることがわかる .

さてここで , 規格化定数の計算に現れる行列 $C = D + E$ が

$$C = 2 + \begin{bmatrix} a+b & \sqrt{c_1} & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{c_1} & (a+b)q & \sqrt{c_2} & 0 & \\ 0 & \sqrt{c_2} & (a+b)q^2 & \sqrt{c_3} & \\ 0 & 0 & \sqrt{c_3} & (a+b)q^3 & \\ \vdots & & & & \ddots \end{bmatrix} \quad (2.45)$$

という実対称 3 重対角行列であるということに注意する .

第3章 戸田格子型モデル

先の非衝突ブラウン運動や ASEP では、どちらも粒子の交叉がない排他的な粒子の運動を考えていた。本論文ではより一般的に粒子の交叉が許されるモデルを考えたい。そこで私は非線形波動からヒントを得て、粒子間の相互作用に戸田格子ポテンシャルを導入した。

戸田格子 (Toda-lattice) とは、戸田盛和によって 1967 年に導入された。戸田格子ポテンシャルは

$$V = \sum_{j=1}^{N-1} e^{-(x_{j+1}-x_j)/a} \quad (a > 0) \quad (3.1)$$

と書かれ、指数関数型ポテンシャルで、ソリトン解を持つ非線形力学系として知られている。戸田格子は古典・量子可積分系に表れるものであり、一見すると確率統計には馴染みの薄いものであるが、このポテンシャルを導入することにより、粒子の交叉が許される系を考えることができる。(3.1) より交叉がなければ、指数の肩がマイナスのままであるが、交叉があると指数の肩がプラスになり、指数関数的にポテンシャルが高くなる。さらにパラメータとして温度 T を導入した。温度が高ければ、エネルギーが高い状態も起こる。

以下ではこの戸田格子型ポテンシャルで相互作用するブラウン運動モデルを考え、数値シミュレーションによるモデルの特徴付けを行った。

3.1 モンテカルロシミュレーションの手順

1. 乱数をふり、サイト L の上に N 個の粒子をランダムに初期配置する。 $L \geq N$ とし、1つのサイトには1つの粒子しか入れないものとする。また、各粒子は $(j = 1, 2, \dots, N)$ でラベル付けされている。
2. 新たに乱数をふり、サイト L の中から最近接ペアを1つランダムに選ぶ。ただし、選ばれたペアの少なくとも片方に粒子がいなければ、ペアを選びなおす。
3. 選ばれたペアを入れ替え、他のサイトはそのままにした状態を次の「候補」とする。
4. 現在のポテンシャル V_1 と候補のポテンシャル V_2 を (3.1) から計算する。
 $(1)V_1(x_1, \dots, x_j, x_{j+1}, \dots, x_N) \geq V_2(x_1, \dots, x_{j+1}, x_j, \dots, x_N)$

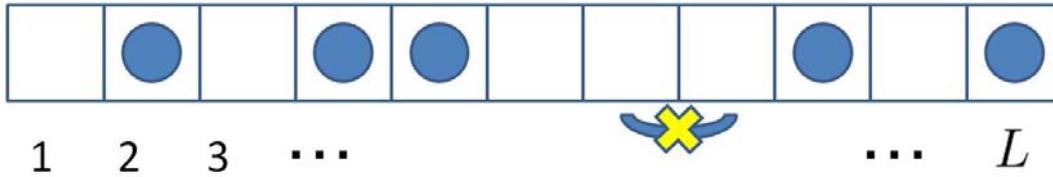


図 3.1: 粒子配列の例． は粒子を表わす．

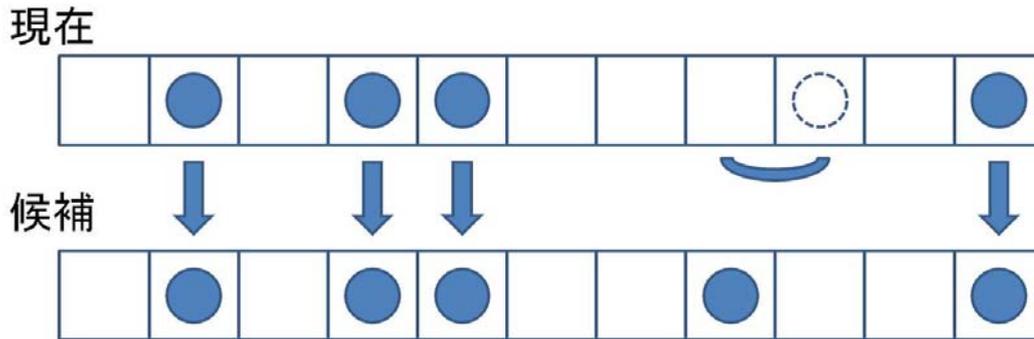


図 3.2: 粒子移動の例

現在の状態のポテンシャルより候補のポテンシャルが小さければ必ず候補を採用する．

$$(2) V_1(x_1, \dots, x_j, x_{j+1}, \dots, x_N) < V_2(x_1, \dots, x_{j+1}, x_j, \dots, x_N)$$

現在の状態のポテンシャルより候補のポテンシャルが大きければ，候補の確率と現在の状態の確率の比 q を計算し候補を採用するかいなかを決める．

詳細つり合いの条件から

$$\begin{aligned} e^{-V_1/T} p_{1 \rightarrow 2} &= e^{-V_2/T} p_{2 \rightarrow 1} \\ \Leftrightarrow e^{-(V_2 - V_1)/T} &= q \end{aligned} \quad (3.2)$$

ここで温度 T を導入した．ボルツマン定数 k_B ，逆温度 β を用いて $\beta = \frac{1}{k_B T}$ である．(本論文では $k_B = 1$ とした)

$[0,1]$ の乱数 r を生成し，

$r < q$ ならば候補を次の状態に採用する．

さもなければ，現在の状態をそのまま次の状態とする．

V_2 の方が大きい場合を考えているので， T が大きければ $q \rightarrow 1$ となり， T が小さければ $q \rightarrow 0$ となる．つまり， T が大きければ交叉した候補の状態を許しやすく， T が小さければ交叉した候補の状態を許しにくくなることが予想される．

5. 上の手続きを繰り返す．

3.2 時空図

ランダムに粒子を初期配置し前節の手続きを繰り返すことで、粒子軌跡の時間発展を観察した。シミュレーションにより得られた結果を図示した。粒子数 $N = 20$ ，サイト数 $L = 200$ とした。

初期配置 ~ 10000step

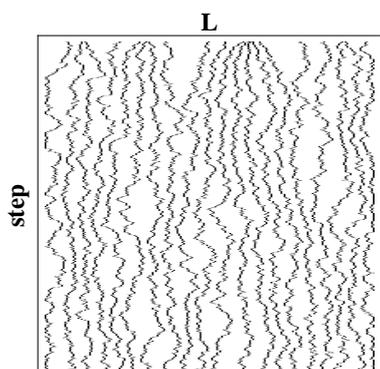


図 3.3: $T=0.01$ (低温)

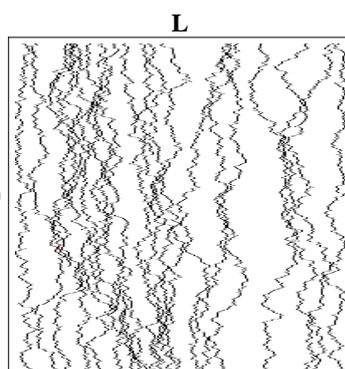


図 3.4: $T=1.0$

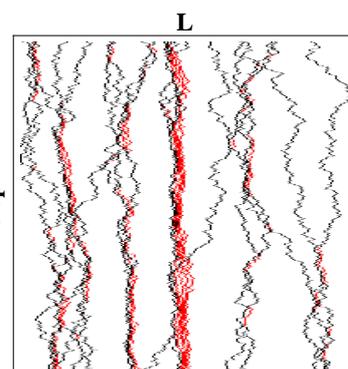


図 3.5: $T=100$ (高温)

定常状態の 10000step

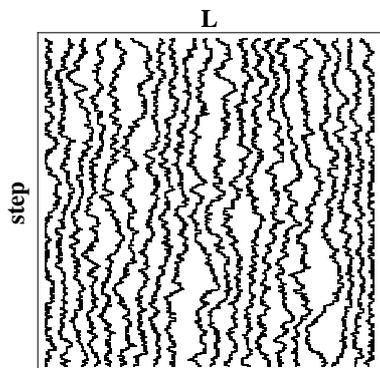


図 3.6: $T=0.01$ (低温)

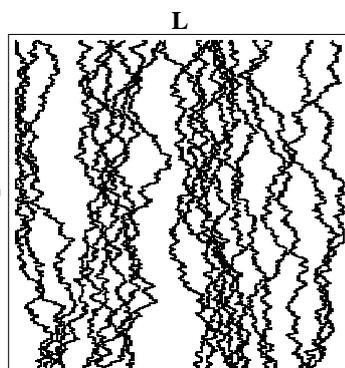


図 3.7: $T=1.0$

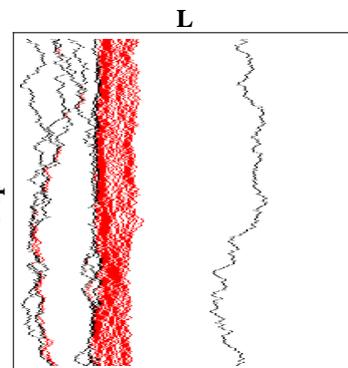


図 3.8: $T=100$ (高温)

横軸に空間，縦軸に時間を取り，時空図を示した。粒子のいるサイトを黒，粒子のいないサイトを白で表示した。交叉が発生し順序の入れ替わりのおきた粒子を赤で示した。粒子は上から下へ時間発展している。温度の低いとき (図 3.3, 3.6) では，粒子同士の間隔が等間隔になるように拡散していき，粒子は排他的に運動している様子が見られる。温度を上げると (図 3.4, 3.7) 粒子同士が接近し集まって，所々束になっている様子が見られ始めた。さらに温度を上げると (図 3.5, 3.8) 粒子は交叉を繰り返し，いくつかの束を形成する様子が見られる。定常状態では束になっている様子がより顕著に表れている。この束を以後クラスターと呼ぶことにし，クラスターが形成される様子を調べた。

3.3 交叉・非交叉相転移

温度が低いときでは交叉せず，温度が高いときでは交叉を繰り返す様子が見て取れたので，各密度 ρ に対して，温度 T を変化させて交叉回数をカウントした．各温度で 1000step を 100 回の試行を行い単位時間あたりの交叉回数を求めた．そこから各密度に対して交叉・非交叉の転移温度を求めることで，次の相図が得られた．

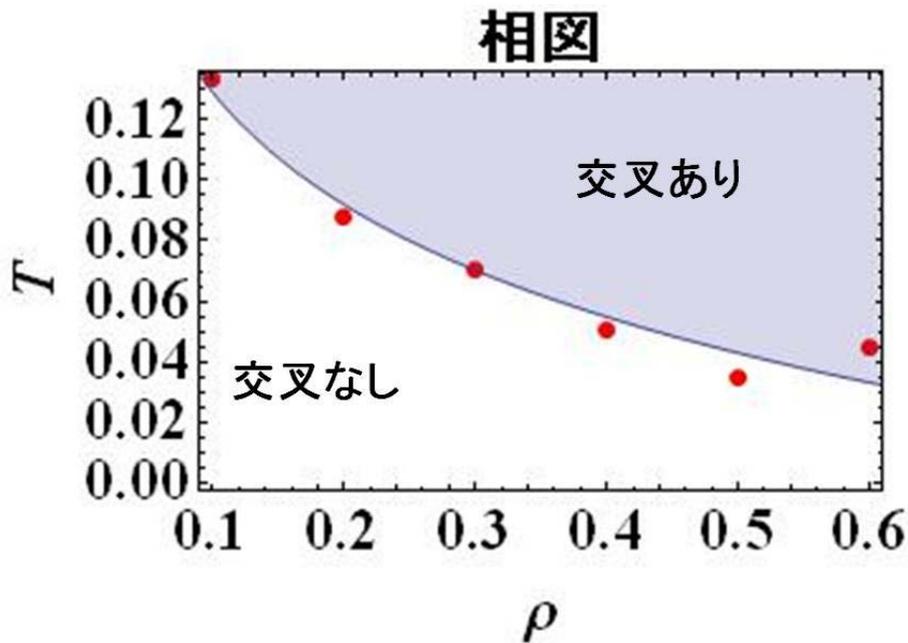


図 3.9: 相図

横軸に密度，縦軸に温度をとり，それぞれの密度における交叉・非交叉の転移温度を赤のプロットで示した．下は交叉なしの相，上の青く塗られた部分は交叉ありの相を示している．同じ密度でも温度が転移温度より低いとき，粒子は交叉せず排他的に振る舞う．転移温度より高いときは，粒子は交叉を繰り返しクラスターを形成する．

3.4 比熱

次に比熱の測定を行った．密度を一定 ($\rho = 0.3$) とし，温度を変化させたときの比熱の変化を測定した．また系のサイズを変化させ，横軸を温度，縦軸を比熱にとり，測定結果を図 3.10 に示した．

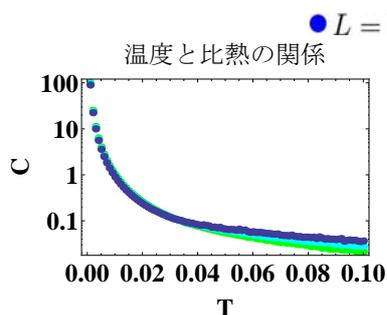


図 3.10: 比熱

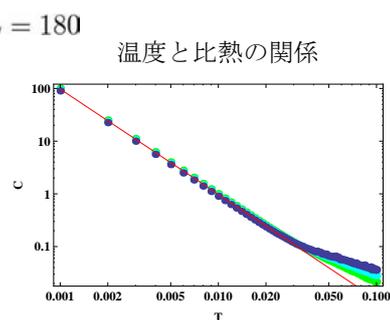


図 3.11: 比熱

温度を高くして行っても比熱に、とびやピークが見られないことから、有限温度で平衡状態の相転移はないことがわかった。これを log-log プロットしたのが図 3.11 である。赤の実線は系のサイズが無限大におけるフィッティングである。この log-log プロットから比熱はべき乗則に従い、次の臨界指数が得られた。

$$C \sim T^{-2.0} \quad (3.3)$$

さらに絶対零度で相転移が起きていると言えるだろう。

また密度を変えて測定を行うと、同様にべき乗則に従うことがわかった。すべての密度で臨界指数がほぼ 2.0 であることが得られた。

3.5 繰り込みを用いたクラスターの構造解析

密度を大きくしたり、系のサイズを大きくすると、見た目ではクラスターであるかどうかの判断ができなくなってしまった。そこで見た目ではなくクラスターを定義するため、相転移で用いられる繰り込みの方法を適用した。具体的には L サイトを 3 サイトずつ区切り、3 つのサイトをひとくくりにし、1 つのサイトとして扱う。新しい 1 つのサイトは 3 つのサイトに粒子がいるか、いないかの多数決で決める。各ステップごとに得られる粒子配列に対して繰り込みの操作を行い、1 回の繰り込みにより消えなかったものをクラスターとして定義した。パラメータ a, ρ, T を変化させたときのクラスターの構造解析を行った。繰り込み後の配列において、それぞれ単位時間あたりのクラスター同士の間隔、単位時間あたりのクラスター数、単位時間 1 クラスターあたりの粒子数、単位時間あたりの最も多くの粒子を含むクラスター（最大クラスター）を測定した。

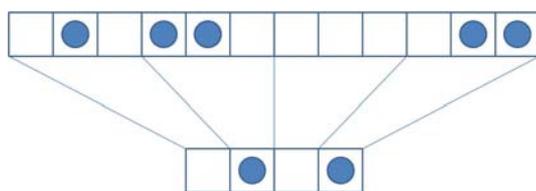


図 3.12: 繰り込みの例

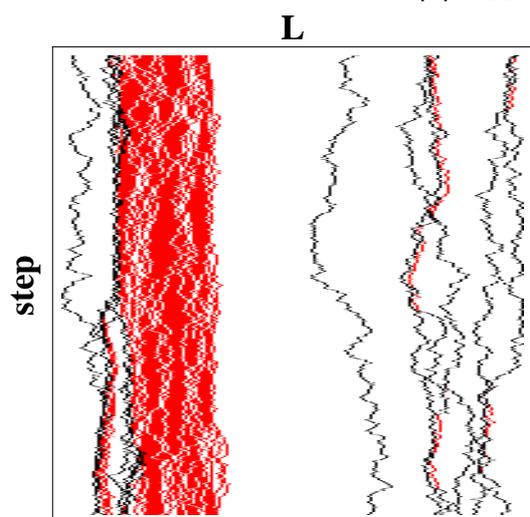


図 3.13: 繰り込み前

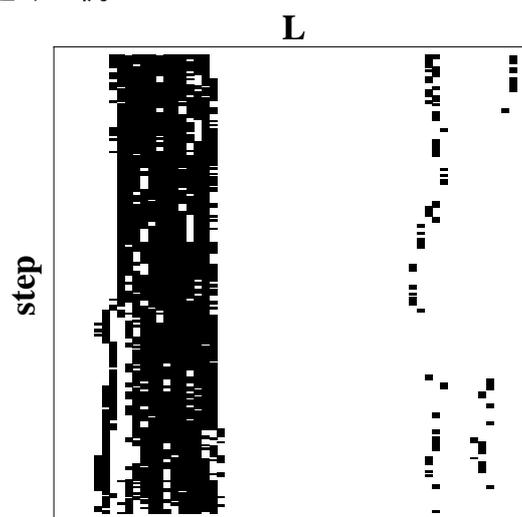


図 3.14: 繰り込み後

I.a とクラスターの関係

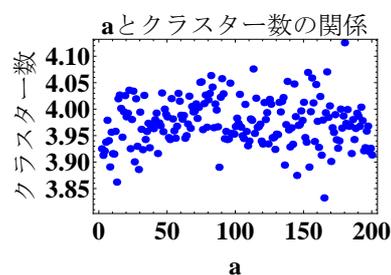
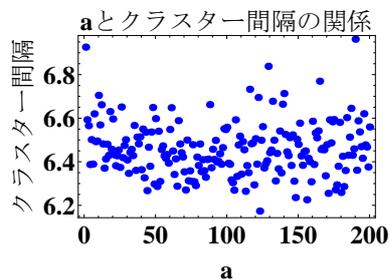


図 3.15: クラスタ同士の間隔

図 3.16: クラスタ数

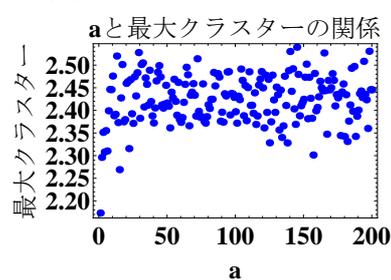
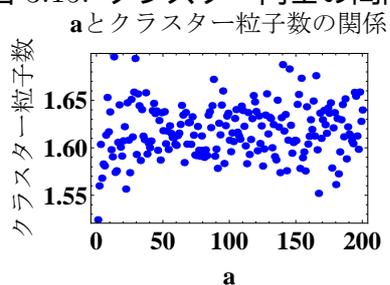


図 3.17: 1 クラスタあたりの粒子数

図 3.18: 最大クラスター

系のサイズ $L = 90$ として a の値を変化させた。横軸に a 、縦軸にそれぞれの量を取りプロットした。立ち上がりやピークなどを見られず、特徴的な量は得られなかった。

II. 密度 ρ とクラスターの関係

● $L = 90$ ● $L = 180$ ● $L = 450$

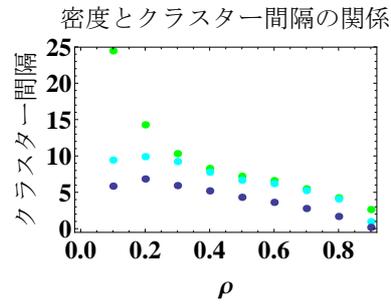


図 3.19: クラスタ同士の間隔

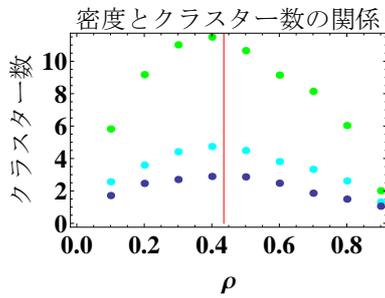


図 3.20: クラスタ数

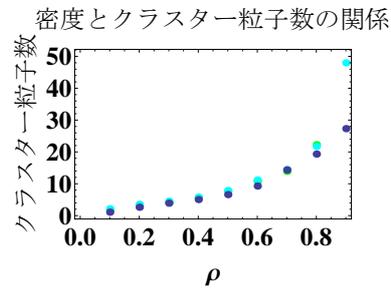


図 3.21: 1 クラスタあたりの粒子数

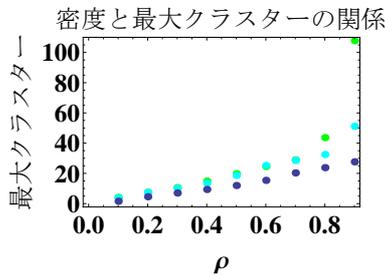


図 3.22: 最大クラスター

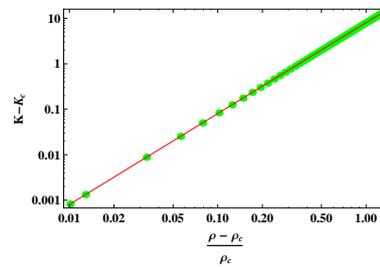


図 3.23: $|(\rho - \rho_c)/\rho_c|$ と $|K - K_c|$ の関係

各密度に対して系のサイズを変化させ測定した。横軸に密度，縦軸にそれぞれの量を取りプロットした。図 3.20 では系のサイズを大きくすると，ピークを持つ様子が見られた。クラスター数を K とし， K は $\rho_c = 0.436$ でピークの頂点に持つことが得られた。これを赤線で示した。 $L = 450$ のとき $K_c = 11.166$ であった。これより横軸を $|(\rho - \rho_c)/\rho_c|$ ，縦軸を $|K - K_c|$ にとり，log-log プロット (図 3.23) からべき乗則に従うことがわかり，次の臨界指数が得られた。

$$|K - K_c| \sim \left| \frac{\rho - \rho_c}{\rho_c} \right|^{2.0} \tag{3.4}$$

べき乗則に従うため，これは臨界指数と呼べるであろう。

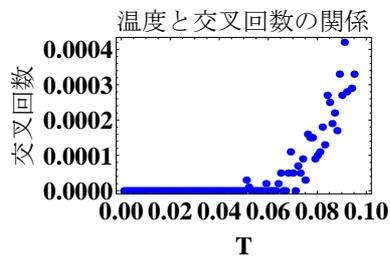
II. 温度 T とクラスターの関係

図 3.24: 交叉回数

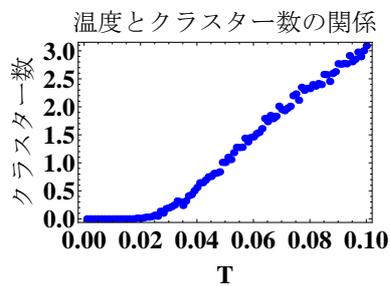


図 3.26: クラスタ数

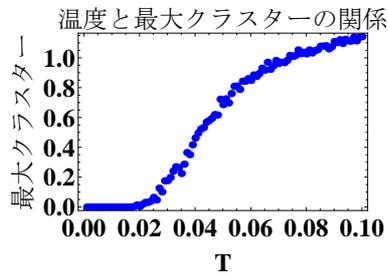


図 3.28: 最大クラスター

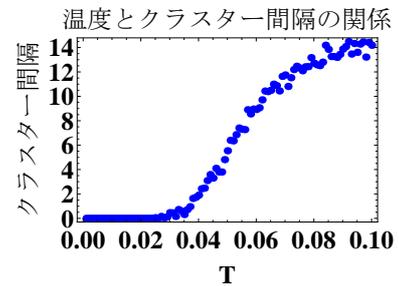


図 3.25: クラスタ同士の間隔

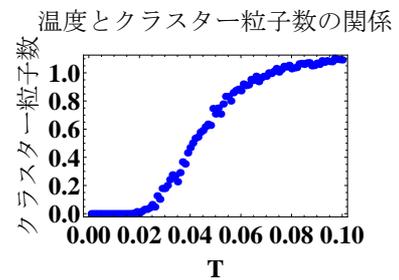


図 3.27: 1 クラスタあたりの粒子数

密度 $\rho = 0.3$ として温度 T を変化させた．横軸に温度，縦軸にそれぞれの量を取りプロットした．単位時間あたりの交叉回数のグラフ (図 3.24) と単位時間あたりのクラスタ数のグラフ (図 3.26) を見比べると，立ち上がりの温度に違いが見られる．これは粒子同士が接近しクラスタを形成し，その後交叉が起きるためであると考えられる．単位時間あたりのクラスタ数のグラフからクラスタ・非クラスタの転移温度 $T_c = 0.02$ が得られた．

同様に単位時間あたりのクラスター数について密度を変化させ、測定を行った。 $\rho = 0.1$ のとき 図 3.29 であり、 $\rho = 0.2$ のとき 図 3.30 となった。

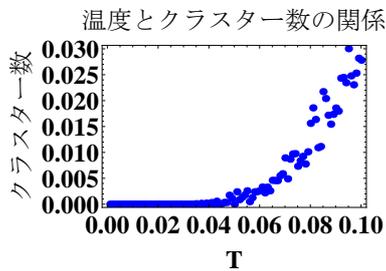


図 3.29: 交叉回数

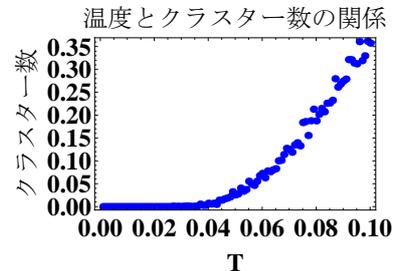


図 3.30: クラスター数

そこからクラスター・非クラスターの転移温度が得られ、得られた値をプロットすると次の相図を描くことに成功した。

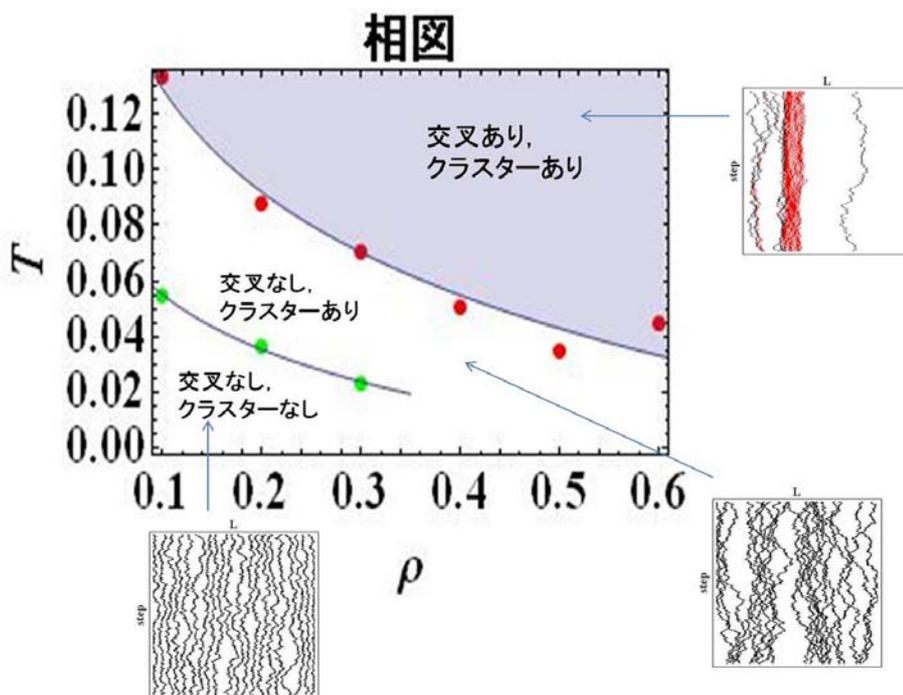


図 3.31: 相図

横軸に密度、縦軸に温度をとった。交叉・非交叉の転移温度を赤のプロットで、クラスター・非クラスターの転移温度を緑のプロットで示した。図の左下は粒子の交叉もなく、クラスターもない相。真ん中は交叉はないが、クラスターが形成される相。右上の青く塗られた部分は交叉もあり、クラスターも形成される相。このように3つの相に区別できることが得られた。

IV. クラスターのサイズ分布

密度を $\rho = 0.3$ として, クラスターサイズの分布を見た. 系のサイズは $L = 1800$ である. 横軸にクラスターサイズ s , 縦軸にサイズごとの頻度 $P(s)$ をとりプロットした. こ

クラスターサイズ分布

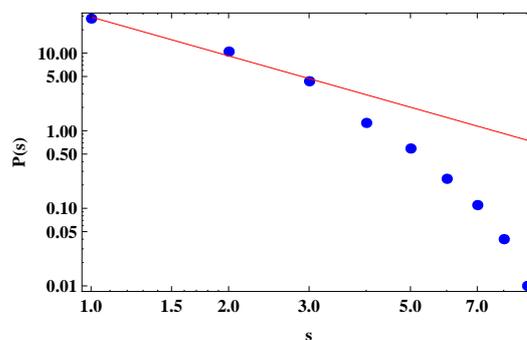


図 3.32: クラスターのサイズ分布

の log-log プロットから s に関するべき乗則が得られた.

$$P(s) \sim s^{-1.7} \quad (3.5)$$

1つの系のサイズからだけでなく複数の系のサイズからデータをとる必要があるため, この臨界指数については今後検討の余地がある.

