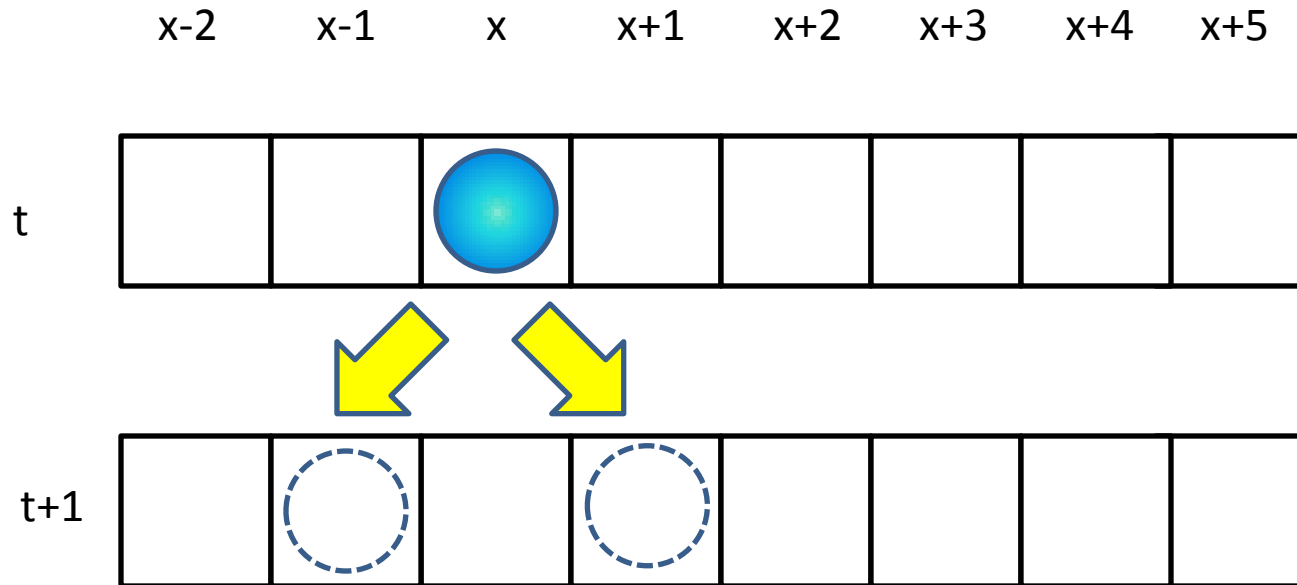


有限系ASEPの対称性

2008年1月21日

堤 健之

ランダムウォーク

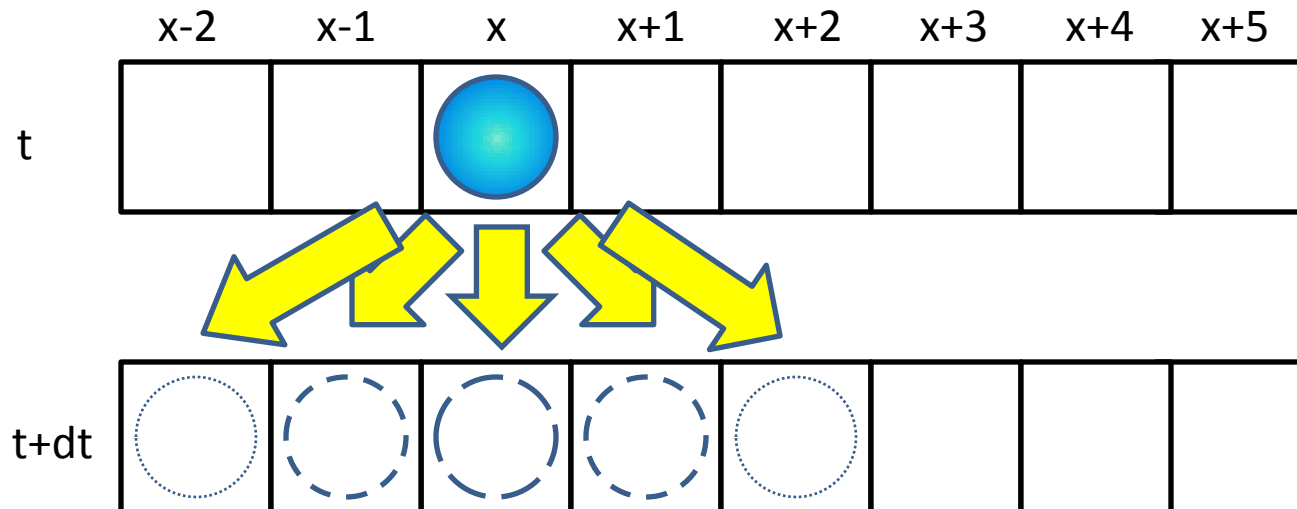


単位時間で粒子が左右のどちらかに移動(HOP)するモデル。
右への移動確率を p ,左への移動確率を q とすれば, $p+q=1$ が成り立つ。
仮に $p=q=\frac{1}{2}$ ならば、ある時刻 t にある位置 x にいる確率 $P(x,t)$ は

$$P(x,t) = \frac{1}{2^t} \binom{t}{\frac{t+x}{2}}$$

と表すことができる。

上のモデルは空間・時間ともに離散のモデルであったが、次に空間離散・時間連続の場合を考える。



微小時間 dt の間に粒子が左右にHOPするモデル。

左右への遷移率を PR, PL とすると、微小時間に左右に移動する確率は $PRdt, PLdt$ と書ける。

ただし、微小時間 dt 後に必ず移動しているとは限らないので $(PR+PL)dt=1$ とはならない。

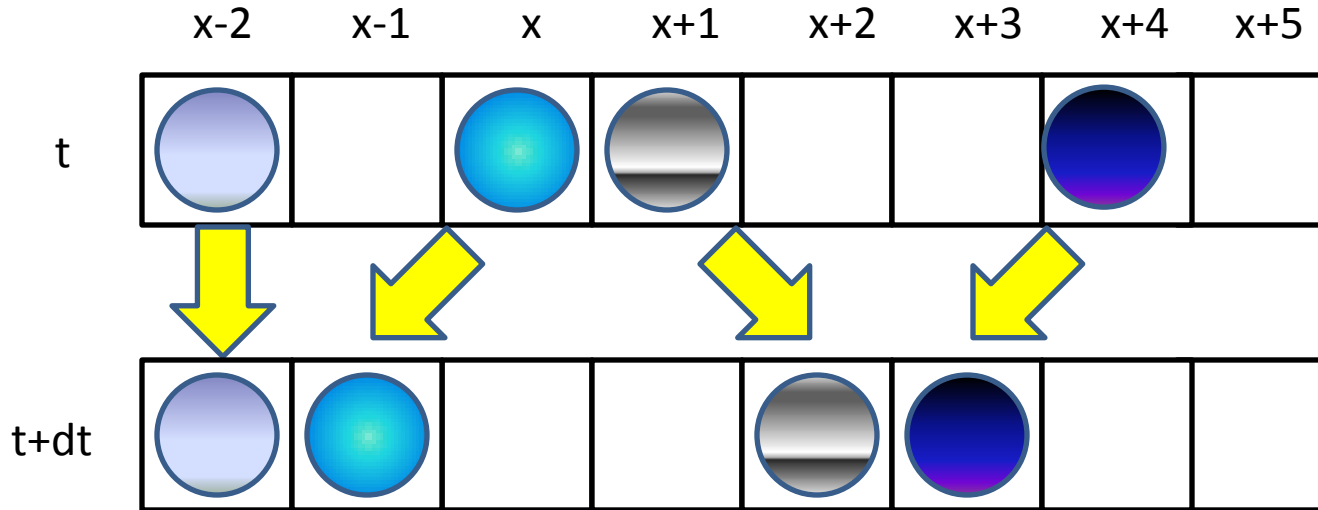
また2マス以上左右のどちらかに移動している確率は限りなく0に近い。

時刻 t に粒子がある位置 x にいる確率 $P(x,t)$ を満たす微分方程式は

$$\frac{d}{dt} P(x,t) = PR \times P(x-1,t) + PL \times P(x+1,t) - (PR+PL)P(x,t)$$

と表せる。この解はポアソン分布に従う。

ASEP



同じサイトに2つの粒子が入れないというのは、系において同じ量子状態が取れないフェルミ粒子と似ている。事実、サイトを無限とし、粒子の流れを0とすると、粒子密度はフェルミ分布と酷似する。

次に多粒子の場合を考える。

今回、「すでにある粒子が占有しているサイトには他の粒子がHOPすることができない。」という**排除体積効果**が働いている。

このようなモデルを「ASEP」と呼ぶ。

また $PR=PL$ のものを「SSEP」、 $PR=1, PL=0$ のものを「TASEP」と呼ぶ。

つまりASEPは「**ポアソン分布に従い、各々の粒子が排除体積効果を配慮し左右にHOPするモデル**」という事になる。

計算機によるシミュレーション

以下計算機によるシミュレーションでASEPの振る舞いを見る。

SITE数は有限で $L=500$ で固定する。

サイト間の壁(ボンド)を等確率で取り選び、選ばれたボンドの左右のサイトの粒子の有無を判断して、左に粒子があって右に粒子がないときのみ、確率 PR で粒子を右に移動させ、右に粒子があり左に粒子がないときのみ、確率 PL で粒子を左に移動させる。

シミュレーションでは時間は離散化されるので、時間のSTEP数を多く取る。

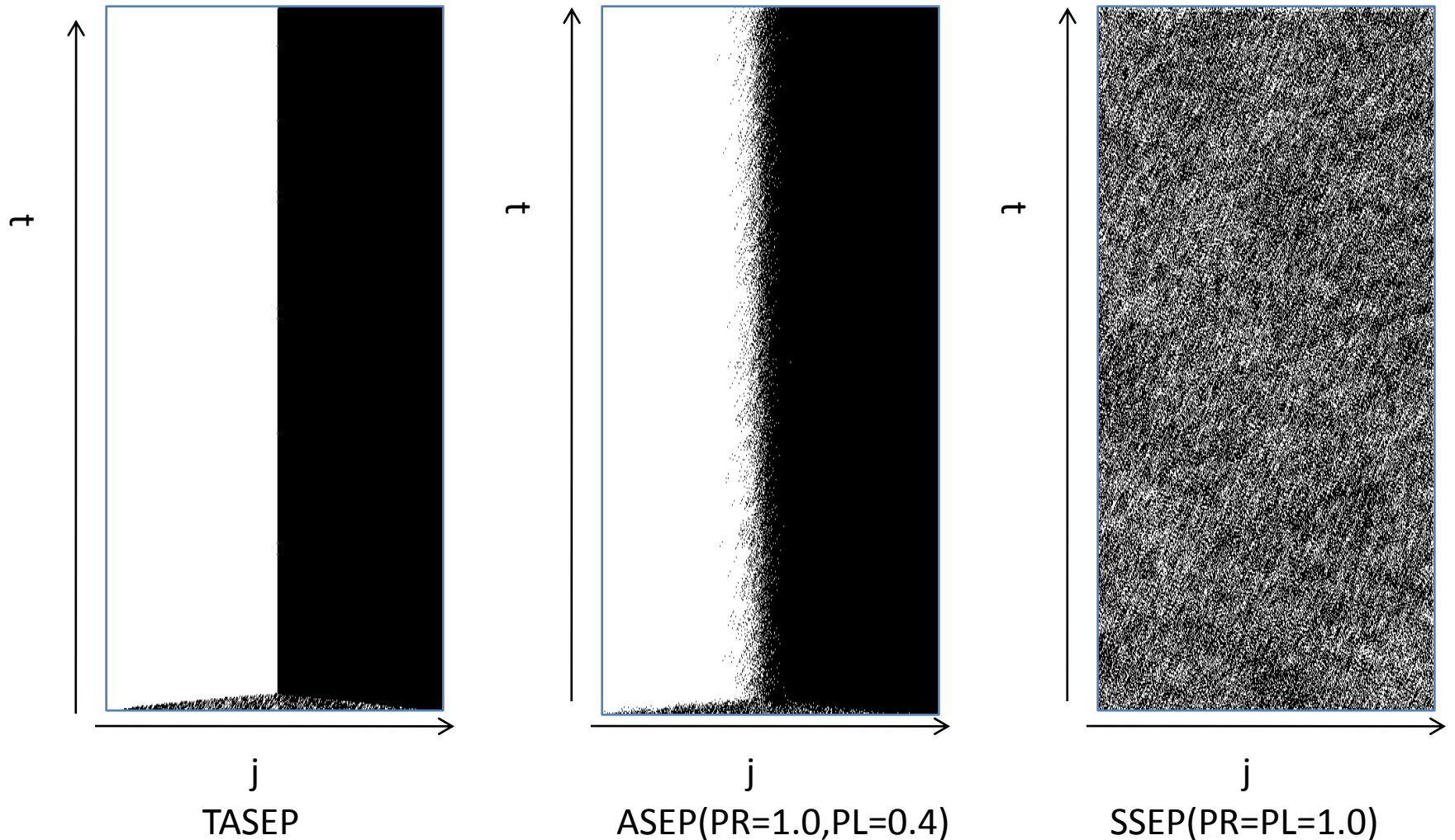
粒子がある個所を黒く、また粒子が無い個所を白くして画像表示する。

画像として表示する場合、データの関係上500行500列の行列に直すために、STEP数/500に1回分のデータしか反映されない。

縦軸を時間、横軸をサイト番号とする。

初期密度 $\rho=0.5$ とする。

出入り口の無い場合



STEP数を1000万としている。

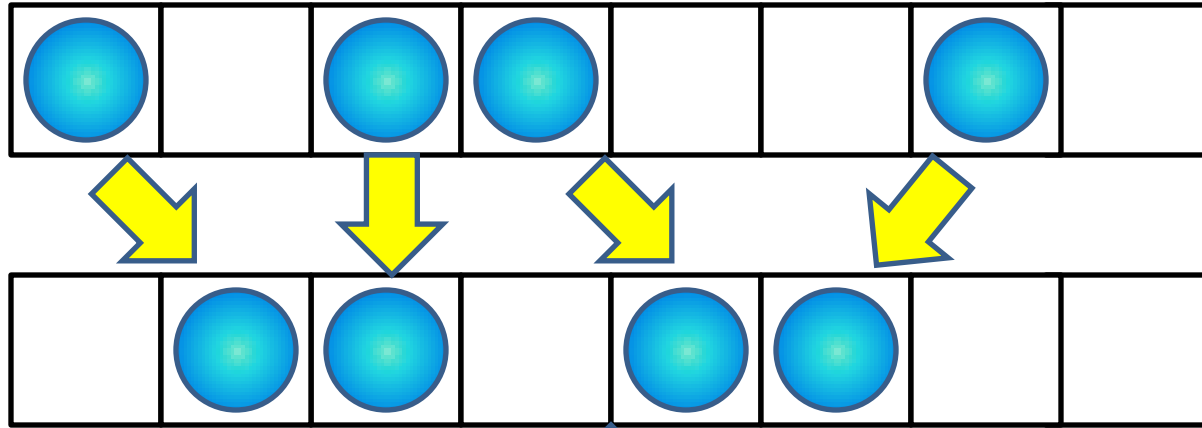
PR>PLでは右側に詰まり定常状態である事が見て取れる。

PR>PLでは粒子が詰まっている部分とない空白部分が対称となっている。

SSEPの場合、系はSU(2)対称性を持ち、定常状態になる事が分かっている。

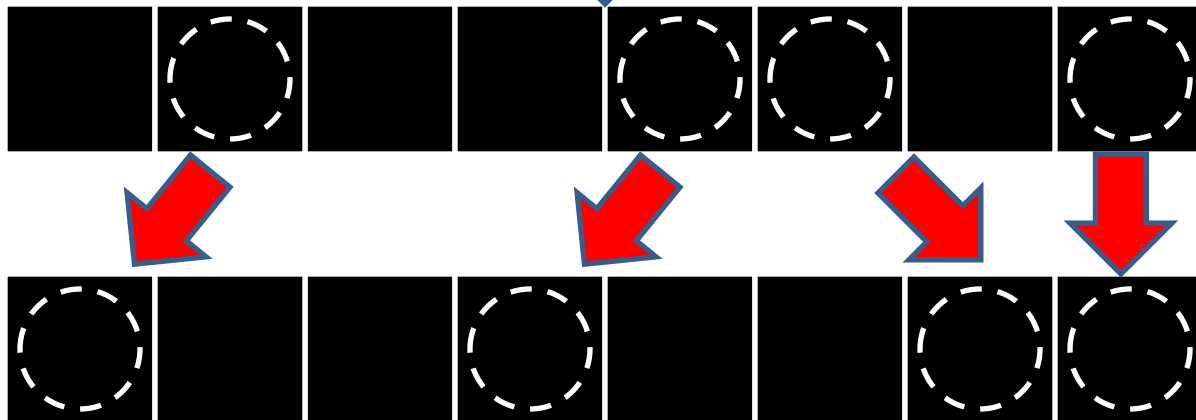
粒子が無い空白部分を反粒子と定義すると、粒子が空白部分にHOPするのは反粒子が粒子のある部分にHOPするのと同じなので、粒子と反粒子の移動は対称であると考えることができる。

粒子の移動



対称

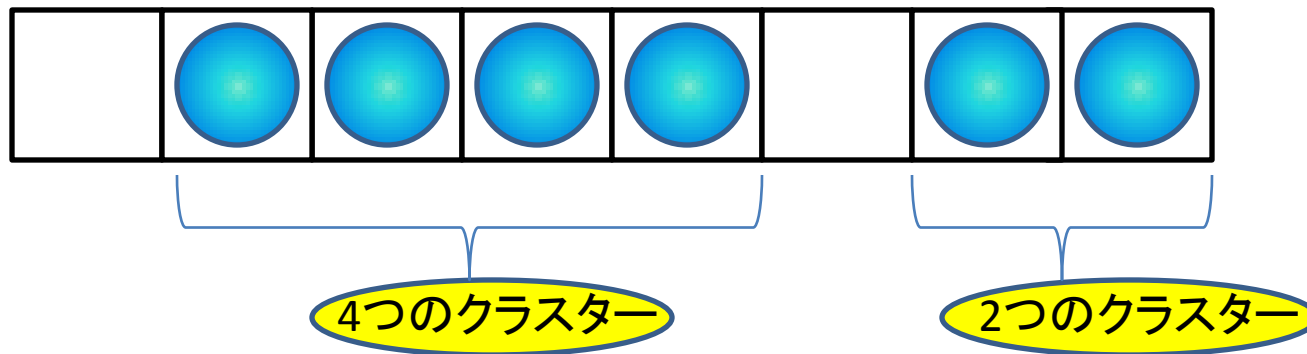
反粒子の移動



粒子は粒子の存在しないサイト
にしか移動する事が
出来ない

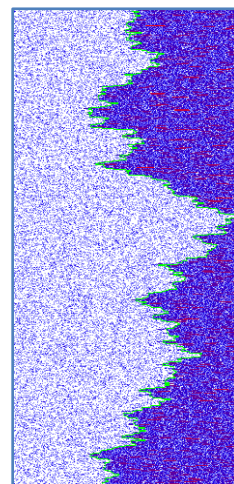
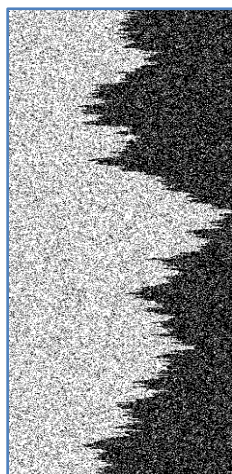
反粒子は粒子の
存在するサイトに
しか移動する事が
出来ない

連続して粒子が並んでいる状態をクラスターと呼ぶことにし、境界線の左側、右側、つまり空白層と渋滞層で粒子のクラスターの長さでクラスターの個数の関係を見る。

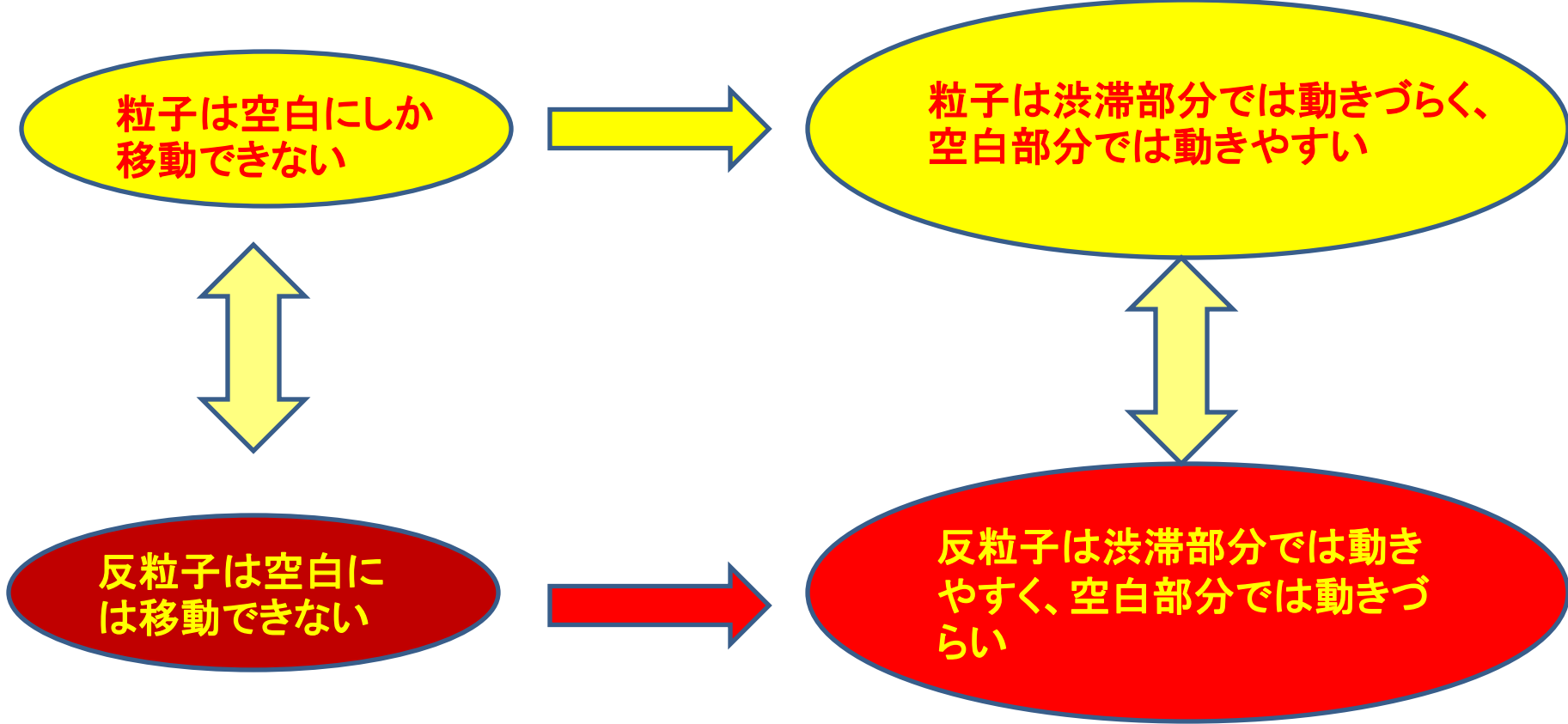


次に反粒子のクラスターの長さで個数を調べ、TASEP, ASEP, SSEPの類似性を調べ、出入り口のない場合のような対称性が見られるかどうかを判断する。

今回の境界線の調べ方は画像をフーリエ解析し、ノイズを消した後、横10サイト縦1STEP分の密度判定と5サイト×5STEP分の密度判定を行い決定している。



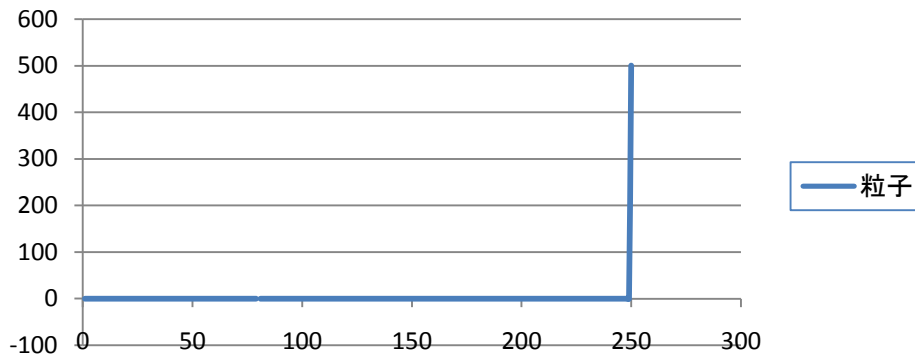
緑色の部分が境界線。また青い部分が粒子のクラスターが短いことを示していて、長くなればなるほど赤くなっていく。



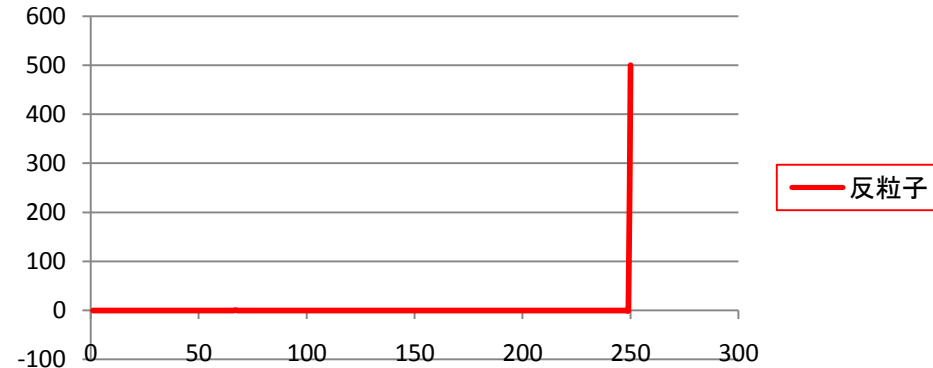
渋滞層や空白層ができた時、渋滞層での粒子の振る舞いが、空白層での反粒子の振る舞いと同じであり、空白層での粒子の振る舞いが渋滞層での反粒子の振る舞いと同じという事になれば、粒子と反粒子の間に対称性があると考えられる。

出入り口のない場合のクラスターの長さとお数の関係

ClosedTASEP1000万STEP粒子

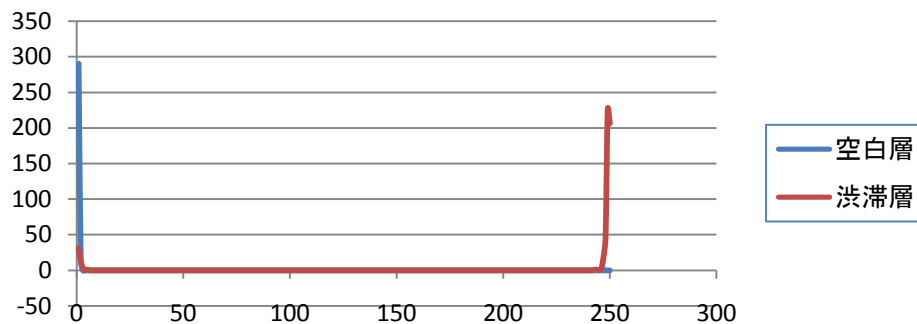


ClosedTASEP1000万STEP反粒子

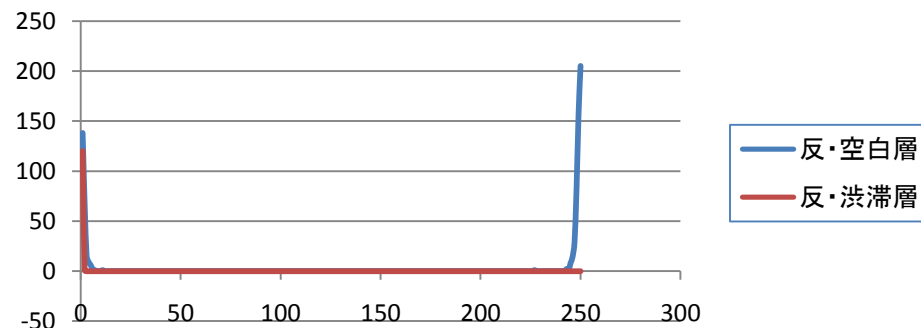


境界線が厳密に出てくるまでの部分を省き、境界線の判定を行うとClosedTASEPの場合、空白層に粒子はなく、渋滞層には反粒子は存在しない。そして、クラスターの長さとお数の関係のグラフを見ると、デルタ関数のような形をして、粒子の渋滞層と反粒子の空白層のグラフが対称性を持っていることが分かる。

ClosedASEP1000万STEP粒子

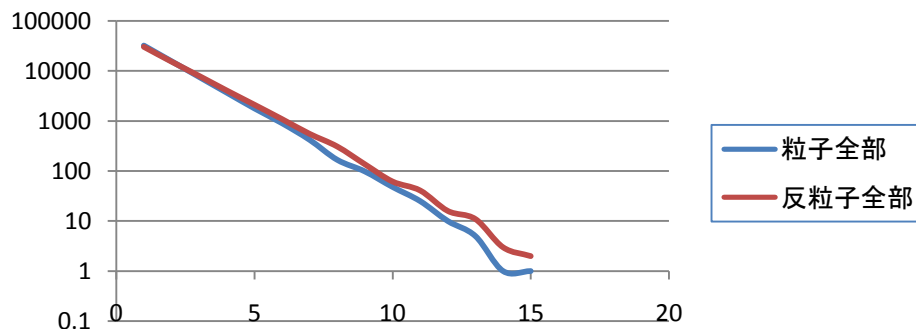


ClosedASEP1000万STEP反粒子



ClosedASEPの場合も同じような対称性が見られるが、境界線付近に揺らぎがある為、短いクラスターが形成されていることが分かる。そして、その短いクラスターとその個数の関係も同じような対称性があることが分かる。

ClosedSSEP1000万STEP

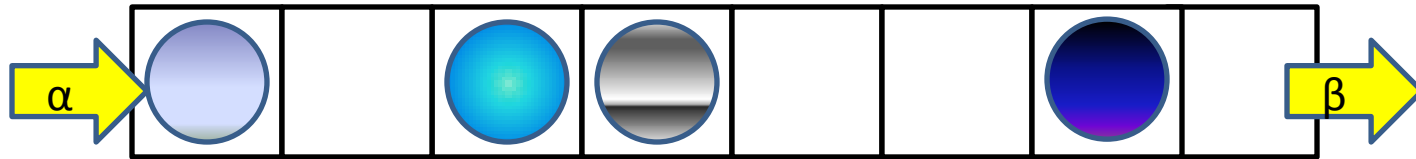


SSEPの場合は境界線判定が不可能なので、サイト全体で調べ、粒子・反粒子のグラフを重ねた。クラスターが長くなると、揺らぎが生じているが基本的に粒子・反粒子が対称性を持っていることが分かる。

よって出入り口の無い系ではTASEP,ASEP,SSEPは全てクラスターの長さとお個数の関係において、粒子と反粒子は対称性を持っている事が分かった。

出入り口がある場合

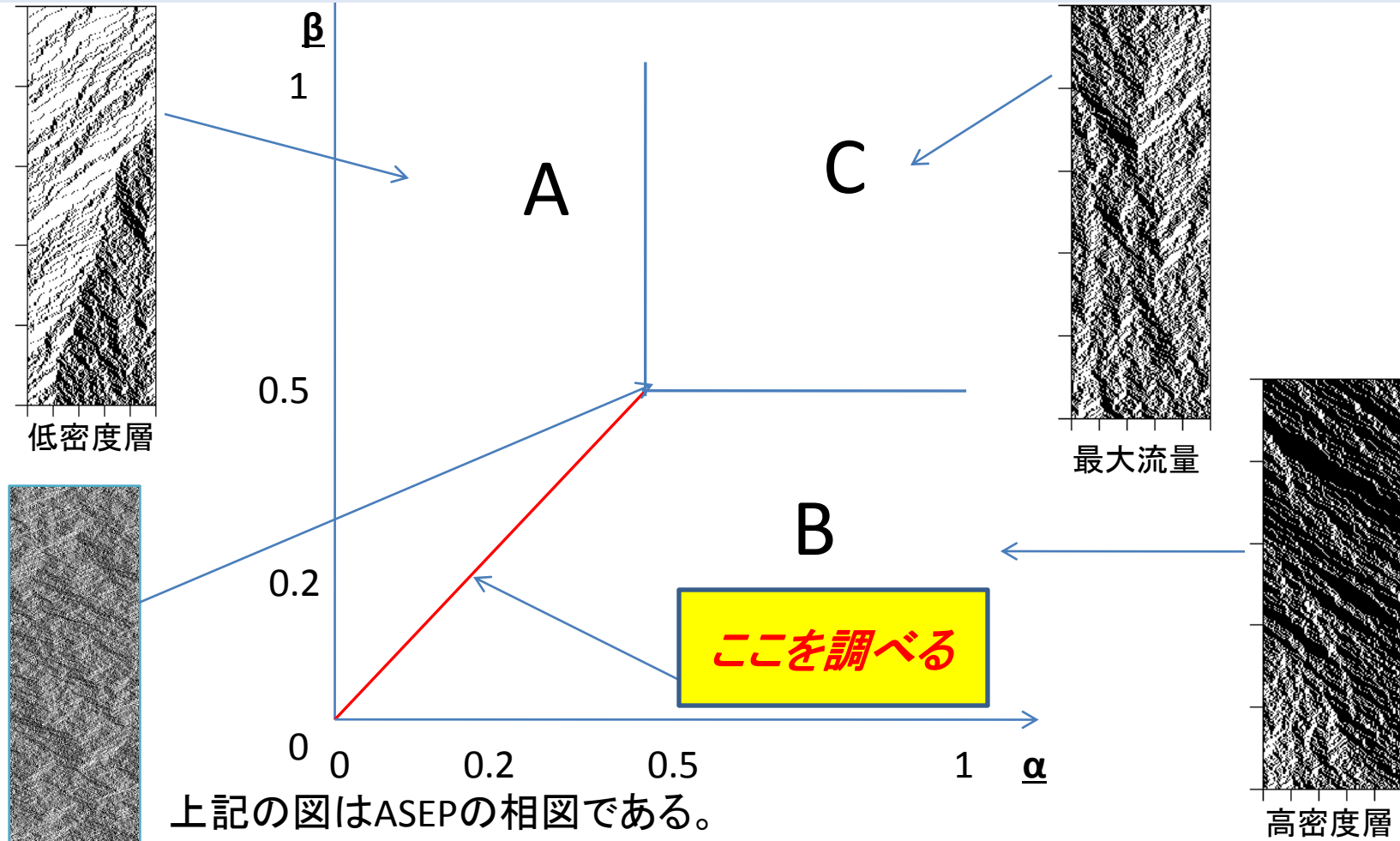
次に出入り口がある場合を考える。



入口の壁が指定された場合確率 α で粒子が流入、出口の壁が指定された場合確率 β で粒子が流出する。

出入り口がない場合と違い、粒子数、反粒子数が一定ではなくなり、 α, β の値によって振る舞いが大きく変わる。

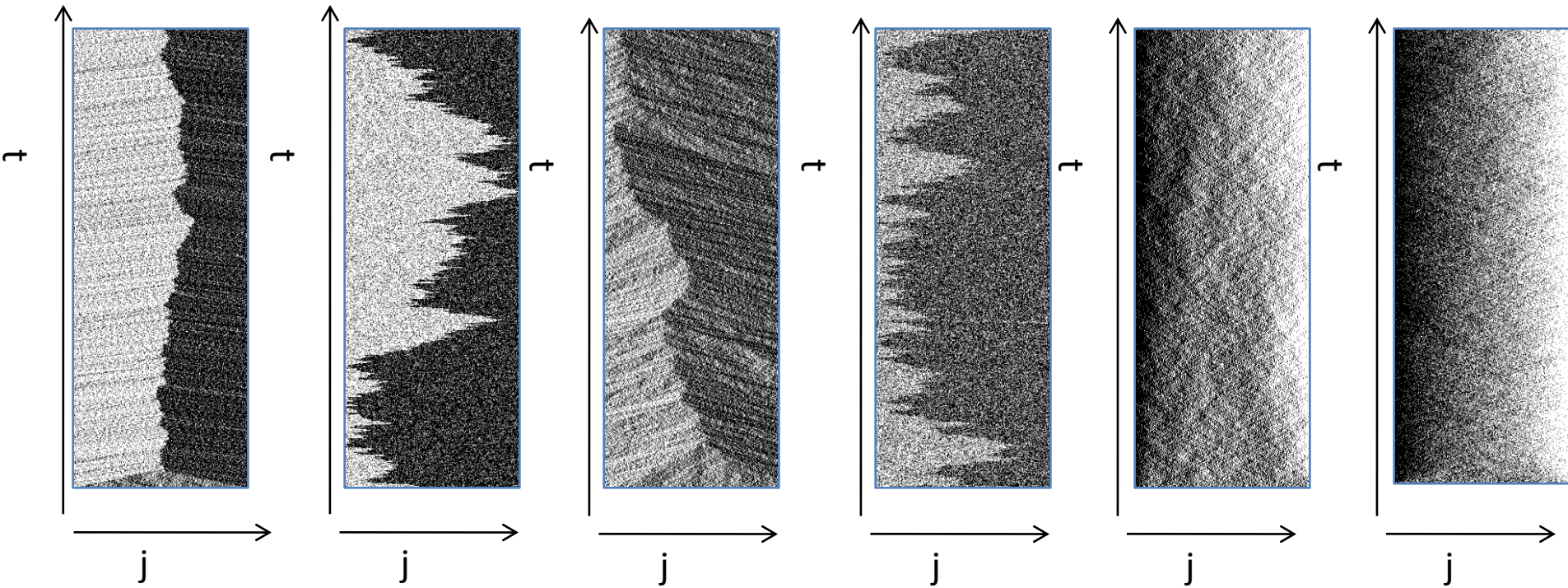
ASEPの相図



三重臨界点

上記の図はASEPの相図である。
 $\underline{\alpha} = \alpha / (PR - PL)$, $\underline{\beta} = \beta / (PR - PL)$ であり、TASEPの場合は $\underline{\alpha} = \alpha$, $\underline{\beta} = \beta$ となる。A, B, Cは各々低密度層、高密度層、最大流量と呼ばれ、 $\alpha = \beta = 0.5$ の部分をも3重臨界点と呼ぶ。
またASEPでは $\underline{\alpha} = \underline{\beta} < 0.5$ の共存ライン(赤い線の部分)で渋滞層と空白層の境界が出来る特殊な振る舞いをする事が知られていて、今回は $\alpha = \beta = 0.2$ のみを考える。

出入り口がある場合のTASEP・ASEP・SSEPの振る舞い



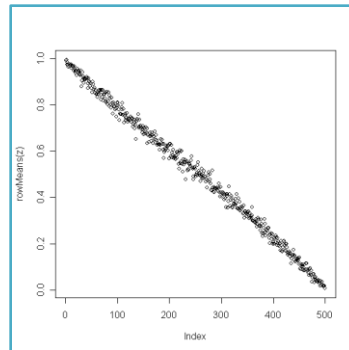
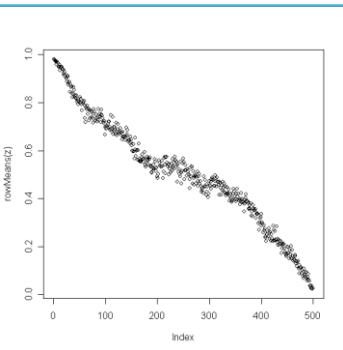
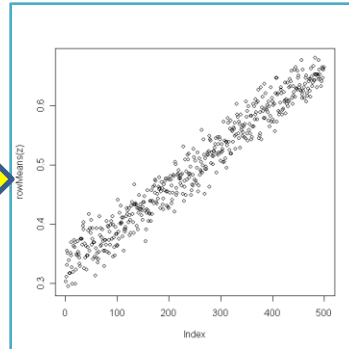
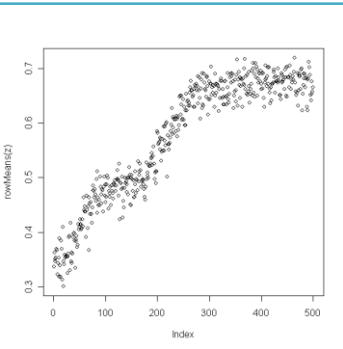
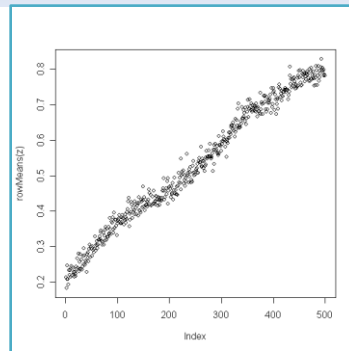
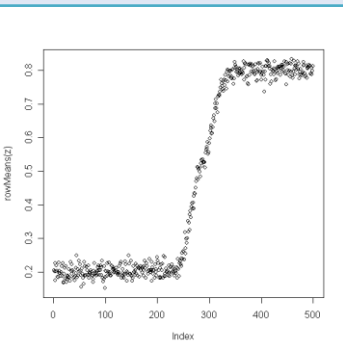
左2つがTASEP,真ん中2つがASEP (PR=1.0,PL=0.4)、右2つがSSEPであり、どれも左側が1000万STEP,右側が2億5000万STEPである。

TASEPとASEPは同じ振る舞いをしているように見える。

またTASEP,ASEP共にSTEP数を大きく取ると、振る舞いが変わっているように見える。

これらの共通点、相違点が見かけだけのものかを調べてみる。

サイトと粒子密度の関係



1000万STEP

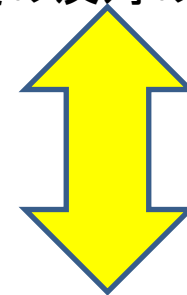
2億5000万STEP

TASEP

左側は短期STEP,右側は長期STEPである。
長期STEPは直線的になる。
また、短期STEPのデータを大量にとり、平均化すると同じような直線のグラフが出る

ASEP

また、長期の場合、反粒子の密度を測ると、粒子密度の反対の直線ができる。



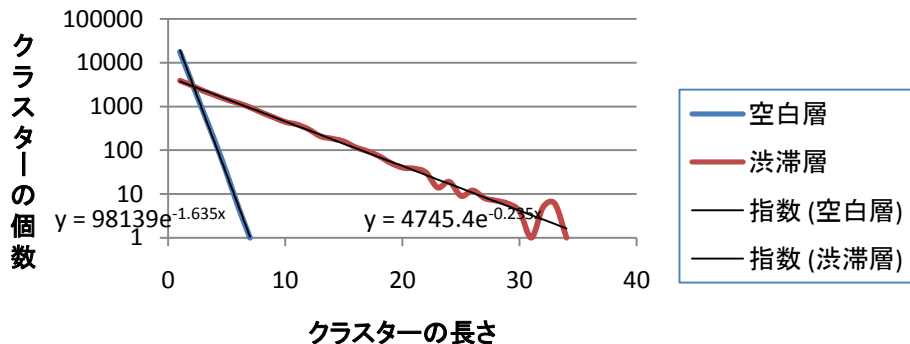
SSEP

密度のみを考慮すると、TASEP,ASEP,SSEP
いずれも粒子と反粒子に対称性があるように見える。

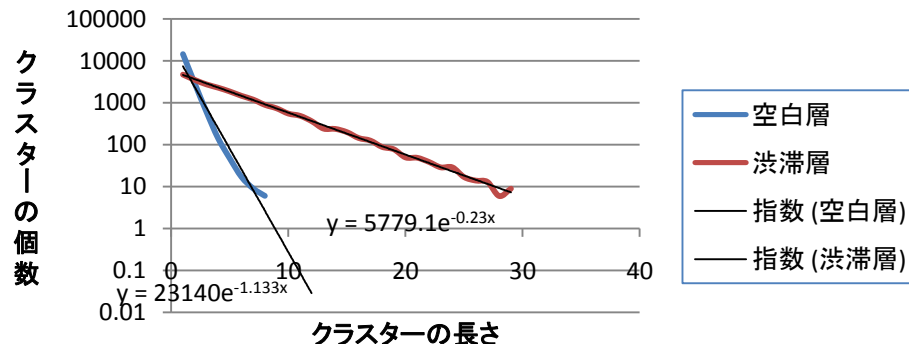
次にクラスターの長さや個数の関係から対称性があるかどうかを調べる。

TASEPのクラスターの長さとお数の関係

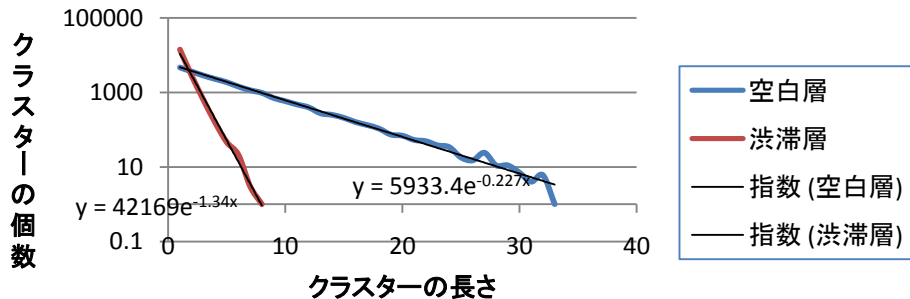
TASEP1000万STEP粒子



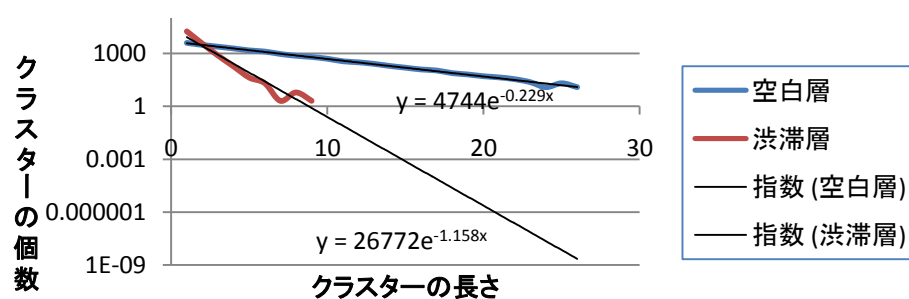
TASEP2億5000万STEP粒子



TASEP1000万STEP反粒子



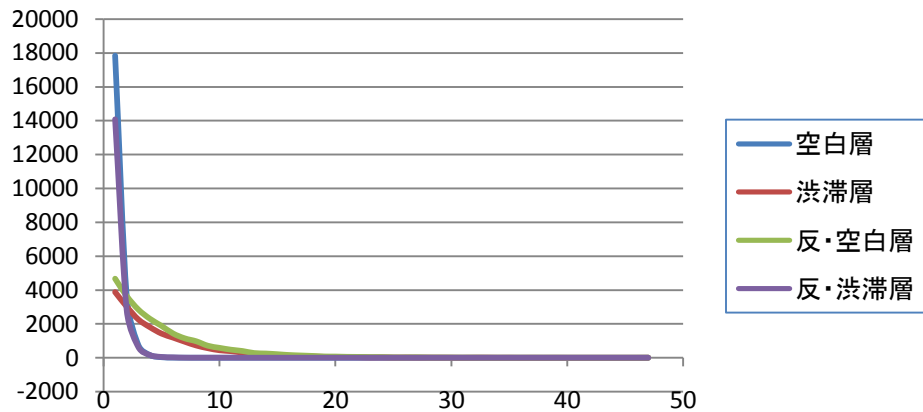
TASEP2億5000万反粒子



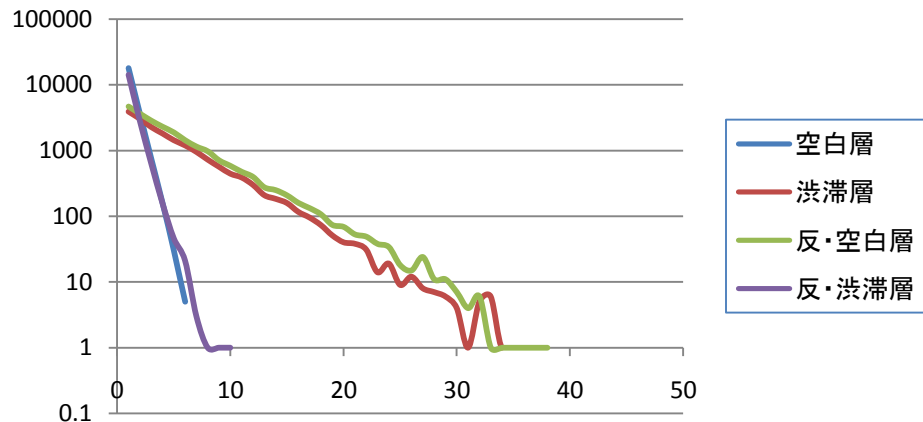
横軸がクラスターの長さ、縦軸がクラスターの個数で今回は縦軸を対数で取っている。その事からも分かるように、クラスターの長さとお数の関係は指数関数に従う。また、STEP数によってグラフの形に大きな変化も見られない。

グラフを見比べると、同じ形のように見える。次に2つのグラフを実際に重ねてみる。

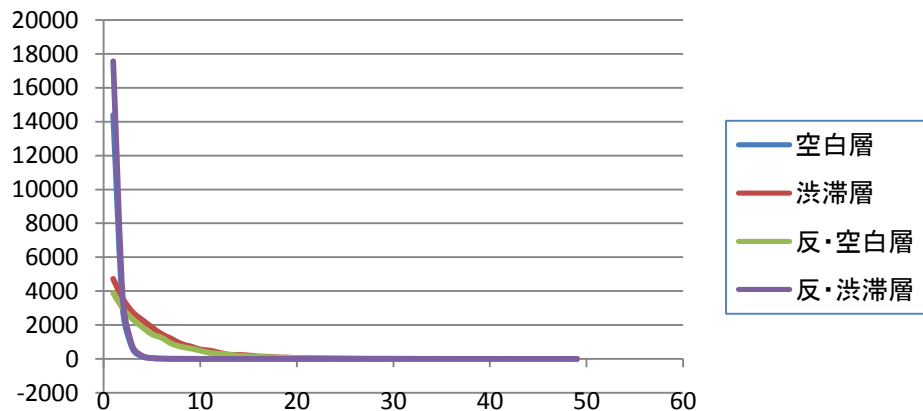
TASEP1000万STEP



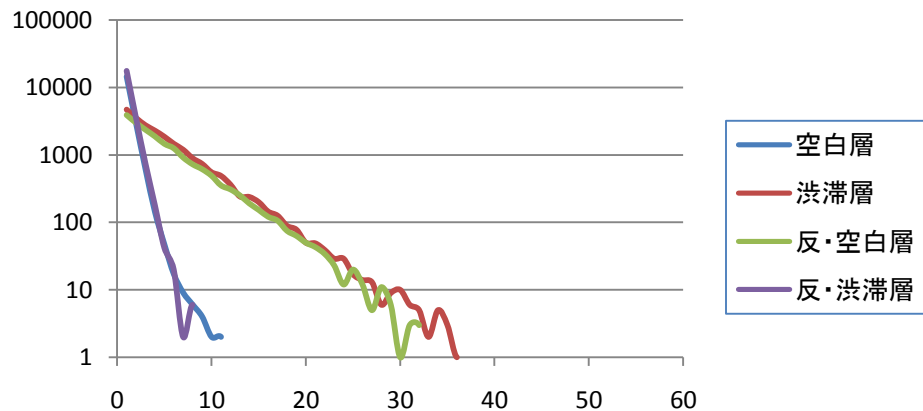
TASEP1000万STEP



TASEP2億5000万STEP



TASEP2億5000万STEP



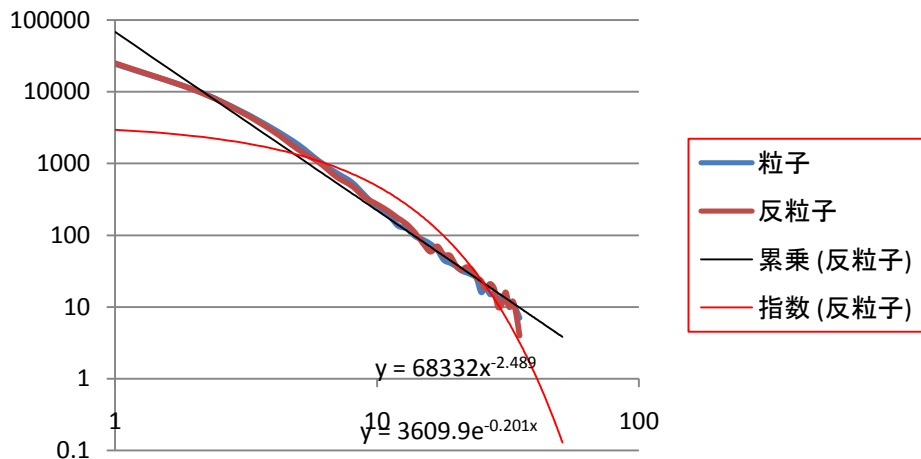
普通のグラフ

片対数グラフ

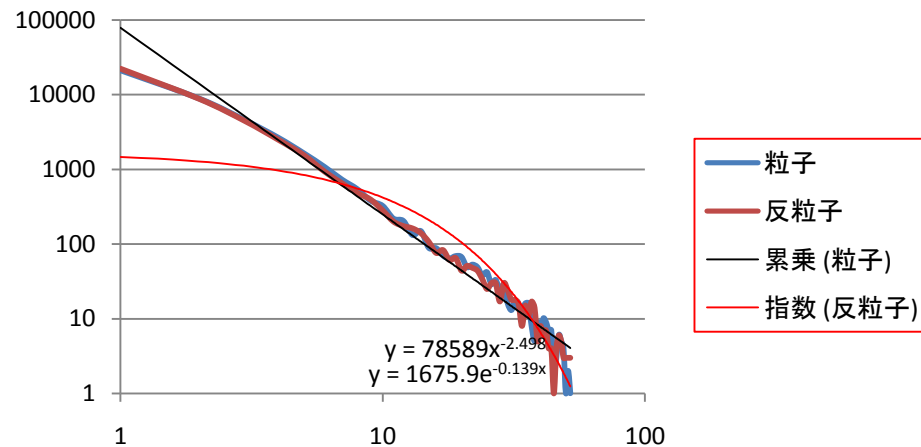
グラフが完全に重なっていることから、粒子の空白層と反粒子の渋滞層・粒子の渋滞層と反粒子の空白層はクラスターの長さとお数の関係において対称性を持っている事が分かる。

SSEPのクラスターの長さとの個数の関係

SSEP1000万STEP



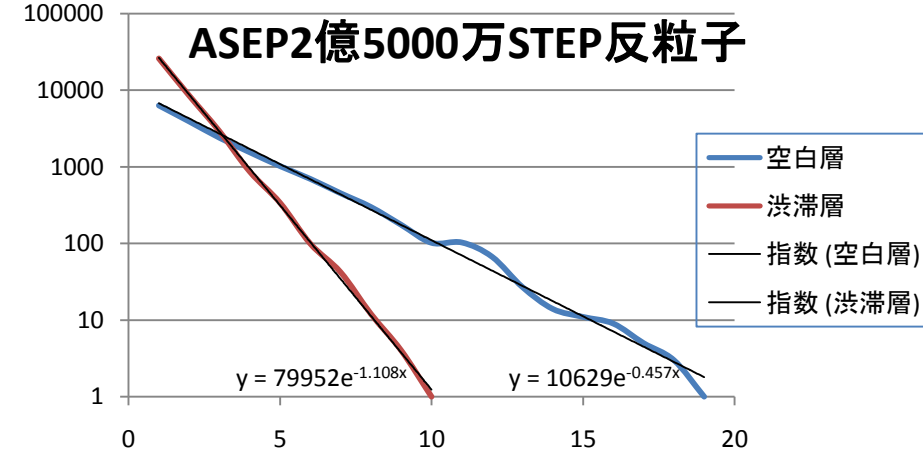
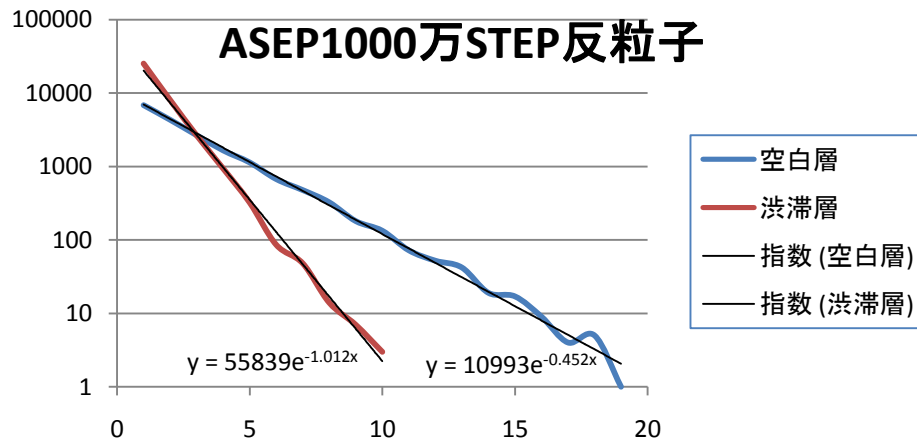
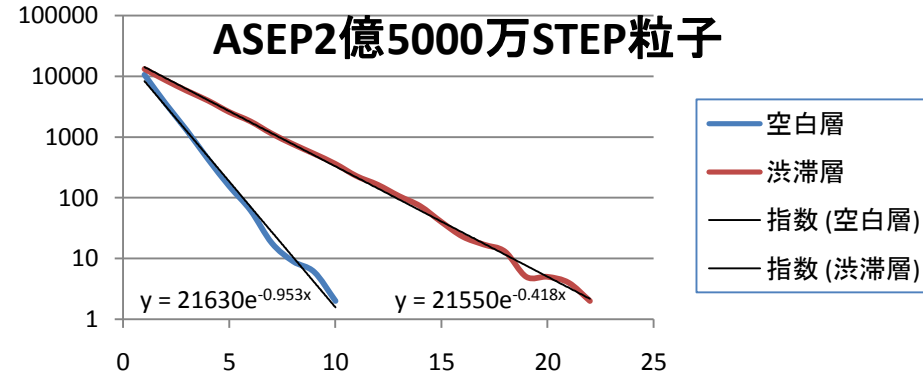
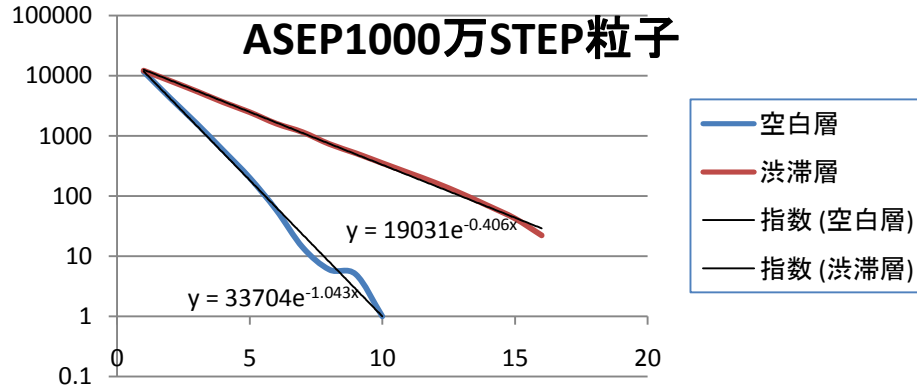
SSEP2億5000万STEP



SSEPの場合、厳密な境界線の判定は不可能なので、全サイトの粒子・反粒子のクラスターを同じグラフ上に出している。

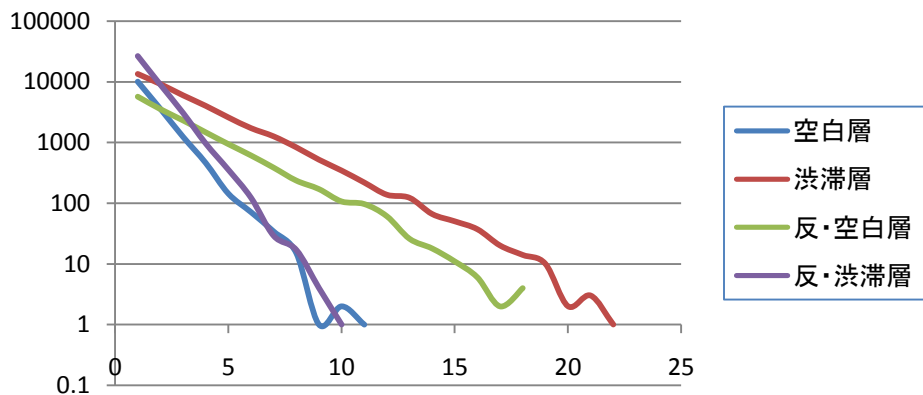
TASEPの場合と違い、SSEPの場合指数関数的ではなくべき乗に従っていることが分かる。また、粒子・反粒子のグラフがほぼ完全に重なり合っていることから、クラスターの長さとの個数の関係について、粒子と反粒子が対称性を持っていることが分かる。

ASEPのクラスターの長さとの個数の関係

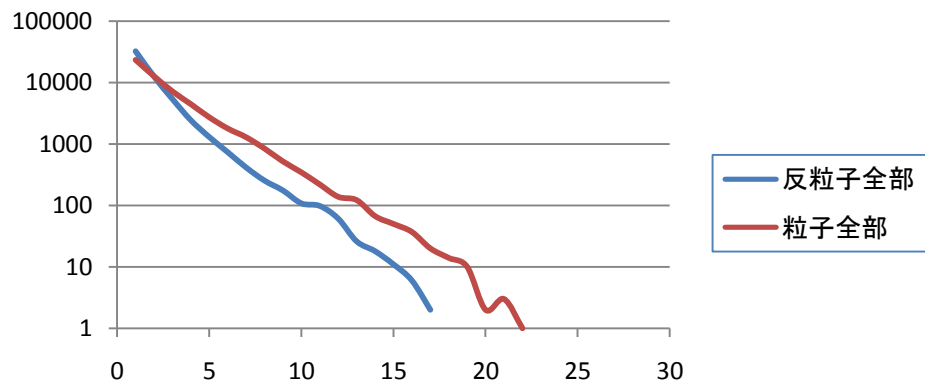


ASEPの場合もSTEP数によるクラスターの分布の変化はない
しかし、粒子・反粒子の場合でグラフの外形が異なっている。
次にTASEPの場合のようにグラフを重ね合わせてみる。さらにSSEPの場合のように全サイトのクラスターのグラフも重ね合わせてみる。

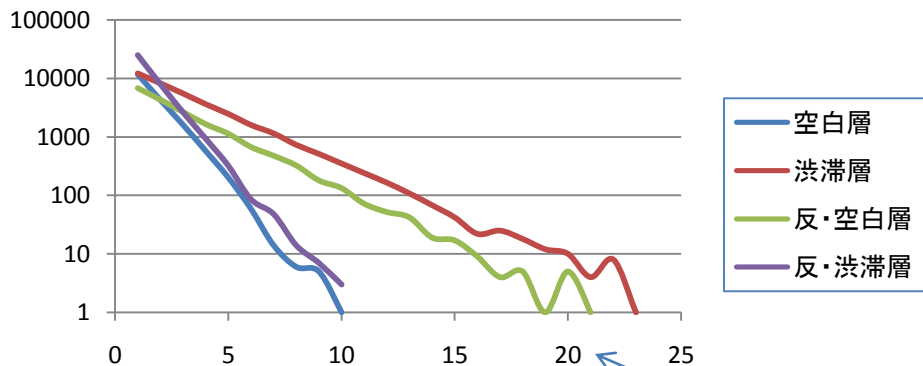
ASEP2億5000万STEP



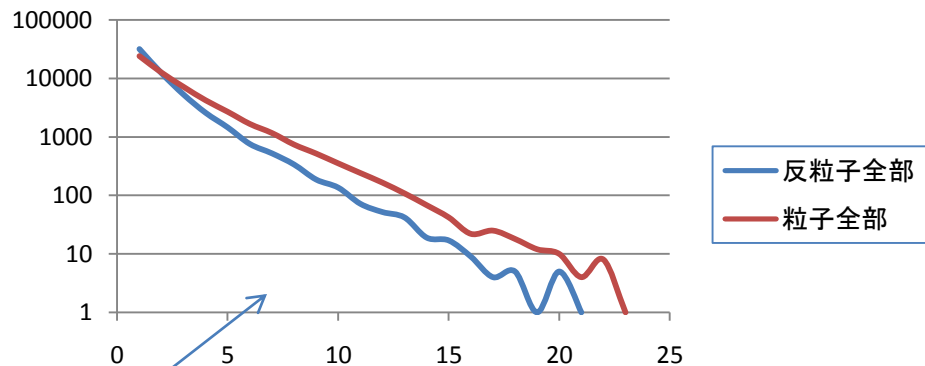
ASEP2億5000万STEP



ASEP1000万STEP



ASEP1000万STEP



グラフ重ならず

STEP数に関わらずグラフは一致しない。

その事からもASEPは粒子・反粒子のクラスターと個数の関係が非対称であることが分かる。

ASEPと低遷移率TASEPの比較

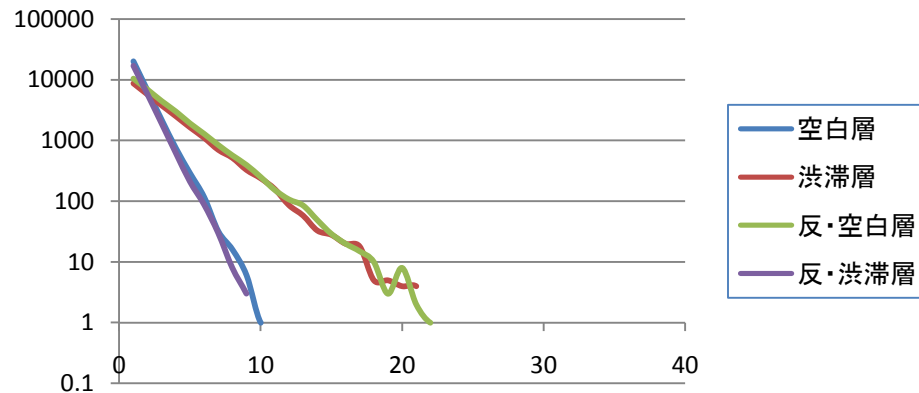
行列形式でASEPの粒子の流れは

$$J = (PR - PL / PR) Z_{L-1} / Z_L$$

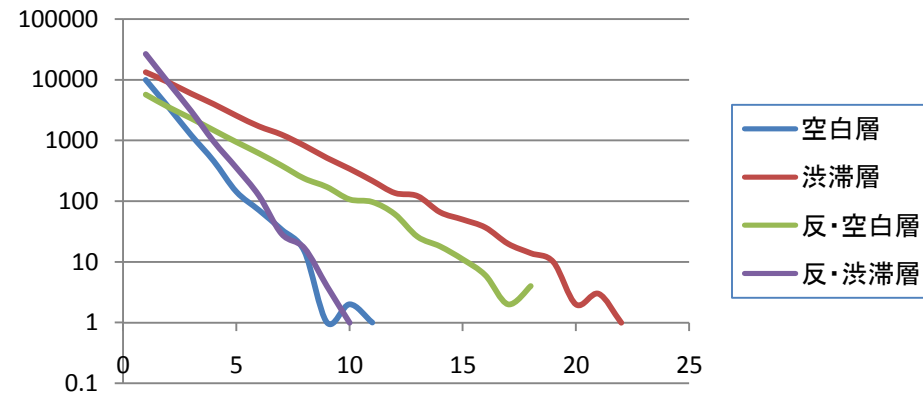
と表すことができる。 Z_L とはLサイトの全ての状態とする。

よってPR=0.6, PL=0のTASEPとPR=1.0, PL=0.4のASEPの粒子の流れは同じである事になる。
そこで同じ流れのTASEPとASEPを比較し、非対称性は粒子の流れが原因かどうかを検討する。

TASEP 2億5000万STEP, PR=0.6



ASEP 2億5000万STEP, PR=1.0, PL=0.4



TASEPはグラフが重なり合い、対称性を持っていることが分かる。
対してASEPはグラフにずれがあることがよく分かる。

よってASEPの対称性の破れは粒子の平均移動速度ではなく、左方向への遷移率PLによって生じることが分かる。

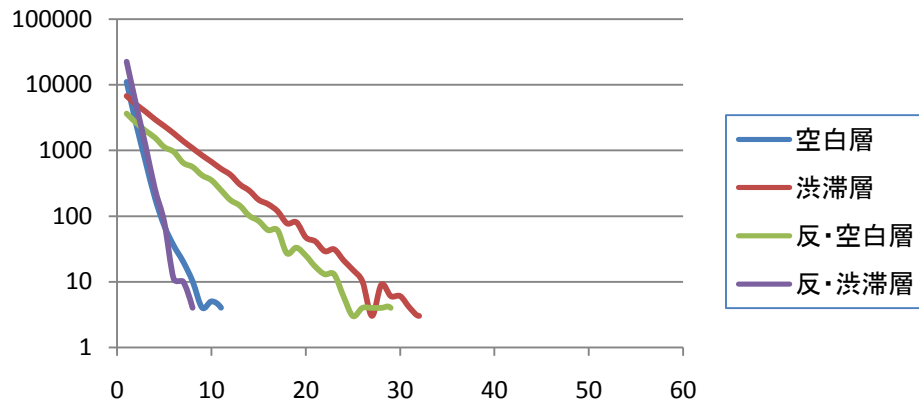
ASEPの遷移率の違いによるASEPの振る舞いの変化

次に $PR=1.0$ のまま、 PL の値を 0.1 刻みで変えていき、どういう変化が生じるのかを見ていく。

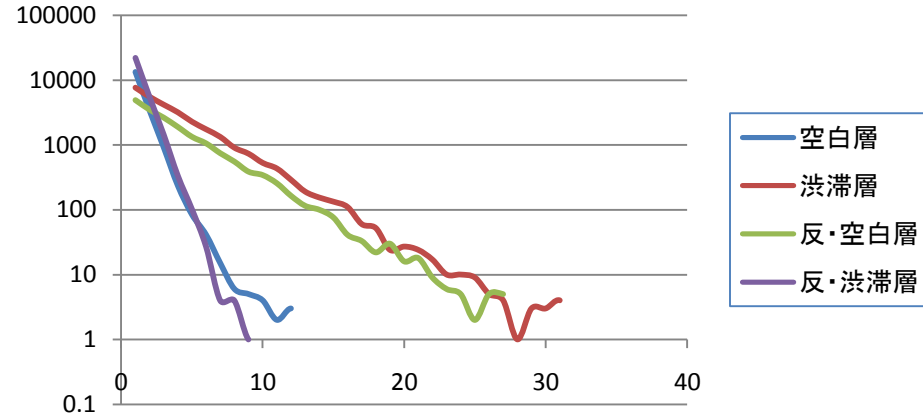
ただし、 $PL=0.6$ で三重臨界点になり境界線が消滅するため、境界線消滅後はSSEPのように全サイトの粒子・反粒子のクラスターで調べる。

同時にTASEPの場合の三重臨界点での振る舞いも解析し、ASEPの場合の三重臨界点での振る舞いとの違いも考える。

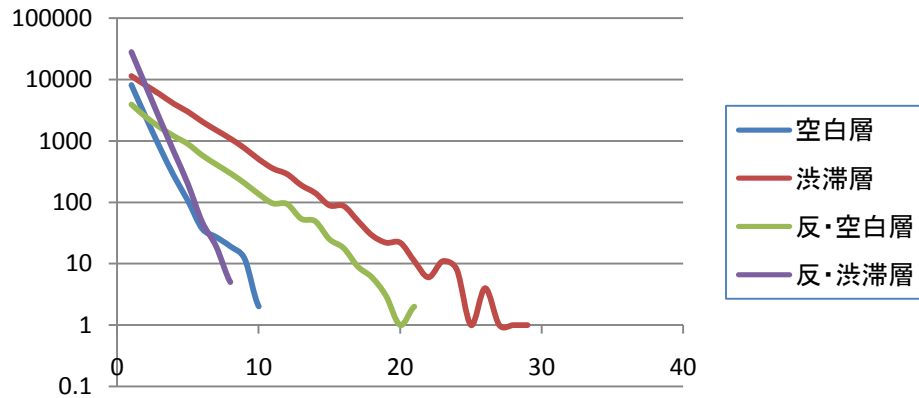
ASEP PL=0.1



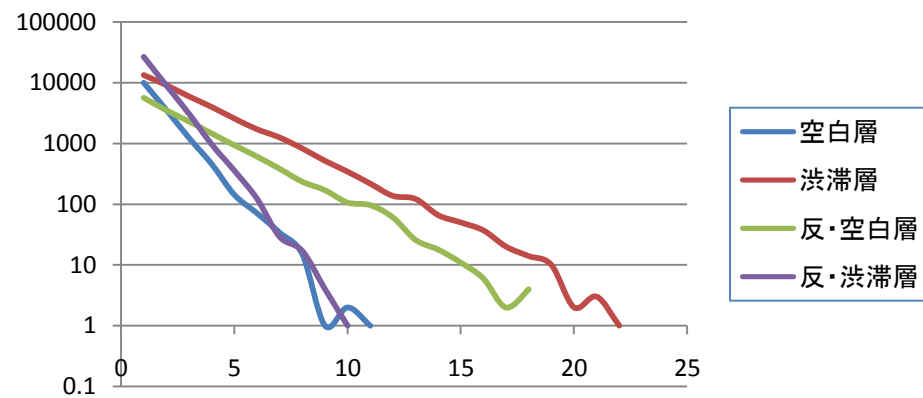
ASEP PL=0.2



ASEP PL=0.3



ASEP PL=0.4



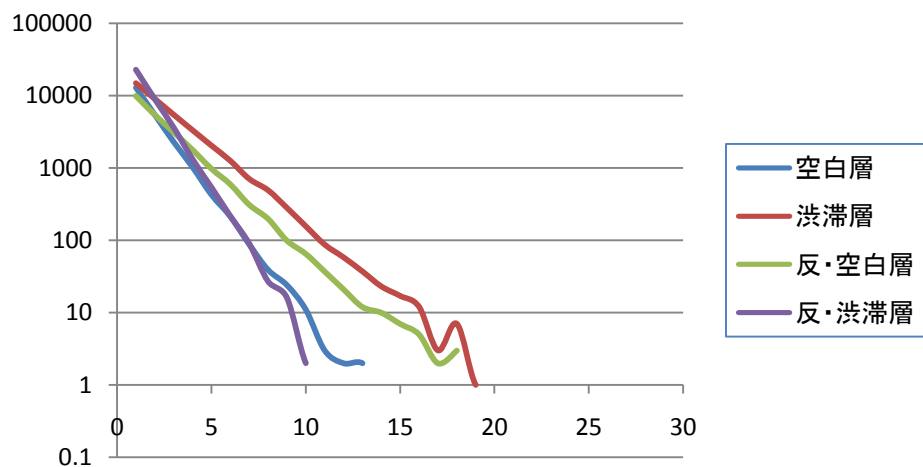
STEP数は全て2億5000万STEPとしている。

グラフを見ると、PLの値が小さいうちは粒子の空白層と反粒子の渋滞層が重なっているが、徐々にずれている。

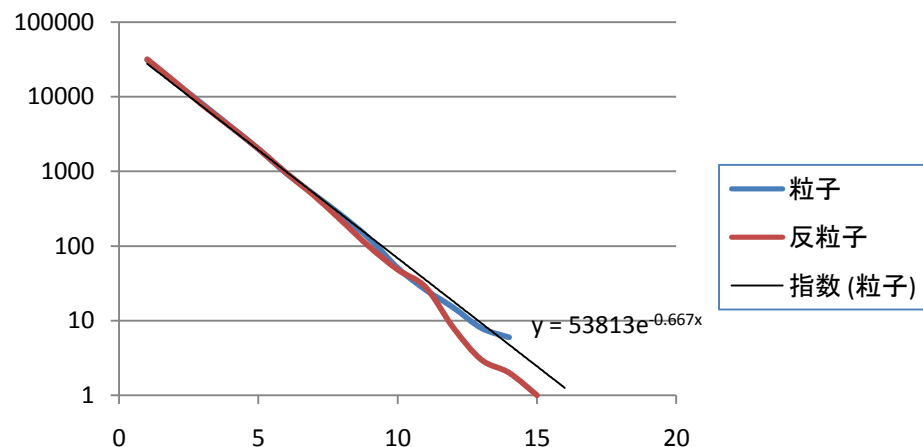
また粒子の渋滞層と反粒子の空白層は同じ傾きを持っているがずれているような状態になっている。

続いてPL>0.5以上のグラフを示す。

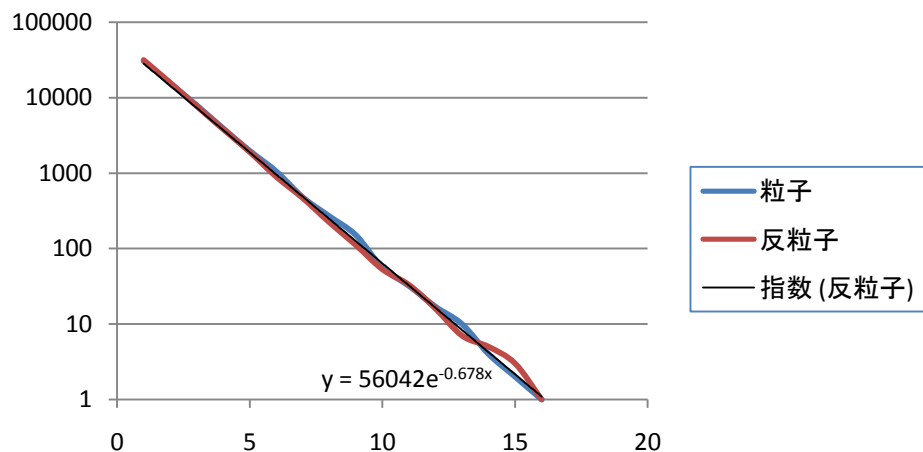
ASEP PL=0.5



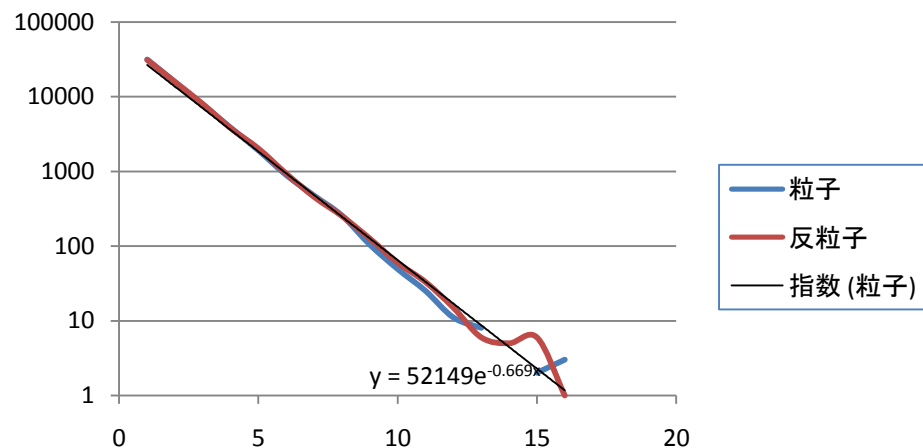
ASEP PL=0.6 三重臨界点



ASEP PL=0.7



TASEP PR=0.4 三重臨界点

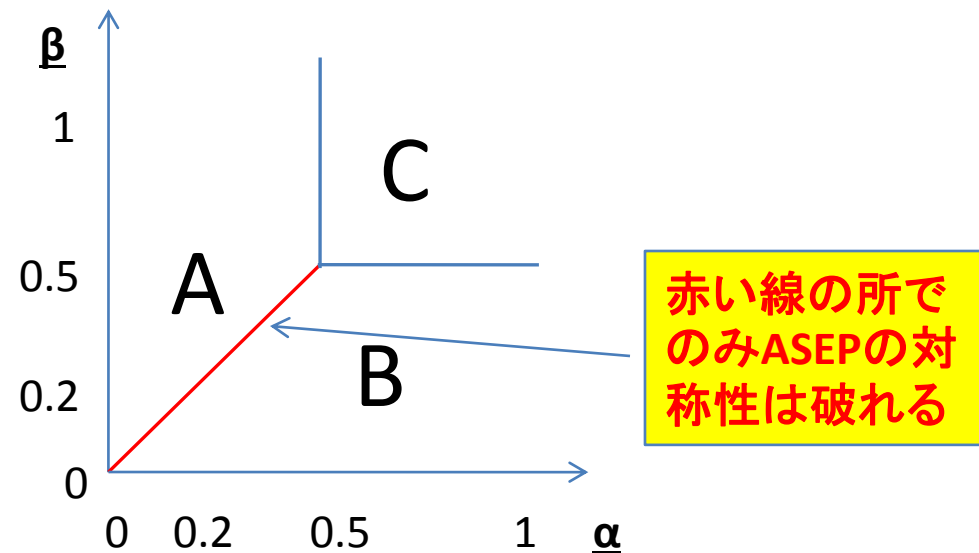


PL=0.5までは非対称なグラフであるが、三重臨界点から、完全に対称な形になっている。
 また、TASEPの三重臨界点もASEPでの三重臨界点も大きな違いは見られない。
 PL>0.7のグラフも完全な対称性をもっていたので、ここでは割愛する。

まとめ

$\alpha=\beta$ の共存ライン上で、ASEPは粒子と反粒子で対称性が破れている。

同じ共存ライン上で、遷移率を変え粒子の平均速度をASEPと同じにしたとしてもTASEPでは対称性は破れない。



他の対称性の破れとの関連付けと考察

自由度が有限の量子論において、Wignerの定理と呼ばれる対称性に対する基本定理がある。

「任意に与えられた変換において、対応するすべての状態ベクトル $|A\rangle, |B\rangle, \dots$ はそれぞれ移行出来たとき、つまり

$$|A\rangle \rightarrow |A'\rangle$$

$$|B\rangle \rightarrow |B'\rangle$$

という変換が不変である場合、任意の $|A\rangle, |B\rangle$ に対し、 $|A\rangle$ から $|B\rangle$ への遷移確率は不変に保たれ

$|\langle B|A\rangle| = |\langle B'|A'\rangle|$ が成り立つ時

$\langle B|A\rangle = \langle B'|A'\rangle$ もしくは

$\langle B|A\rangle = \langle A'|B'\rangle$ となる。」

という定理であるが、ASEPの場合として、空白層の状態を $|A\rangle$ 、渋滞層の状態を $|B\rangle$ とし、反粒子の空白層の状態が $|A'\rangle$ 、反粒子の渋滞層の状態を $|B'\rangle$ とすると、TASEPの場合

$\langle B|A\rangle = \langle A'|B'\rangle$ が成立しているが、ASEPの場合は成立しないと考えることができる。

場の理論においては、自由度が無限の系においてはWignerの定理が適応できずに、対称性が自発的に破れることが分かっている。

参考文献:

1: 笹本智弘 物性研究 79-6 (2003-3) [1次元非対称単純排他過程の厳密解]

2: サイエンス社 [対称性と保存則]