

# 1 次元確率模型の時間発展：数値くりこみ法によるアプローチ

日永田 泰啓 (佐賀大 CNC) & 笹本 智弘 (千葉大・理)

## 1 はじめに

交通流の単純なモデルとして、また、非平衡統計力学を研究する上での重要なモデルとして1次元非対称(単純)排他過程 (asymmetric (simple) exclusion process, 略して ASEP) 模型<sup>1</sup> と呼ばれる確率模型がある。これは、粒子たちが排他的な相互作用を及ぼしあって1次元格子上をホッピングする模型である。系のいちばん左端からは粒子が注入され、系のいちばん右端からは粒子が取り除かれる。「非対称」と呼ばれるのは、決められた方向へホップする確率が高いからである。

我々はこれまでこれらの模型の定常状態の性質(行列積型定常状態の存在条件と、その条件下での構成方法<sup>2</sup> や、行列積型定常状態「近傍」の階数の落ち方<sup>3</sup> について調べてきた。その一部については、前回の本シンポジウムでも発表した。

今回の発表では、時間発展について話したい。この背景は次の通りである：時間発展を扱う手法として、従来の、厳密解等の解析的手法、モンテカルロ・シミュレーションに加えて、密度行列くりこみ群の方法(DMRG)<sup>4</sup> が使われつつある。<sup>5</sup> DMRG で扱われている時間発展は(今のところ)主に強相関量子系が対象とされており、確率模型は対象にされてない。そこで、確率模型の時間発展を研究するツールとしての、DMRG の可能性を探ってみようと思った次第である。

講演では、ASEP model の一つについて、実際に計算してみた結果について報告する。<sup>6</sup>

## 2 Sublattice Parallel Update Model

ASEP model は時間発展規則で分類される。まず模型の時間発展が連続時間で記述されるものなのか、離散時間で記述されるものなのかで分類される。後者の場合は単位時間ごとの時間発展をどのような規則で行うか、という観点から更に分類される。

本講演で扱う模型は、離散時間で発展し、“sublattice update”(SU) と呼ばれる方式で時間発展する。<sup>7</sup> 本節では SU で時間発展する(1次元)ASEP model(以下 SU model と書く)を、説明する<sup>8</sup>。§1 と同じく1次元格子(システムサイズは偶数  $L$  とする)上を粒子が排他的にホップする模型を考える。 $\tau_k = 0, 1 (1 \leq k \leq L)$  でサイト  $k$  の粒子の個数を表すことにする。

まず「ローカルな状態更新」を定義する。隣接2サイトの状態  $(\tau_k, \tau_{k+1})$  が  $(1, 0)$  なら確率  $p$  で  $(0, 1)$  に変え(右隣へのホッピングを表す)、 $(0, 1)$  なら確率  $q$  で  $(1, 0)$  に変え(左隣へのホッピング

<sup>1</sup>参考文献としては、たとえば、次のものがある：笹本智弘：物性研究 79(2003)881.

<sup>2</sup>Y.Hieida et al.: J.Phys.A:Math.Gen.37(2004)9873(preprint version: cond-mat/0403235v2). 2004 年度の本研究会講演集には、離散時間模型の場合の構成方法を示してある。

<sup>3</sup>物理学会 2005 年春の学会の講演 25pYC-6

<sup>4</sup>review としては、U. Schollwöck:cond-mat/0409292

<sup>5</sup>review としては、U. Schollwöck:cond-mat/0502470

<sup>6</sup>本講演は、2005 年 9 月の日本物理学会(秋季大会)での発表内容を一部含む。

<sup>7</sup>他の update 方法についての解説としては、たとえば N. Rajewsky et al.: J.Stat.Phys. 92(1998)151 (preprint version: cond-mat/9710316).

<sup>8</sup>この模型については次の論文を参照。ただし、ここではその論文のモデルにおいて  $\gamma = \delta = 0$  としたものを扱っている。A. Honecker et al.: J.Stat.Phys. 88(1997)319 (preprint version: cond-mat/9606053).

を表す)、(0,0)または(1,1)なら、何もしない。これらを(何もしない最後の場合も含めて)「ローカルな状態更新」と呼ぶことにする。この更新規則は隣接2サイトに対する転送行列(ローカルな転送行列)  $T$  で表現できる。

SU model における各単位時間ごとの状態更新は次のように定義される：まず  $\tau_L = 1$  なら確率  $\beta$  で  $\tau_L = 0$  とする。これは右端サイトに対する転送行列(ローカルな転送行列)  $R$  で表現できる。 $\tau_1 = 0$  なら確率  $\alpha$  で  $\tau_1 = 1$  とする。これは左端サイトに対する転送行列(ローカルな転送行列)  $\mathcal{L}$  で表現できる。次に隣接2格子の状態  $\{(\tau_k, \tau_{k+1})\}_{k=2,4,\dots,L-2}$  それぞれに対し、ローカルな状態更新を行う。最後に、隣接2格子の状態  $\{(\tau_k, \tau_{k+1})\}_{k=1,3,\dots,L-1}$  のそれぞれに対し、ローカルな状態更新を行う。まとめると、全系に対する時間発展演算子(「グローバルな転送行列」)は、

$$T := \underbrace{(T \otimes \dots \otimes T)}_{(L/2) \text{ 個の tensor 積}} \left( \mathcal{L} \otimes \underbrace{T \otimes T \otimes \dots \otimes T}_{(L/2-1) \text{ 個の tensor 積}} \otimes R \right) \quad (1)$$

で表現できる。時刻  $t$  での「確率分布ベクトル」 $\vec{P}(t)$ (その成分は、確率分布  $P(\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_L; t) =: P(\{\tau\}; t)$ ) は、時刻  $t = 0$  での「初期確率分布ベクトル」 $\vec{P}(0)$ (その成分は、 $P(\{\tau\}; t = 0)$ ) から

$$\vec{P}(t) = T^t \vec{P}(0) \quad (2)$$

によって求められる。

## 3 方法

### 3.1 DMRG 風計算

本研究で「DMRG 風計算」と称しているのは以下のような計算方法のことである

確率分布の時間発展の計算(式(2))を計算機で行うには、限界がある。 $L$ を増やすと、 $T$ の行次元、列次元が  $2^L$  で大きくなるからだ。

そこで、次のようなアイデアを使う(これが「DMRG 風計算」の基本的なアイデアである)。まず、

$$X_t Y_t \approx \text{Id} \quad (3)$$

を満たすような2種類の行列  $X_t$ (列次元:  $d(m)$ )、 $Y_t$ (行次元:  $d(m)$ )を用意する(特異値分解を用いる)。ここで  $\text{Id}$  は  $T$  と同じサイズの恒等行列であり、添字の  $t$  は時間を表すラベルである。更に  $m$  は近似をコントロールするパラメタであり、その値が大きい方が良い近似になる。 $d(m)$  は  $m$  のある単調増加関数である。そうすると、たとえば、式(2)右辺の、 $t = 2$  の計算は次のようにできる：

$$T^2 \vec{P}(0) \approx (X_3 \quad Y_3) T (X_2 \quad Y_2) T \vec{P}(0) \quad (4)$$

$$\approx X_3 \quad (Y_3 T X_2) \quad \left( Y_2 T \vec{P}(0) \right) \quad (5)$$

$$=: X_3 \quad \widetilde{T}_2 \quad \widetilde{\vec{P}}(0) \quad (6)$$

ここで、 $Y_3 T X_2 =: \widetilde{T}_2$  の行次元、列次元と  $Y_2 T \vec{P}(0) =: \widetilde{\vec{P}}(0)$  の次元は  $d(m) (\leq 2^L)$  である。式(6)そのものではなく、式(6)から計算する物理量が計算できればいいなら、 $X_3$  の行次元が問題にならない場合(たとえば式(7))がある。この場合は、式(6)の計算が計算機で実行できればいい。 $d(m)$  が計算機で扱える次元である限り  $m$  を増やす事ができる。この範囲内で  $m$  を動かした時の物理量の振舞いを見て、近似無しの時の物理量の振舞いを予測しようというわけである。

### 3.2 初期条件

DMRG 風計算は、行列積でよく近似できる初期条件を扱える (§3.1 で説明できなかった部分から出てくる制約)。§4 で述べる計算結果の初期条件は全て同じで、1次元有限格子のちょうど左半分だけに粒子を詰めたものである。

### 3.3 計算する量 —1点関数—

本講演で示す、計算した量は全て1点関数である。時刻  $t$  での、 $k$  番目のサイトにおける1点関数  $\langle \tau_k(t) \rangle$  の定義は次の通りである (ただし  $\sum_{\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_L} =: \sum_{\{\tau\}}$  と略記) :

$$\langle \tau_k(t) \rangle := \frac{\sum_{\{\tau\}} \tau_k(t) P(\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_k, \dots, \tau_L; t)}{\sum_{\{\tau\}} P(\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_k, \dots, \tau_L; t)} \quad (7)$$

### 3.4 厳密対角化風計算

$L = 10$  のように小さい  $L$  の時は、式 (2) の  $T$  を (厳密対角化計算をやる時のように) 数値的に計算できる。この  $T$  を用いて、式 (2) によって  $P(\{\tau\}; t)$  を求めることができる。ということは式 (7) によって  $\langle \tau_k(t) \rangle$  を求める事ができる。これを  $\langle \tau_k(t) \rangle_{\text{ED}}$  と表現することにする。このように、数値的な  $T$  経由で  $\langle \tau_k(t) \rangle_{\text{ED}}$  を求めることを、厳密対角化風計算と呼ぶことにする。

### 3.5 相対誤差の最大値

相対誤差 ( $R(k; t)$  と記す) は、上述の  $\langle \tau_k(t) \rangle_{\text{ED}}$  と DMRG 風計算による  $\langle \tau_k(t) \rangle$  (式 (7)) とから次のように求めた :

$$R(k; t) := \left| \frac{\langle \tau_k(t) \rangle - \langle \tau_k(t) \rangle_{\text{ED}}}{\langle \tau_k(t) \rangle_{\text{ED}}} \right| \quad (8)$$

§4 での「相対誤差の最大値」とは「 $\max_k R(k; t)$ 」の意味である。

## 4 結果

まず、 $L = 10, p = 0.2, q = 0, \alpha = 0.02, \beta = 0.03$  の場合<sup>9</sup>に、 $t = 0 \sim t = 1000$  までの時間発展を計算した。図 1 の左図は、とくに系の右端サイトでの1点関数の時間発展を表している。この左図には、比較用に厳密対角化風計算による結果もプロットしてあるが、 $m = 4$  の結果とほとんど重なってしまっている。

図 1 の右図は、各時刻ごとに、「相対誤差の最大値」 (§3.5) をプロットしたものである。 $m \geq 4$  の時は、縦軸の値が  $t = 50$  ぐらいまで増大し、それ以降の  $t$  では減少している。

## 5 考察

DMRG 風計算の原理を考慮すると、 $m = 2^5 = 32$  を使った DMRG 風計算は、厳密対角化風計算をやっているのと同じことになると予想される (本稿では説明できなかったが)。実際、図 1 の右図のように、 $\max_k |\langle \tau_k(t) \rangle - \langle \tau_k(t) \rangle_{\text{ED}}|$  を計算すると、 $10^{-14}$  の order となることが分かった。

逆に、小さい  $m$  (たとえば  $m = 1, 2$ ) の時にはでたらめな結果を出す、と図 1 から読み取れる。

<sup>9</sup>low density phase. このパラメタセットに対しては 1, 2 次元の行列積型定常状態は存在しない。

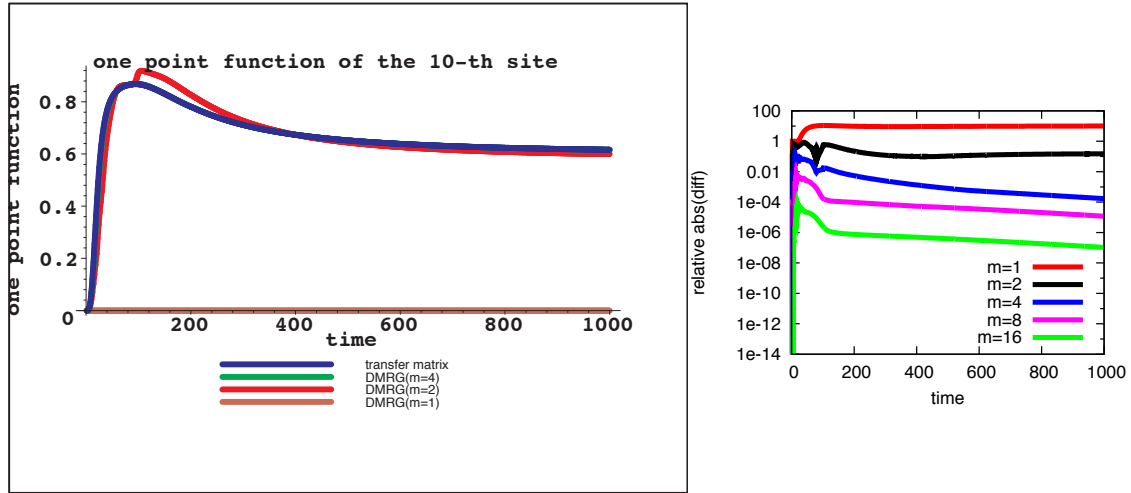


図 1:  $L = 10, p = 0.2, q = 0, \alpha = 0.02, \beta = 0.03$  の場合に、 $t = 0 \sim t = 1000$  まで各  $m$  に対し DMRG 風計算で時間発展させたもの。左図は、時間 (横軸) の関数としての、(系の右端サイトの)1 点関数 (縦軸)。比較用として  $\langle \tau_{10}(t) \rangle_{ED}$  もプロットしている (凡例の “transfer matrix”)。が、 $m = 4$  の結果とほとんど重なってしまっている。右図は各  $m$  に対して「 $\max_k R(k; t)$ 」 (縦軸) を時間  $t$  (横軸) の関数としてプロットしたもの。

中間的な  $m$  の値 (今回の計算では  $m = 4, 8, 16$ ) では、相対誤差の最大値「 $\max_k R(k; t)$ 」が、最初は、 $t$  の増大とともに増え、やがて減少に転じる。この振舞いは、次のように説明できるかもしれない: 転送行列をかけていくと最終的には定常状態が得られるはずである (power method を実行していることになるから)。一方、定常状態の DMRG 計算は、小さい  $m$  ( $m = 2, 3$  程度) で良い結果を出す事が分かっている。<sup>10</sup> よって中間的な大きさの  $m$  の DMRG 風計算にとっては、「中間的な」時刻 (初期状態直後でもなければ、終状態に近くもない時刻) での計算が一番シビアなはず、というわけである。

今回やった計算の範囲では、上のシビアな計算は  $m = 4$  で乗り切れるということが分かった。すなわち、 $m = 4$  を与えれば (図 1 の左図のスケールでは) グラフ上、厳密対角化風計算と区別がつかない。

## 6 今後の課題

今後の課題として以下のものがある:

- 「中間的な」時刻で相対誤差が大きくなる (§4, §5) のを、防げないか?
- DMRG 風計算で、任意の初期条件を扱えるようにできるか?
- カレント、相関関数の計算はできるか?
- 指定した誤差で計算するために必要な  $m$  を予想可能か?
- 時間発展を記述する厳密な (もしくは良い近似を与える) (有限次元) 行列積型状態を探せるか?

<sup>10</sup>Y. Hieida: J. Phys. Soc. Jpn. 67 (1998) 369.