

1次元排他過程の定常状態について： 行列の方法と q -直交多項式

東京大学大学院理学系研究科
笹本 智弘 (SASAMOTO Tomohiro)

概要

1次元排他過程とは、1次元格子上を多数の粒子が体積排除の相互作用の下で拡散するようなモデルである。このモデルは開放的境界条件において境界のパラメータの値によって相転移を起こすなど、興味深い現象を示すことが知られている。このモデルの定常状態を行列の方法と呼ばれる方法で構成し、 q -直交多項式との関連や物理量の計算法について述べる。

1 Introduction

1次元排他過程とは、1次元格子上を多数の粒子が体積排除の相互作用の下で拡散をするようなモデルであり、これまでは主として物理の方では非平衡統計力学の研究者、数学の方では確率過程論の研究者によって研究されて来た。しかしここ数年この種の確率過程モデルに対して物理量を厳密に計算することが出来る場合があることが発見され、可積分系の文脈からの研究が始まりつつある。ただ可積分系の研究者にはまだまだ馴染みの薄い話題であると考えられるので、このIntroductionでは1次元排他過程等の確率過程モデルの可積分系における位置について少し説明を試みる。もちろんここに述べることは極めて一面的な説明であり、かつ全くの私見であることを最初にお断りしておく。

さて研究会のテーマは「超離散化・量子化」ということであったが、「～化」というからには何か～化されるものがもともとあるはずであり、それはいまの場合ソリトン方程式であると考えられる。ソリトン方程式は非線形偏微分方程式の特別に性質の良いもの、である。そして超離散化とは偏微分方程式に現れる時間・空間変数および独立変数の離散化の事であり、その結果得られるものはCellular Automata (CA) である。そこでソリトン方程式の超離散化においては、ソリトン方程式が持っている

良い性質を壊さないような「良い」超離散化を考えることが重要であり、その結果得られるのはCAの特別に性質の良いもの(ソリトンCA)である。一方量子化とは、偏微分方程式に現れる独立変数を演算子で置き換える事であり、ソリトン方程式の量子化の結果得られるものは可積分な場の理論である。

ところで世の中に起こる現象は、微分方程式や量子場の理論で記述されるものばかりではない。特に第0近似として偏微分方程式による記述が可能な系でもノイズの影響が大きくなると、何らかの方法で揺らぎの効果を採り入れた取り扱いが必要になる。物理から見ればこれは非平衡統計力学の範疇に属する問題である。一方数学的に言えば、偏微分方程式の代わりに確率偏微分方程式を取り扱う事になる。さらにその種々の離散化を考えることも出来、例えば確率偏微分方程式を超離散化したものは確率的 Cellular Automata である(下の図式参照)。

$$\begin{array}{ccc}
 \text{非線形偏微分方程式} & \xrightarrow{\text{超離散化}} & CA \\
 \downarrow \text{ノイズ} & & \downarrow \text{ノイズ} \\
 \text{非線形確率偏微分方程式} & \xrightarrow{\text{超離散化}} & \text{確率的 } CA
 \end{array} \quad (1.1)$$

図式1：非線形偏微分方程式の超離散化とノイズ追加の概念図

しかしながら、非線形確率偏微分方程式にしろその離散化にしろ、それらのうちどのようなものがソリトン方程式やその離散版にも匹敵するような特別に性質の良いものなのか?ということは、それほど研究されて来ていないように思われる。言葉を変えると、可積分系のいわば「確率化」の理解は「離散化」や「量子化」に比べ遅れているように思われる。

それではそのような「確率化」された系は可積分系の観点から見て面白く無いのかということそうではない。今回の話の中心となる1次元排他過程も、統計学的に見て非常に興味深い現象を示し、かつ可積分系特有の深い数理構造を持つ確率過程模型の一つである。関係が深いと考えられるソリトン方程式は Burgers 方程式であり、上と同様の図式で書くと

$$\begin{array}{ccc}
\text{Burgers 方程式} & \xrightarrow{\text{超離散化}} & \text{超離散 Burgers 方程式} \\
(\partial_t \phi = \partial_{xx} \phi + 2\phi \partial_x \phi) & & ('98 \text{ Nishinari \& Takahashi [1]}) \\
\downarrow \text{ノイズ} & & \\
\text{noisy-Burgers 方程式} & \xrightarrow{\text{離散化}} & \text{ASEP-type モデル} \\
(\partial_t \phi = \partial_{xx} \phi + 2\phi \partial_x \phi + \partial_x \eta) & & \\
\end{array} \tag{1.2}$$

という様になっていると考えられる。ただし $\eta = \eta(x, t)$ はガウシアンノイズであり、

$$\langle \eta(x, t) \rangle = 0 \tag{1.3a}$$

$$\langle \eta(x, t) \eta(x', t') \rangle = 2\delta(t - t') \delta(x - x') \tag{1.3b}$$

を満たす。ここで ASEP という言葉が出て来たが、これは次節以降の議論で主役となる Asymmetric Simple Exclusion Process (非対称単純排他過程) の頭文字をとったものであり、どのような過程かは次節で説明する。下の段で右向きの矢印の上は「超離散化」ではなく「離散化」となっているが、それは一番標準的で次節以降でも取り扱うモデルが時間連続、空間・独立変数離散のバージョンだからである。もちろん ASEP-type モデルには時間も離散化したバージョンも存在する。そのようなモデルと Burgers 方程式を直接超離散化して得られる CA [1] の関係を調べる事も興味深い問題である。また noisy-Burgers 方程式の代わりに $h(x, t) = \int^x \phi(x', t) dx'$ が満たす方程式

$$\partial_t h = \partial_{xx} h + (\partial_x h)^2 + \eta \tag{1.4}$$

に関する文献も多くある。これは界面の成長を記述するモデル方程式として [2] において導入され、KPZ 方程式と呼ばれている。

確率過程模型の可積分系における位置についての私見の説明がずいぶん長くなったが、種々の方程式やモデルが可積分系からみてどのように関連しているかという事はこれからの話の主題ではないし、また筆者にそのような大きなテーマについて解説する力量も無い。次節からは ASEP の定常状態という特定の話題に限って、このモデルが示す興味深い性質を物理的・数理的側面から説明する。

2 開放的境界条件の1次元非対称排他過程

1次元の格子を考え、格子点の数を L とする。各サイト $j (1 \leq j \leq L)$ には粒子がいるか ($\tau_j = 1$) いないか ($\tau_j = 0$) の2状態しか無いとする。系の配置は $110 \cdots 010 (L \text{ 個})$ のような0と1のストリングで表され、可能な配置は全部で 2^L 通りある。各粒子は非対称なランダムウォークをしようとするものとする。時間のスケールを取り直すことによって、右へホッピングする割合を1、左へホッピングする割合を q とする。ここでは $0 \leq q < 1$ の場合を中心に考える(「非対称」)。粒子は最隣接サイトにのみホッピング出来るとする(「単純」)。また粒子間には体積排除の相互作用がはたらき、ある粒子が右へホッピングしようとしたときに右隣のサイトに粒子がいた場合そのホッピングは起こらないものとする(「排他」)。これが非対称単純排他過程(ASEP)の基本的なルールであるが、ここではさらに格子の左からは粒子の流入、右からは粒子が出て行くこともあるような場合を考える。すなわちサイト1に粒子がいなければ割合 α で粒子が格子の外からサイト1に粒子が入り、サイト L に粒子がいたら割合 β で粒子は格子の外に出て行くとする(図1)。

上ではかなり直観的な説明を書いたが、より正確には連続時間のASEPはマスター方程式

$$\frac{d}{dt}P = -HP \quad (2.1)$$

で定式化される。ここで P と書いたのは時刻 t で系の配置が $\tau_1 \tau_2 \cdots \tau_L$ である確率 $P(\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_L; t)$ を並べた 2^L 成分ベクトルである。一方 H は確率過程の時間発展を記述する遷移確率行列であり、そのサイズは $2^L \times 2^L$

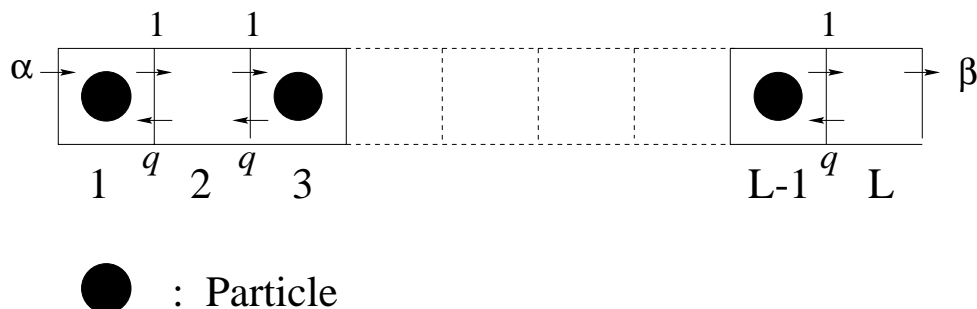


図1：開放的境界条件の1次元非対称単純排他過程

である。上で述べた開放的境界条件下の ASEP に対応する遷移確率行列は

$$H = \begin{bmatrix} \alpha & 0 \\ -\alpha & 0 \end{bmatrix}_1 + \sum_{j=1}^{L-1} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & q & -1 & 0 \\ 0 & -q & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}_{j,j+1} + \begin{bmatrix} 0 & -\beta \\ 0 & \beta \end{bmatrix}_L \quad (2.2)$$

で与えられる。ここで右辺第1項の 2×2 行列の右下の添字1は、この行列がサイト1の空間のみに非自明に作用することを示す。つまり

$$\begin{bmatrix} \alpha & 0 \\ -\alpha & 0 \end{bmatrix}_1 = \begin{bmatrix} \alpha & 0 \\ -\alpha & 0 \end{bmatrix} \otimes \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \otimes \cdots \otimes \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}}_{L-1} \quad (2.3)$$

であり、他の行列も同様である。例として $L = 2$ の場合にマスター方程式を書き下してみると

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} P(00;t) \\ P(01;t) \\ P(10;t) \\ P(11;t) \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \alpha & -\beta & 0 & 0 \\ 0 & \alpha + q + \beta & -1 & 0 \\ -\alpha & -q & 1 & -\beta \\ 0 & -\alpha & 0 & \beta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} P(00;t) \\ P(01;t) \\ P(10;t) \\ P(11;t) \end{bmatrix} \quad (2.4)$$

となる。

このモデルは、境界におけるパラメータ α, β の値によってその性質が大きく変化することが知られている [3]。実際パラメータの値をいろいろ変えてコンピュータシミュレーションをおこなってみると3つの大きく異なるパラメータ領域があることが分かる。各パラメータ領域における時間発展の様子を表したのが図2であり、定常状態における粒子密度の空間依存性を表したが図3である。シミュレーションは $q = 0$ の場合、つまり粒子が右方向のみに移動する場合のものであるが、3つのパラメータ領域が現れるという特徴は $0 < q < 1$ の場合でも同じである。($q = 1$ の場合は特別で、様子が全く違う [4]。)

これから見ていくように、3つのパラメータ領域があるということは相転移に対応している。そしてコンピュータシミュレーションの結果から見て取れる各相の特徴を簡単にまとめると次のようになる。

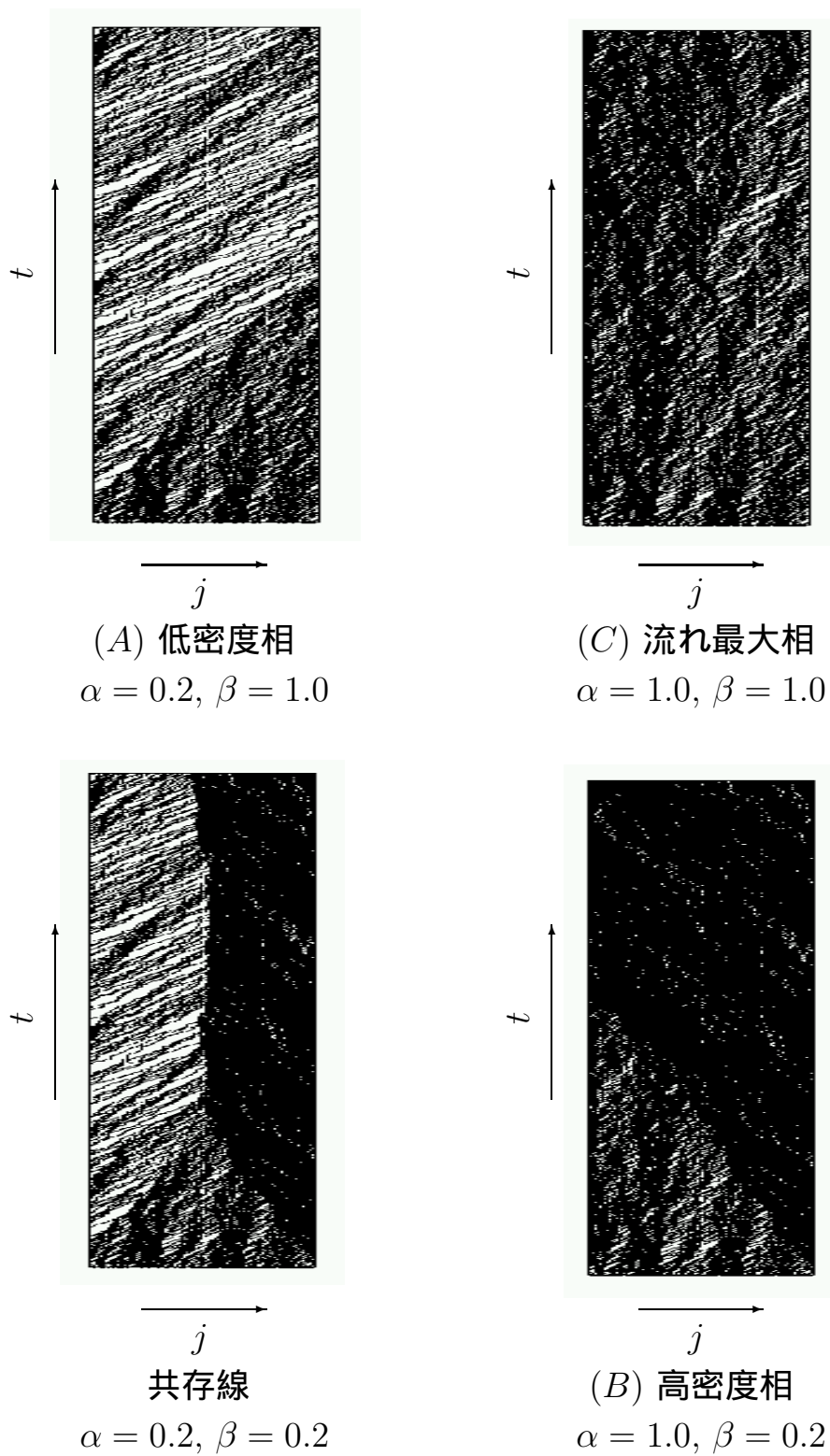
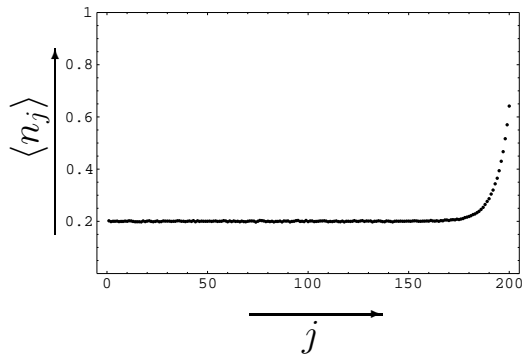
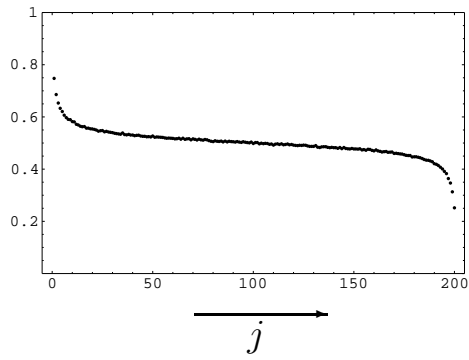


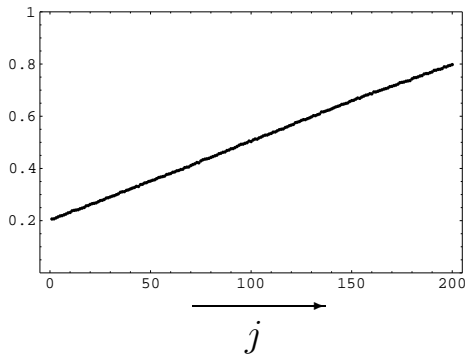
図2: コンピュータシミュレーションによる ASEP の時間発展の様子。横軸はサイト番号、縦軸は時間であり、粒子は黒い点で表されている。格子の長さは $L = 200$ としてある。また、ここでは $q = 0$ としてある。



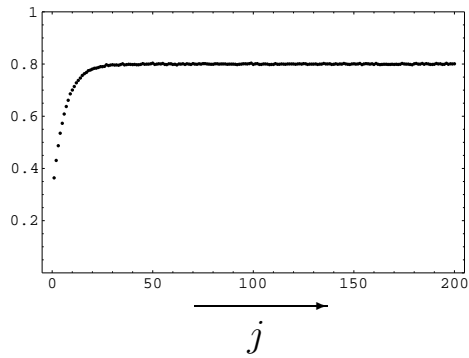
(A) 低密度相
 $\alpha = 0.2, \beta = 0.25$



(C) 流れ最大相
 $\alpha = 1.0, \beta = 1.0$



共存線
 $\alpha = 0.2, \beta = 0.2$



(B) 高密度相
 $\alpha = 0.25, \beta = 0.2$

図3：定常状態における粒子密度の平均値の空間依存性のコンピュータシミュレーションによる結果。横軸はサイト番号、縦軸は粒子密度の平均値を表す。図2と同じく格子のサイズは $L = 200$ 、また $q = 0$ としてある。

- (A) 低密度相: α が小さく β が大きい、つまり粒子は左側から (サイト 1 に) あまり入って来ないが右側から (サイト L) どんどん出て行く場合で、しばらくすると粒子密度の低い状態に落ち着く。
- (B) 高密度相: α が大きく β が小さい場合である。(A) とは逆に、粒子密度の高い状態に落ち着く。
- (C) 流れ最大相: α も β もある程度以上大きい場合。粒子の流れが大きくなるが、その値はこの相全体で一定となり、相図の中で最大値を与える。

共存線: $\alpha = \beta$ が成り立っており、その値がそれほど大きくない場合である。低密度相 (A) と高密度相 (B) の2つの相の境界に相当し、粒子密度は左側で低密度、右側で高密度となる。低密度の部分と高密度の部分の境界はランダムウォークのような動きを示し、その平均を取ると図3に見られるように直線的な粒子密度が得られる。

残念ながら ASEP の時間発展に関する性質は良く分かっていないのが現状である。特に開放的境界条件をとった場合には exact な結果はほとんど得られていない。今後は定常状態のみを取り扱うことにし、粒子の流れと粒子密度を求める事を目標とする。

さてマスター方程式 (2.1) によると、定常状態は遷移確率行列の固有値 0 の固有ベクトル、つまり

$$HP = 0 \quad (2.5)$$

の解として特徴づけられる。この解を (時間依存性を表す t を取り除いて) $P(\tau_1, \dots, \tau_L)$ と書くことにすると、定常状態における物理量の期待値は

- 粒子密度

$$\langle n_j \rangle_L = \sum_{\tau_1=0,1} \sum_{\tau_2=0,1} \cdots \sum_{\tau_L=0,1} \tau_j P(\tau_1, \dots, \tau_L) \quad (2.6)$$

- 2点関数

$$\langle n_j n_k \rangle_L = \sum_{\tau_1=0,1} \sum_{\tau_2=0,1} \cdots \sum_{\tau_L=0,1} \tau_j \tau_k P(\tau_1, \dots, \tau_L) \quad (2.7)$$

等と書ける。

また粒子の流れは2点関数を用いて

$$J_L = \langle n_j (1 - n_{j+1}) \rangle_L - q \langle (1 - n_j) n_{j+1} \rangle_L \quad (2.8)$$

で与えられる。(定常状態においては粒子の流れはサイト番号 j によらない事を示すことが出来るので左辺では j 依存性が無いとしてある。)

3 行列の方法による ASEP の定常状態

3.1 行列の方法

遷移確率行列 H のサイズは $2^L \times 2^L$ であり、定常状態に限ってみても任意の L に対する $P(\tau_1, \dots, \tau_L)$ の表式を与えることは難しいと予想される。しかし 1993 年、Derrida, Evans, Hakim, Pasquier は、有限格子上の ASEP の定常状態が行列の積の形に書ける事を見出した [5]。

正方行列 D, E と行ベクトル $\langle W|$ 、列ベクトル $|V\rangle$ が、

$$DE - qED = \zeta(D + E) \quad (3.1a)$$

$$\alpha\langle W|E = \zeta\langle W|, \quad \beta D|V\rangle = \zeta|V\rangle \quad (3.1b)$$

(ζ は任意定数) という条件を満たすとき、定常状態は次式で与えられる：

$$P(\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_L) = \frac{1}{Z_L} \langle W| \prod_{j=1}^L (\tau_j D + (1 - \tau_j) E) |V\rangle \quad (3.2)$$

ここで行列の積は左から $j = 1, 2, \dots, L$ の順番でかけることにする。また Z_L は規格化定数で、

$$Z_L = \langle W|C^L|V\rangle \quad (3.3)$$

ただし

$$C = D + E \quad (3.4)$$

で与えられる。任意定数 ζ は規格化のみに関係し、(当然ながら) 物理量は ζ に依存しないので、今後は $\zeta = 1 - q$ と取る事にする。

これによると例えば $L = 2$ の場合、

$$\begin{bmatrix} P(00) \\ P(01) \\ P(10) \\ P(11) \end{bmatrix} = \frac{1}{Z_2} \begin{bmatrix} \langle W|E^2|V\rangle \\ \langle W|ED|V\rangle \\ \langle W|DE|V\rangle \\ \langle W|D^2|V\rangle \end{bmatrix} = \text{const.} \begin{bmatrix} \frac{1}{\alpha^2} \\ \frac{1}{\alpha\beta} \\ \frac{q}{\alpha\beta} + \frac{1}{\alpha} + \frac{1}{\beta} \\ \frac{1}{\beta^2} \end{bmatrix} \quad (3.5)$$

となるが、これが実際に $L = 2$ の場合の定常状態を与えていることは (2.4) から容易に確かめられる。一般の L に対してこの状態が確かに定常状態であることを示すのもそれほど難しくないが、紙数の関係で省略する。

ここでコメントを2つ与える。代数関係 (3.1a),(3.1b) を満たす行列が実際に存在することはこれらを満たす行列の表現を実際に与える事によって分かる (3.3 参照)。また上の構成法は (2.5) の解を一つ与えているに過ぎないが、いまの場合定常状態の一意性は確率過程論の一般論から保証されている。

さて以上のような確率過程モデルの定常状態の構成法を、行列を用いるので行列の方法と言うのであるが、他にも行列積仮設等種々の呼び方があり統一されていない。またこの構成法は一見非常に特殊な方法のように感じるかも知れないが、ある種のスピン鎖の基底状態も行列の積の形に書き表されることが知られている事を指摘しておく [6]。

物理量

我々の目標は定常状態における物理量の計算だったのであるが、それらは行列の言葉では次のように表される。

- 粒子の流れ J_L

$$J_L = (1 - q) \frac{\langle W | C^{L-1} | V \rangle}{\langle W | C^L | V \rangle} = (1 - q) \frac{Z_{L-1}}{Z_L} \quad (3.6)$$

- 粒子密度 $\langle n_j \rangle_L$

$$\langle n_j \rangle_L = \frac{\langle W | C^{j-1} D C^{L-j} | V \rangle}{\langle W | C^L | V \rangle} \quad (3.7)$$

- 2点関数 $\langle n_j n_k \rangle_L$

$$\langle n_j n_k \rangle_L = \frac{\langle W | C^{j-1} D C^{k-j-1} D C^{L-k} | V \rangle}{\langle W | C^L | V \rangle} \quad (3.8)$$

以下では紙数の関係上粒子の流れの計算をどのように実行するかを中心に解説し、粒子密度については基本的に結果のみ引用する。

3.2 $q = 0$ の場合

もともとの [5] では、この後 $q = 0$ という特別な場合に限って解析を進めた。後で用いる手法との比較のためここではそのいくつかの結果を引用する。まず $q = 0$ の場合に D と E の関係式が

$$DE = D + E \quad (3.9)$$

と簡単化されることに注意する。これを用いると

$$C^L = \sum_{m=0}^L \frac{m(2L-1-m)!}{L!(L-m)!} \sum_{n=0}^m E^n D^{m-n} \quad (3.10)$$

を証明することが出来る。すると規格化定数 Z_L は

$$Z_L = \frac{R_L(1/\beta) - R_L(1/\alpha)}{1/\beta - 1/\alpha} \quad (3.11)$$

ただし

$$R_L(x) = \sum_{m=2}^{L+1} \frac{(m-1)(2L-m)!}{L!(L+1-m)!} x^m \quad (3.12)$$

と表すことが出来る。Derrida 達はこの表式が $L \rightarrow \infty$ でどのように振舞うかを調べることによって実際に相転移があることを見出したのである。また同様の方法を一般化して粒子密度を計算することも可能であり、

$$\langle n_j \rangle_L = \sum_{m=0}^{L-j-1} \frac{(2m)! Z_{L-m-1}}{m!(m+1)! Z_L} + \frac{Z_{j-1}}{Z_L} \sum_{m=2}^{L-j+1} \frac{(m-1)(2L-2j-m)!}{(L-j)!(L-j+1-m)! \beta^m} \quad (3.13)$$

という表式が得られた。

3.3 一般の q の場合

[5] の後、一般の q の解析に関していくつかの試みがあった。まず [7] では粒子の流れに関してはある plausible な仮定の下に $q = 0$ と基本的に同じ結果を得ることが出来ることが示された。また [8,9] ではパラメータ α, β, q がある関係式を満たすとき代数関係 (3.1a), (3.1b) をみたす有限次元行列があることが示され、その特別な場合に関する物理量の計算がなされた。

一般の α, β, q に対する解析はしばらく出来ないままであったが、[10] によって直交多項式の理論を用いて実行された。それについて説明するため、まず次のような notation を用意する。

$$\begin{aligned}\tilde{\alpha} &= \frac{\alpha}{1-q}, & \tilde{\beta} &= \frac{\beta}{1-q} \\ a &= \frac{1-\tilde{\alpha}}{\tilde{\alpha}}, & b &= \frac{1-\tilde{\beta}}{\tilde{\beta}} \\ c_n &= (1-q^n)(1-abq^{n-1})\end{aligned}\tag{3.14}$$

すると

$$D = 1 + \begin{bmatrix} b & \sqrt{c_1} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & bq & \sqrt{c_2} & 0 & \\ 0 & 0 & bq^2 & \sqrt{c_3} & \\ \vdots & & & \ddots & \ddots \end{bmatrix},\tag{3.15a}$$

$$E = 1 + \begin{bmatrix} a & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{c_1} & aq & 0 & 0 & \\ 0 & \sqrt{c_2} & aq^3 & 0 & \\ \vdots & 0 & \ddots & \ddots & \end{bmatrix},\tag{3.15b}$$

$$\langle W | = (1, 0, 0, \cdots), \quad |V\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}\tag{3.15c}$$

とおくとこれらが代数関係 (3.1a), (3.1b) を満たしていることが分かる。ここで平方根から来る曖昧さを避けるために、しばらく $|a|, |b| < 1$ と仮定する。計算を進めてゆくと平方根の無い表式が得られるので、 $|a|, |b| < 1$ 以外のパラメータ領域に対する表式は解析接続により得られる。

さてここで、規格化定数の計算に現れる行列 $C = D + E$ が実対称 3 重対角行列であると言う事実注意到。これが、行列の方法と直交多項式の理論との接点となる。

4 行列の方法と直交多項式

4.1 直交多項式の理論から

ここで直交多項式の一般論から我々の解析に必要な事柄をいくつか思い出す ([11,12] 等参照)。直交多項式の理論において非対角成分が正であるような実対称 3 重対角行列はヤコビ行列と呼ばれている。つまり一般にヤコビ行列 T は

$$T = \begin{bmatrix} a_0 & b_0 & 0 & 0 & \cdots \\ b_0 & a_1 & b_1 & 0 & \\ 0 & b_1 & a_2 & b_2 & \\ \vdots & & \cdots & \cdots & \cdots \end{bmatrix}, \quad b_j > 0 \quad (4.1)$$

という形の行列である。さてこのヤコビ行列を用いて、隣接 3 項間漸化式

$$\begin{bmatrix} a_0 & b_0 & 0 & 0 & \cdots \\ b_0 & a_1 & b_1 & 0 & \\ 0 & b_1 & a_2 & b_2 & \\ \vdots & & \cdots & \cdots & \cdots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_0(x) \\ p_1(x) \\ \vdots \end{bmatrix} = x \begin{bmatrix} p_0(x) \\ p_1(x) \\ \vdots \end{bmatrix} \quad (4.2)$$

によって多項式の列 $\{p_n\}_{n \geq 0}$ を定義することが出来る。ただし初期条件は $p_0(x) = 1, p_1(x) = (x - a_0)/b_0$ とする。直交多項式の一般論によれば、有界なヤコビ行列に対して確率測度 $d\mu(x)$ がただ一つ存在し、

$$\langle 0 | \frac{1}{z - T} | 0 \rangle = \int d\mu(x) \frac{1}{z - x} \quad (4.3)$$

が成り立ち、さらに上の多項式達はこの測度に関して正規直交系

$$\int p_m(x) p_n(x) d\mu(x) = \delta_{mn} \quad (4.4)$$

を成す、ということが知られている。また (4.3) から

$$\langle 0 | T^n | 0 \rangle = \int d\mu(x) x^n \quad (4.5)$$

が得られることに注意する。

4.2 Al-Salam-Chihara 多項式

そこで行列 C に対応する直交多項式は何か? という事になるのであるが、結論から書くと非対称排除模型の定常状態に関係したヤコビ行列

$$T = C - 2$$

$$= \begin{bmatrix} a+b & \sqrt{c_1} & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{c_1} & (a+b)q & \sqrt{c_2} & 0 & \\ 0 & \sqrt{c_2} & (a+b)q^3 & \sqrt{c_3} & \\ 0 & 0 & \sqrt{c_3} & (a+b)q^4 & \ddots \\ \vdots & & & \ddots & \ddots \end{bmatrix}$$

に対応する直交多項式は Al-Salam-Chihara 多項式として知られていた直交多項式であり、Askey-Wilson 多項式の特別な場合である。[13] の notation でいうと Askey-Wilson 多項式のパラメータ a, b, c, d で $c = d = 0$ としたもので、最初 [14] において導入されたがその重み関数は [15] で初めて与えられた。

ここで次の notation を導入しておく ([16] 等参照)。

$$(a; q)_\infty = \prod_{j=0}^{\infty} (1 - aq^j) \quad (4.6a)$$

$$(a_1, a_2, \dots, a_k; q)_\infty = (a_1; q)_\infty (a_2; q)_\infty \cdots (a_k; q)_\infty \quad (4.6b)$$

すると Al-Salam-Chihara 多項式の直交関係式は複素積分を用いて

$$\frac{(q, ab; q)_\infty}{4\pi i} \int_C \frac{dz}{z} \frac{(z^2, z^{-2}; q)_\infty p_n(\frac{z+1/z}{2}) p_m(\frac{z+1/z}{2})}{(az, a/z, bz, b/z; q)_\infty} = \delta_{mn} \quad (4.7)$$

のように表される。ここで C は複素平面上の経路であって、基本的には単位円周を正の方向に一周するものであるが、被積分関数の極のうち原点に収束するものと無限遠に発散してゆくものを分けるようなものである。まず $|a|, |b| < 1$ の場合は C は単位円周としてよく、それ以外の場合は極の移動に合わせて C を変形してゆく。図 4 に $0 < b < a^{-1} < 1 < a < b^{-1}$ が満たされる場合の経路 C の例を与える。また (4.7) では平方根が現れないので、 $|a|, |b| < 1$ という条件を外して考えて良いことが分かる。

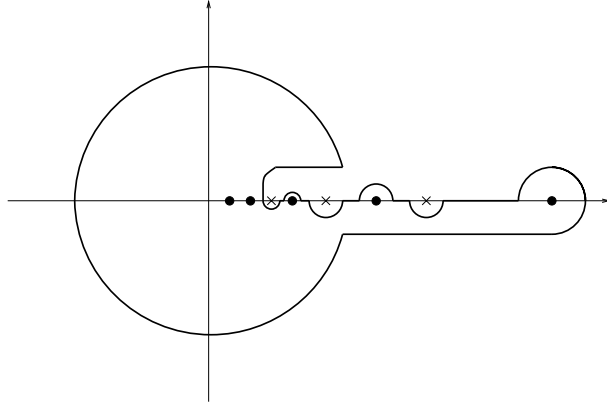


図4: $0 < b < a^{-1} < 1 < a < b^{-1}$ の場合の経路 C の例。黒丸 (•) は原点に収束する極の列、×印は無限遠に発散してゆく極の列 (の一部) を表す。

5 粒子の流れ J

粒子の流れは (3.6) で与えられるから、熱力学極限における粒子の流れを計算するには規格化定数 Z_L の $L \rightarrow \infty$ での漸近的な振舞いを知ればよい。さて (4.5) を今の場合に適用すると、

$$Z_L = \frac{(q, ab; q)_\infty}{2\pi i} \int_C \frac{dz (z^2, z^{-2}; q)_\infty [(1+z)(1+z^{-1})]^L}{z (az, a/z, bz, b/z; q)_\infty} \quad (5.1)$$

を得る。ここで C は複素平面上の経路で、Al-Salam-Chihara 多項式の直交関係の説明のところで述べたのと同じように取る。この Z_L の積分表示において L は指数として現れているので鞍点法 (最急降下法) を用いた漸近解析に適した形をしている。($q = 0$ の場合の和による表示 (3.11), (3.12) と比べてみて欲しい。) 実際に計算を進めると Z_L の漸近形はパラメータ a, b の値によって変化し、次のように与えられる。

- The case A ($a > 1$ and $a > b$; $\tilde{\alpha} < \frac{1}{2}$ and $\tilde{\alpha} < \tilde{\beta}$)

$$Z_L \simeq \frac{(a^{-2}; q)_\infty}{(b/a; q)_\infty} [(1+a)(1+a^{-1})]^L \quad (5.2)$$

- The case B ($b > 1$ and $a < b$; $\tilde{\beta} < \frac{1}{2}$ and $\tilde{\alpha} > \tilde{\beta}$)

$$Z_L \simeq \frac{(b^{-2}; q)_\infty}{(a/b; q)_\infty} [(1+b)(1+b^{-1})]^L \quad (5.3)$$

- The case C ($0 < a, b < 1$; $\tilde{\beta} > \frac{1}{2}$ and $\tilde{\alpha} > \frac{1}{2}$)

$$Z_L \simeq \frac{(ab; q)_\infty (q; q)_\infty^3 4^{L+1}}{\sqrt{\pi} (a, b; q)_\infty^2 L^{\frac{3}{2}}} \quad (5.4)$$

よって熱力学極限における粒子の流れ $J = \lim_{L \rightarrow \infty} J_L$ もパラメータ空間 (α, β) において3つの領域で異なった解析的表示を持つ。そしてこの違いこそ、我々が2節で見た境界のパラメータの値の変化による相転移に相当するのである。各相における J の具体的な表式は次のように与えられる。

- Phase A (低密度相; $a > 1$ and $a > b$; $\tilde{\alpha} < \frac{1}{2}$ and $\tilde{\alpha} < \tilde{\beta}$)

$$J = (1 - q)\tilde{\alpha}(1 - \tilde{\alpha}) \quad (5.5)$$

- Phase B (高密度相; $b > 1$ and $a < b$; $\tilde{\beta} < \frac{1}{2}$ and $\tilde{\alpha} > \tilde{\beta}$)

$$J = (1 - q)\tilde{\beta}(1 - \tilde{\beta}) \quad (5.6)$$

- Phase C (流れ最大相; $0 < a, b < 1$; $\tilde{\beta} > \frac{1}{2}$ and $\tilde{\alpha} > \frac{1}{2}$)

$$J = \frac{1 - q}{4} \quad (5.7)$$

2節での各相の説明の際には「 α も β もある程度以上大きい」というような曖昧な表現を用いたが、今や上の計算から各相が (α, β) 空間においてどの領域に相当するかは明らかであり、相図は下の図で与えられる。

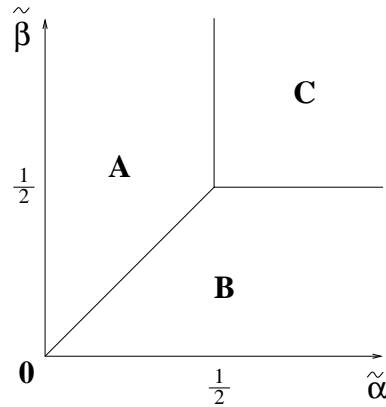


図5：粒子の流れ J の相図

6 粒子密度

粒子の流れの計算を一般化することにより、熱力学的極限における粒子密度も計算できる。紙数の関係上結果のみ引用するので、より細かい計算は [10] を見て欲しい。

6.1 積分表示

有限の L に対する $\langle n_j \rangle_L$ の積分表示は次のように与えられる:

$$\langle n_j \rangle_L = \frac{I_1 + I_2 + \frac{1}{\beta} Z_{L-1}}{Z_L} \quad (6.1)$$

ただし

$$I_1 = \frac{1}{4} (ab; q)_\infty (q; q)_\infty^3 \int_{C_1} \frac{dz_1}{2\pi i z_1} \int_{C_2} \frac{dz_2}{2\pi i z_2} \frac{1}{z_2 + z_2^{-1} - z_1 - z_1^{-1}} \frac{(z_1^2, z_1^{-2}, z_2^2, z_2^{-2}; q)_\infty [(1+z_1)(1+z_1^{-1})]^{L-1}}{(az_1, az_1^{-1}, qz_1 z_2, qz_1^{-1} z_2, qz_1 z_2^{-1}, qz_1^{-1} z_2^{-1}, bz_2, bz_2^{-1}; q)_\infty}$$

$$I_2 = \frac{1}{4} (ab; q)_\infty (q; q)_\infty^3 \int_{C_1} \frac{dz_1}{2\pi i z_1} \int_{C_2} \frac{dz_2}{2\pi i z_2} \frac{1}{z_2 + z_2^{-1} - z_1 - z_1^{-1}} \frac{(z_1^2, z_1^{-2}, z_2^2, z_2^{-2}; q)_\infty [(1+z_1)(1+z_1^{-1})]^{j-1} [(1+z_2)(1+z_2^{-1})]^{L-j}}{(az_1, az_1^{-1}, qz_1 z_2, qz_1^{-1} z_2, qz_1 z_2^{-1}, qz_1^{-1} z_2^{-1}, bz_2, bz_2^{-1}; q)_\infty}$$

ここで C_1, C_2 はそれぞれ z_1, z_2 平面上の経路であって、 $|a|, |b| < 1$ の場合は両方とも単位円周であり、それ以外の場合は被積分関数の極の移動に合わせて変形する。

6.2 右側の境界近くの粒子密度

今考えているモデルには対称性

粒子有り \leftrightarrow 粒子無し

$$\alpha \leftrightarrow \beta \quad (6.2)$$

サイト番号 $j \leftrightarrow$ サイト番号 $L - j + 1$.

があるので、格子の半分より右側での粒子密度を計算すれば十分である。さらにシミュレーションから得られた図3を思い出すと、共存線上を除

いて重要なのは系の bulk 部分の (一定な) 粒子密度と、境界付近での粒子密度の変化の仕方である。そこで $L \rightarrow \infty$ における格子の右側境界付近での粒子密度を計算することになると、その表式は $l = L - j + 1$ として以下のように与えられる。

- Phase C (流れ最大相)

$$\langle n_j \rangle = \frac{1}{2} - \frac{1}{2\sqrt{\pi}l^{\frac{1}{2}}}$$

- Phase A_1 (低密度相 1)

$$\langle n_j \rangle = \tilde{\alpha} - \frac{(qb^{-2}, q; q)_{\infty}}{(qa^{-1}b^{-1}, qab^{-1}; q)_{\infty}} \left[\frac{\tilde{\alpha}(1 - \tilde{\alpha})}{\tilde{\beta}(1 - \tilde{\beta})} \right]^l (1 - 2\tilde{\beta})$$

- Phase A_2 (低密度相 2)

$$\langle n_j \rangle = \tilde{\alpha} - \frac{(a-b)(1-ab)(qba, qba^{-1}; q)_{\infty}(q; q)_{\infty}^4 [4\tilde{\alpha}(1 - \tilde{\alpha})]^l}{(a-1)^2(b-1)^2(qa^{-1}, qa, bq; q)_{\infty} \sqrt{\pi}l^{\frac{3}{2}}}$$

- Phase A_3 (低密度相 3)

$$\langle n_j \rangle = \tilde{\alpha} - \frac{(1-ab)(1-(aq)^{-1})}{(1-b(aq)^{-1})(1+aq)} \left[\frac{(1+aq)(1+(aq)^{-1})}{(1+a)(1+a^{-1})} \right]^l$$

- Phase B (高密度相)

$$\langle n_j \rangle = 1 - \tilde{\beta}$$

- 共存線

$$\langle n_j \rangle = \tilde{\alpha} + (1 - 2\tilde{\alpha})\frac{j}{L}$$

6.3 相関長の相図

境界付近での粒子密度が $c_1 e^{-x/r} / x^{c_2}$ (ただし c_1, c_2 は定数、 x は境界からのサイト数) のように振舞う時 r を相関長と呼び、相関長の解析的な表示の変化が相転移に対応すると考えると、上の結果から相関長の相図は図 6 のようになる。これを粒子の流れに関する相図と比べると、図 5

の低密度相 (A) と高密度相 (B) が、 A_1, A_2, A_3 と B_1, B_2, B_3 という各々3つの部分に分かれるというのが大きな特徴である。これは図3の見ためから容易に違いを見て取ることが出来る程明らかな差ではないが、実際にデータをフィッティングして比較してみると違いが分かる。また A_3, B_3 は $q = 0$ の場合は存在しない事に注意する。実は [10] が出る前、境界で粒子の出入りのある同様な模型については $q = 0$ の時の相図が模型の詳細によらず普遍的なものなのではないかという物理的な議論があったのであるが [17]、相関長の相図に関してはそう簡単ではないことが分かった。

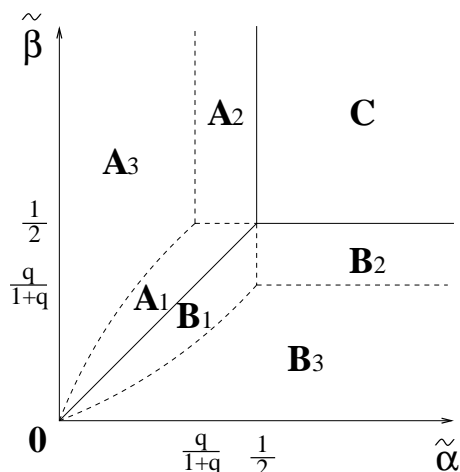


図6：相関長の相図

7 おわりに

まずこの解説では開放的境界条件での ASEP の定常状態についてのみ紹介したが、同様の方法は種々の一般化されたモデルにも適用可能であることを指摘しておく。特に多成分排他過程の定常状態は ASEP 以上に興味深い現象を示し、その理解に行列の方法と直交多項式の理論を組み合わせた解析法が威力を発揮している。

最後に、今回の話は ASEP という確率過程模型が可積分系の観点から見ても興味深い模型であるというのが主題であったが、Introduction でも触れたように非平衡統計力学における確率過程模型に可積分系の手法を適用して面白い物理現象を解明しようという研究はまだ始まったばかりであり、今後非平衡統計力学や確率過程論、さらには可積分系の発展にも大いに役立つものと期待される。

参考文献

- [1] K. Nishinari and D. Takahashi, *J. Phys. A* **31** (1998) 5439.
- [2] K. Kardar, G. Parisi and Y.-C.Zhang, *Phys. Rev. Lett.* **56** (1986) 889.
- [3] J. Krug, *Phys. Rev. Lett.* **67** (1991) 1882.
- [4] T. Sasamoto, S. Mori and M. Wadati, *J. Phys. Soc. Jpn*, **65** (1996) 2000.
- [5] B. Derrida, M. R. Evans, V. Hakim and V. Pasquier, *J. Phys. A* **26** (1993) 1493.
- [6] A. Klümper, A. Schadschneider and J. Zittarz, *J. Phys. A* **24** (1991) L955.
- [7] S. Sandow, *Phys. Rev. E* **50** (1994) 2660.
- [8] F. H. L. Essler and V. Rittenberg, *J. Phys. A* **29** (1996) 3375.
- [9] K. Mallick and S. Sandow, *J. Phys. A* **30** (1997) 4513.
- [10] T. Sasamoto, *J. Phys. A* **32** (1999) 7109; *J. Phys. Soc. Jpn.* **69** (2000) 1055.
- [11] G. Szegő, *Orthogonal Polynomials*, 4th ed., American Mathematical Society, Colloquim Publications No.23 (American Mathematical Society, Providence, 1975).
- [12] P. A. Deift, *Orthogonal Polynomials and Random Matrices: A Riemann-Hilbert Approach*, Courant Lecture Notes in Mathematics, 1999.
- [13] R. A. Askey and J. A. Wilson, *Memoirs Amer. Math. Soc.* **319** (1985).
- [14] W. A. Al-Salam and T. S. Chihara, *SIAM J. Math. Anal.* **7** (1976) 16.

- [15] R. A. Askey and M. E. Ismail, *Memoirs Amer. Math. Soc.* **300** (1984).
- [16] G. Gasper and M. Rahman, *Basic Hypergeometric Series* (Cambridge, Cambridge, 1990).
- [17] A. B. Kolomeisky, G. M. Schütz, E. B. Kolomeisky, J. P. Straley, J. Phys. A **31** (1998) 6911.

最後に確率過程模型を取り扱った成書の参考文献をいくつか挙げておく。

- [18] T. M. Ligget, *Interacting Particle Systems* (Springer-Verlag, New York, 1985).
- [19] T. M. Ligget, *Stochastic Interacting Systems: Contact, Voter, and Exclusion Processes* (Springer-Verlag, New York, 1999).
- [20] H. Spohn, *Large Scale Dynamics of Interacting Particles* (Springer-Verlag, New York, 1991).
- [21] G. M. Schütz, Exactly solvable models for many-body systems far from equilibrium, in *Phase Transitions and Critical Phenomena*, Vol 20, C. Domb and J. L. Lebowitz eds. (Academic, London, 2000).
- [22] B. Schmittmann and R. K. P. Zia, Statistical mechanics of driven diffusive systems, in *Phase Transitions and Critical Phenomena*, Vol 17, C. Domb and J. L. Lebowitz eds. (Academic, London, 1994).