

サイトによらない行列積型ベクトルの再構成法

佐賀大 CNC 日永田 泰啓¹
東工大・理 笹本 智弘²

1 はじめに

1 サイトあたり N 状態を取り得る 1 次元確率過程模型 (以後、「1 次元 N 状態確率過程模型」と呼ぶ)[1] には、厳密な「(サイトによらない) 行列積型定常状態ベクトル」(matrix-product stationary state; 以下では MPSS と略す) [2] を持つものがある。このタイプの定常状態を使うと、カレントや相関関数を比較的簡単に、しかも厳密に求めることが可能となる。この時、 q 直交多項式の理論が役立つ事も明らかにされている [3, 4, 5]。最近では、MPSS が非平衡統計力学での「自由エネルギー」の計算 [6] にも用いられた。

行列積型ベクトルそのものは、あちこちに現れる。確率過程模型での最初の発見 [7] よりも先に、(行列積型基底状態ベクトルとして) 量子スピン模型で発見されており、基底状態での厳密な物理量の計算を可能としていた [8]。その後登場した密度行列くりこみ群の方法 (Density Matrix Renormalization Group; DMRG と略される事が多い)[9] においては、近似的な行列積型ベクトルが重要な役割を果たしている事が明らかにされている (DMRG の高次元模型への拡張 [10] においては、行列積をテンソル積へと拡張したものが用いられる事もある)。

話を厳密な MPSS に戻すと、1 次元 N 状態確率過程模型の厳密な MPSS をシステマティックに求める方法は明らかでなかった。これ故に、厳密な MPSS はごく少数知られているに過ぎない。システマティックに求める上での、数値的なヒントを得る方法は Peschel と Kaulke らによって与えられていた [11]: 彼等は DMRG における密度行列のスペクトラムを観察することが厳密な MPSS を数値的に発見するのに重要だとして主張していた。我々は彼等の主張について考え、まず数値的な厳密解を構成する方法を作った。そして数式処理の助けも借りると厳密解を求めることもできることに気付き、さらに方法を少し見通しよくできることが分かった。本稿で述べるのは、その厳密解を求める方法である。

本研究の目的は MPSS をシステマティックに求める方法を明らかにすることである。現在までのところ広いクラスの模型に使える方法を明らかに出来たので本稿で述べる。なお、本稿では限られた紙面ゆえに書き切れなかったこともある。話を分かりやすくするために、具体例に特化し

¹E-mail: hieida@cc.saga-u.ac.jp

²E-mail: sasamoto@stat.phys.titech.ac.jp

て記述した部分もある。より詳しい情報、一般的な表現等は出版予定の論文 [12] の方を見て頂きたい。

以下の内容は次の通りである：§2 で得られた結果をまとめる。話を具体的にするために §3 で 1 次元非対称排他過程 (Asymmetric Simple Exclusion Process; 以下では ASEP と略す) 模型 [13] を紹介する。§4 では結果 (§2) の詳細について述べる。§5 では応用例について述べ、最後の節 (§6) では、今後の課題について述べる。

2 結果

1 次元 N 状態確率過程模型の中には、特別なモデル・パラメタにおいては、その定常状態ベクトル $\vec{P}_L$ が厳密に M 次元の正方行列 $\{A(0), A(1), \dots, A(N-1)\}$ の積で書けるものがある。すなわち k 番目 ($k = 1, 2, \dots, L$) のサイト (系のサイズは L) の状態を $i_k = 0, 1, 2, \dots, (N-1)$ で表すと、ある M 次元横ベクトル $\langle W|$ 、 M 次元縦ベクトル $|V\rangle$ が存在して $\vec{P}_L$ の各成分を

$$P_L(i_1, i_2, \dots, i_L) = \frac{1}{Z_L} \langle W|A(i_1)A(i_2)A(i_3) \dots A(i_L)|V\rangle \quad (1)$$

と書くことが出来るものがある (Z_L は確率保存則を満たすための規格化定数)。このタイプの定常状態ベクトルを本講演では厳密な MPSS と呼ぶ。使用する行列が (L に依らずに) N 種類 $\{A(0), A(1), \dots, A(N-1)\}$ だけなので、density profile やカレント等を厳密に求めることができる。

式 (1) のタイプの厳密な MPSS を、1 次元 N 状態確率過程模型に対してシステマティックに求める方法は無いのか、という問題に我々は興味を持った。

先に述べたように、我々がこれまで研究した結果、以上の問題に (部分的ながら) 答えることが可能になった。すなわち、1 次元 N 状態確率過程模型に対して、次の 3 つの手続きを明らかにできた：

手続き [1] L の小さい系に対する定常状態ベクトルから、＜厳密な MPSS が存在するモデル・パラメタ領域＞の候補を求める手続き³

手続き [2] 厳密な MPSS が存在するモデル・パラメタに対して、式 (1) における $(N \leq) M$ 次元行列積表現 $\{\langle W|, |V\rangle, A(0), A(1), \dots, A(N-1)\}$ を、 L の小さい系に対する定常状態ベクトルから構成する手続き

手続き [3] $N = M$ の場合に、[2] で得られた表現が任意の L で正しいことを保証する手続き

以下では、厳密な MPSS しか扱わないので、「厳密な」という形容詞は省く。

³この手続きについて講演では「Gauss の消去法を使う」と述べた。しかし、それだけでは不十分な場合があることが後に分かった (§4.1)。

3 具体例 — ASEP model[13] —

話を具体的にしよう。そのために ASEP model を導入する。

ASEP model[13] とは、1次元格子点を粒子がホッピングする模型である (図 1)。各格子点は2つの状態のどちらかしか取れないとする。すなわち、粒子が一つあるか、ゼロであるか、である。時間は連続時間で進むとする。粒子は左隣に rate q で、右隣に rate 1 でホッピングする。ただし、ホップしようとする先に既に粒子が居たらホップできないとする。この1次元格子の左端においては (そこに粒子が居なければ) rate α で粒子が供給され、右端からは (そこに粒子が居れば) 粒子が rate β で取り除かれる。

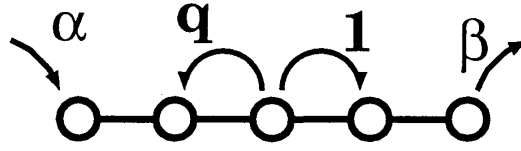


図 1: 1次元非対称排他過程 (ASEP) 模型

本研究で問題にしている定常状態ベクトル $\vec{P}_L$ は、

$$H\vec{P}_L = 0 \quad (2)$$

の解である。ここで H はモデル毎に定まる “total hamiltonian” である。 $N = 2$ で、nearest neighbor 型 interaction の場合

$$H = h^{(L)} + \sum_{i=1}^{L-1} h_i + h^{(R)} \quad (3)$$

$$h_i \equiv I^{\otimes(i-1)} \otimes h_{\text{int}} \otimes I^{\otimes(L-i-1)}, \quad (4)$$

$$h^{(L)} \equiv h^{(\ell)} \otimes I^{\otimes(L-1)} \quad \text{and} \quad h^{(R)} \equiv I^{\otimes(L-1)} \otimes h^{(r)}. \quad (5)$$

となる。ここで I は 2次元単位行列、 h_{int} は interaction hamiltonian を表し、 $h^{(\ell)}$ 、 $h^{(r)}$ はそれぞれ左端、右端を表す。省略記法として $B^{\otimes k} \equiv \underbrace{B \otimes B \otimes B \otimes \cdots \otimes B}_{k \text{ 個の直積}}$ を使った。たとえば上記

ASEP model なら、

$$h_{\text{int}} \equiv \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & q & -1 & 0 \\ 0 & -q & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (6)$$

$$h^{(\ell)} \equiv \begin{bmatrix} \alpha & 0 \\ -\alpha & 0 \end{bmatrix} \quad \text{and} \quad h^{(r)} \equiv \begin{bmatrix} 0 & -\beta \\ 0 & \beta \end{bmatrix}, \quad (7)$$

となる。各サイトに粒子が1個存在する状態を A 、粒子がゼロ個の状態を $\emptyset$ で表すとすると、式 (6) の行列要素の、行、列それぞれの添字は共に $(|\emptyset\emptyset\rangle, |\emptyset A\rangle, |A\emptyset\rangle, |AA\rangle)$ のように順序付けられている。

4 詳細

以下では、§2 で述べた結果の詳細について述べる。

4.1 手続き [1] について

小さな L について式 (2) を (たとえば数式処理システムを使って) 解く。その解 $\vec{P}_L$ の成分をあるルールで並びかえることで行列を作る。この行列は、 $\vec{P}_L$ が M 次元行列積表示を持つようなモデル・パラメタの時に rank が M まで落ちる (rank 落ちする) という性質がある。逆に、rank 落ちする条件から「行列積表示を持つ条件の候補」を求める。rank の計算には、基本変形 [14] を用いる。

以下、ASEP model に対して計算した例を示す。 $L = 4$ について式 (2) を解く。その解 $\vec{P}_{L=4}$ の成分 $P(i_1, i_2, i_3, i_4)$ を並びかえることで行列を作る。具体的には、

$$\vec{P}_{L=4} = \begin{bmatrix} P_{L=4}(0, 0, 0, 0) \\ P_{L=4}(0, 0, 0, 1) \\ P_{L=4}(0, 0, 1, 0) \\ P_{L=4}(0, 0, 1, 1) \\ \vdots \\ P_{L=4}(1, 1, 1, 0) \\ P_{L=4}(1, 1, 1, 1) \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} p_1 \\ p_2 \\ p_3 \\ p_4 \\ \vdots \\ p_{15} \\ p_{16} \end{bmatrix} \quad (8)$$

とおくと、並び換え後の行列は

$$\begin{bmatrix} p_1 & p_2 & p_3 & p_4 \\ p_5 & p_6 & p_7 & p_8 \\ p_9 & p_{10} & p_{11} & p_{12} \\ p_{13} & p_{14} & p_{15} & p_{16} \end{bmatrix} \equiv R \quad (9)$$

とする。たとえば $(M =) 2$ 次元行列積表現を持つならば、この行列 R の rank が 2 に落ちねばならないことが証明できる。逆に、 R の rank が 2 になる条件には $(M =) 2$ 次元行列積表現を持つ条件が含まれているはず、というわけである。

実際に R を基本変形していく [14] (R がなるべく単位行列になるように、 R の左上成分から右下成分へと基本変形していく) と、

$$f_{\text{ASEP1}} \equiv \alpha + \beta - 1 + q \quad (10)$$

$$f_{\text{ASEP2}} \equiv q^2 + q(\alpha + \beta - 1) + \alpha\beta. \quad (11)$$

で定義される f_{ASEP1} 、 f_{ASEP2} が共にゼロでない時、 R は

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -\frac{q+\beta}{\beta} \\ 0 & 0 & 1 & \beta^{-1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (12)$$

にまで基本変形できることが分かる。つまり、この行列 R の rank は 3 である。これに対し、もし、 $f_{\text{ASEP1}} = 0$ なら、 R を

$$\begin{bmatrix} 1 & -\frac{-1+\beta+q}{\beta} & -\frac{-1+\beta+q}{\beta} & \frac{(-1+\beta+q)^2}{\beta^2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (13)$$

にまで基本変形できるので、rank が 1 と分かる。つまり、 $f_{\text{ASEP1}} = 0$ は $(M=)$ 1 次元表現の候補と分かる。もし、 $f_{\text{ASEP2}} = 0$ なら、 R は、

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & -\frac{(-1+\beta+q)^2 q}{\beta(q+\beta)} & -\frac{(-1+\beta+q)^2 q}{(q+\beta)\beta^2} \\ 0 & 1 & -\frac{-2q-\beta+q^2+\beta q}{q+\beta} & -\frac{(-1+\beta+q)(2q+\beta)}{\beta(q+\beta)} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (14)$$

にまで基本変形できるので、rank が 2 と分かる。つまり、 $f_{\text{ASEP2}} = 0$ は $(M=)$ 2 次元表現の候補と分かる。

知られている厳密解 (たとえば [3] を参照) によれば、実際に $f_{\text{ASEP1}} = 0$ 、 $f_{\text{ASEP2}} = 0$ のそれぞれは $(M=)$ 1 次元表現、 $(M=)$ 2 次元表現が存在する為の条件である。

4.2 手続き [2] について

以下、 $N = M = 2$ に特化して説明する。行列積表現に対し、略記法 $A(0) \equiv E$ 、 $A(1) \equiv D$ を用いる。相似変換：

$$\langle W|S \equiv \langle \tilde{W}| \quad S^{-1}ES \equiv \tilde{E} \quad (15)$$

$$S^{-1}|V\rangle \equiv |\tilde{V}\rangle \quad S^{-1}DS \equiv \tilde{D} \quad (16)$$

に注目する。この変換で

$$\vec{P}_2 = \frac{1}{Z_2} \langle W| \begin{pmatrix} E \\ D \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} E \\ D \end{pmatrix} |V\rangle \quad (17)$$

は不変である。ここで、相似変換行列 S を次のように固定する (S^{-1} の存在は仮定)：

$$(E|V) D|V\rangle) \equiv S \quad (18)$$

以下で使う省略記法を導入する：

$$P^{m,n} \equiv \frac{1}{Z_{m+n}} \langle W | \begin{pmatrix} E \\ D \end{pmatrix}^{\otimes m} (E \ D)^{\otimes n} | V \rangle, \quad (19)$$

$(E \ D)S = S(\tilde{E} \ \tilde{D})$ という相似変換の性質を用いると、

$$\begin{aligned} Z_3 P^{1,2} &\equiv \langle W | \begin{pmatrix} E \\ D \end{pmatrix} (E \ D) \otimes (E \ D) | V \rangle = \langle W | \begin{pmatrix} E \\ D \end{pmatrix} (E \ D) S \\ &= \langle W | \begin{pmatrix} E \\ D \end{pmatrix} S(\tilde{E} \ \tilde{D}) = \langle W | \begin{pmatrix} E \\ D \end{pmatrix} (E \ D) | V \rangle (\tilde{E} \ \tilde{D}) \end{aligned} \quad (20)$$

つまり、

$$Z_3 P^{1,2} = Z_2 P^{1,1}(\tilde{E} \ \tilde{D}) \quad (21)$$

が導かれる。 $Z_3 P^{1,2}$ 、 $Z_2 P^{1,1}$ は、それぞれ $\vec{P}_{L=3}$ 、 $\vec{P}_{L=2}$ を行列化したものなので、小さいサイズ L に対する式 (2) を解いて求めることができる。 $\tilde{E}$ 、 $\tilde{D}$ は式 (21) より

$$\begin{aligned} \tilde{E} &= (Z_2 P^{1,1})^{-1} (Z_3 P^{1,2} \text{ の左半分}) \\ \tilde{D} &= (Z_2 P^{1,1})^{-1} (Z_3 P^{1,2} \text{ の右半分}) \end{aligned}$$

と求まることになる。

4.3 手続き [3] について

この節も、 $N = M = 2$ に対して説明する (略記法 $A(0) \equiv E$ 、 $A(1) \equiv D$ を用いる)。

手続き [1] 及び [2] で求めた行列積表現が任意の L で正しいことは、式 (3)~(5) の nearest neighbor 型相互作用の場合には次の 3 つ組を満たす $\{E_c, D_c\}$ の存在を示せたなら保証される：

$$h_{\text{int}} \left[\begin{pmatrix} \tilde{E} \\ \tilde{D} \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} \tilde{E} \\ \tilde{D} \end{pmatrix} \right] = \begin{pmatrix} E_c \\ D_c \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} \tilde{E} \\ \tilde{D} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \tilde{E} \\ \tilde{D} \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} E_c \\ D_c \end{pmatrix} \quad (22)$$

$$\langle \tilde{W} | \otimes h^{(\ell)} \begin{pmatrix} \tilde{E} \\ \tilde{D} \end{pmatrix} = -\langle \tilde{W} | \otimes \begin{pmatrix} E_c \\ D_c \end{pmatrix} \quad (23)$$

$$h^{(r)} \begin{pmatrix} \tilde{E} \\ \tilde{D} \end{pmatrix} \otimes |\tilde{V}\rangle = \begin{pmatrix} E_c \\ D_c \end{pmatrix} \otimes |\tilde{V}\rangle. \quad (24)$$

$N = M$ の場合、式 (22) と式 (24) は、 $\{E_c, D_c\}$ について解ける。その場合は、我々の S (式 (18)) の特性により解けるのである：

$$\begin{pmatrix} E_c \\ D_c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{E} & {}^t h^{(r)} \\ \tilde{D} & {}^t h^{(r)} \end{pmatrix} + \Xi \left\{ h_{\text{int}} \left[\begin{pmatrix} \tilde{E} \\ \tilde{D} \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} \tilde{E} \\ \tilde{D} \end{pmatrix} \right] \right\} \otimes |\tilde{V}\rangle, \quad (25)$$

ここで、 ${}^t h^{(r)}$ の t は転置を表し、 Ξ は次のようにベクトルから行列へ map する演算子である：

$$\Xi \left\{ \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \\ A_4 \end{pmatrix} \right\} = \begin{bmatrix} A_1 & A_2 \\ A_3 & A_4 \end{bmatrix}. \quad (26)$$

式 (25) で与えられる $\{E_c, D_c\}$ が式 (22)～(24) を満たすことが確認できれば、手続き [1] 及び [2] で求めた行列積表現が任意の L で正しいことが保証される、というわけである。

5 応用例

1. §3 で紹介した ASEP model

- 表現次元 M が 2,3,4 の時、手続き [1] と手続き [2] が厳密解と一致することを確認した。
- 表現次元 M が 2 の時、手続き [3] が厳密解と一致することを確認した。

2. Jafarpour model([15])

- この模型の定義は次のようなものである：左境界において粒子の input/output がある。右境界においては input/output は無い。境界以外では hop, 重合、乖離、すなわち次に挙げる過程がある。

$$\emptyset + A \xrightarrow{\text{rate:}q} A + \emptyset \quad A + \emptyset \xrightarrow{\text{rate:}q^{-1}} \emptyset + A \quad (27)$$

$$A + A \xrightarrow{\text{rate:}q} A + \emptyset \quad A + A \xrightarrow{\text{rate:}q^{-1}} \emptyset + A \quad (28)$$

$$\emptyset + A \xrightarrow{\text{rate:}\Delta q} A + A \quad A + \emptyset \xrightarrow{\text{rate:}\Delta q^{-1}} A + A \quad (29)$$

- この模型に対して 2 次元表現に対して手続き [1] ～ [3] で得られるものが厳密解 [15] と一致することを確認できた。

3. Jafarpour model(bulk part) と ASEP model(boundary part) の hybrid model

- この model は、bulk での interaction は、上の Jafarpour model と同じで、boundary は上の ASEP model と同じというものである。
- 手続き [1] ～ [3] を使って新しい 2 次元表現を得た。

6 今後の課題

今後の課題として以下のようなものが考えられる。

- 本稿の方法で様々なモデルの行列積解を調べてみる (意外なモデルに MPSS が存在するかもしれない)。
- §4.3 で述べたことを $N \neq M$ の場合に拡張すること
- 本稿での方法を、以下の各点で拡張。
 - $N > M$ である M 次元行列積表現も扱えるような拡張

- 離散時間モデルへの拡張
- 周期的境界条件を課されたモデルも扱えるように拡張
- 式 (4) の h_{int} の相互作用を nearest neighbor 型よりも長い range にしたモデルへの拡張
- 1次元より大きい次元のモデル (たとえば ladder model) への拡張
- 定常状態以外の matrix product state の構成を可能にするような拡張
- 量子スピン系モデルへの拡張

以上に加えて、本稿でのアイデアを数値計算上に生かせないか検討したい。たとえば、非平衡統計力学モデルへの DMRG の方法の拡張 [16, 11, 17, 18, 19, 20, 21, 22] をより優れたものにするために使えないか？

謝辞

発表の機会を作って下さいました世話人の皆様、ありがとうございました。

参考文献

- [1] review としては、たとえば H. Hinrichsen: Adv. Phys. 49 (2000) 815.
- [2] review としては、たとえば B. Derrida: Phys. Rep. 301(1998)65.
- [3] T. Sasamoto: J. Phys. A: Math. Gen. **32**(1999)7109; J. Phys. Soc. Jpn **69**(2000) 1055.
- [4] R. A. Blythe, M. R. Evans, F. Colaiori and F. H. L. Essler: J. Phys. A: Math. Gen. **33**(2000) 2313.
- [5] M. Uchiyama, T. Sasamoto and M. Wadati: cond-mat/0312457
- [6] B. Derrida, J. L. Lebowitz, E. R. Speer: Phys. Rev. Lett. 87(2001)150601; J. Stat Phys. 107(2002)599; Phys. Rev. Lett. 89(2002)030601; J. Stat Phys. 110(2003)775.
- [7] B. Derrida, M. R. Evans, V. Hakim and V. Pasquier: J. Phys. A: Math. Gen. 26 (1993) 1493.
- [8] I. Affleck , T. Kennedy , E. H. Lieb and H. Tasaki : Phys. Rev. Lett. 59(1987) 799.
- [9] *Lecture Note in Physics*: Density-Matrix Renormalization, Eds. I. Peschel et al. , Springer (1999).
- [10] A. Gendiar, N. Maeshima and T. Nishino: Prog. Theor. Phys. 110(2003)691(its preprint version is cond-mat/0303376); N. Maeshima, Y. Hieida, Y. Akutsu, T. Nishino and K. Okunishi: Phys. Rev. E64 (2001) 016705.

- [11] I. Peschel and M. Kaulke: “Non-Hermitian Problems and Some Other Aspects ” in the reference [9].
- [12] preprint を cond-mat(<http://jp.arxiv.org/archive/cond-mat>)に出す予定である。
- [13] たとえば G.M.Schütz: *Exactly solvable models for many-body systems far from equilibrium* in *Phase Transitions and Critical Phenomena* (ed. C. Domb and J. Lebowitz, Academic Press, London 2000) , 笹本智弘 : 物性研究 **79**(2003)881.
- [14] 伊理正夫「線形代数 I」岩波書店 , 1993 年, p.57
- [15] F. H. Jafarpour: J. Phys. A: Math. Gen. 36 (2003) 7497(preprint version: cond-mat/0301407v2).
- [16] Y. Hieida: J. Phys. Soc. Jpn **67**(1998) 369.
- [17] E. Carlon, M. Henkel and U. Schollwöck: Eur. Phys. J. B 12(1999) 99.
- [18] A. Kemper, A. Schadschneider and J. Zittartz: J. Phys. A: Math. Gen. 34(2001) L279.
- [19] T. Enss and U. Schollwöck: J. Phys. A: Math. Gen. 34(2001)7769.
- [20] J. Hooyberghs, E. Carlon and C. Vanderzande: Phys. Rev. E 64(2001) 036124.
- [21] E. Carlon, M. Henkel, U. Schollwöck: Phys. Rev. E 63(2001) 036101.
- [22] A. Kemper, A. Gendiar, T. Nishino, A. Schadschneider and J. Zittartz: J. Phys. A: Math. Gen. 36(2003)29.