

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 28 年 6 月 14 日現在

機関番号：13901

研究種目：挑戦的萌芽研究

研究期間：2012～2015

課題番号：24654121

研究課題名(和文) スピン格子模型における厳密解と数値解析の生物系への応用

研究課題名(英文) Applications of exact solutions and numerical techniques in lattice spin models to biological systems.

研究代表者

南 和彦 (Minami, Kazuhiko)

名古屋大学・多元数理科学研究科・准教授

研究者番号：40271530

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,300,000円

研究成果の概要(和文)：量子スピン鎖のハミルトニアンを構成する演算子が特定の交換関係をみたすとき、その演算子系を free fermion系に変換し分配関数を厳密に導出する方法を見出した。つまり、条件をみたす演算子系から、対角化できるHamiltonianとそれを対角化する変換が同時に得られる。これにより一般化された1次元XY模型、2次元Ising模型、およびより複雑な可算個の模型がいずれも同じ手続きで解ける。また、2次元Ising模型と1次元XY模型の等価性の一般化、ランダムな1次元スピン1/2 Ising 模型の量子帯磁率の積分表示などの結果を得た。

研究成果の概要(英文)：It is found that the Hamiltonian can be transformed into the free fermion system, and hence its partition function can be obtained exactly, provided that the operators of the Hamiltonian satisfy specific commutation relations. A solvable Hamiltonian and a transformation that diagonalize the Hamiltonian is obtained simultaneously from a series of operators which satisfy the condition. The one-dimensional XY model, the two-dimensional Ising model, and other composite countable number of quantum spin chains are diagonalized following this procedure. The equivalence between the two-dimensional Ising model and the one-dimensional XY model is generalized, and the quantum susceptibility of the random transverse Ising chain is obtained in an integral form.

研究分野：統計物理学・数理物理

キーワード：可解模型 生物の数理モデル

1. 研究開始当初の背景

一見異なる可解模型で、実は互いに等価である組み合わせが知られている。例えば、2次元正方格子 Ising 模型は、1次元の XY 模型や transverse Ising 模型と等価である。具体的には、2次元正方格子 Ising 模型を解く際にあらわれる伝送行列は、上記の1次元量子系のハミルトニアンと可換になり、したがって同時対角化が可能で共通の固有状態を持つ。それぞれの物理量は、この共通の固有状態から計算される。

一方、生物の形態形成において、細胞選別とよばれる問題がある。これは2種類の細胞を混ぜて増殖させると、同種の細胞が互いに接着して細胞塊を形成する現象で、臓器の形成やガン組織の増殖の、基本的なプロセスであると考えられている。

この細胞選別の数理モデルのひとつ (A.Mochizuki et al., 1996) は、スピン模型の代表例である Ising 模型と、それぞれの次元で等価である。このうち2次元 Ising 模型は上記のように1次元の XY 模型に等価である。そこで、XY 模型と等価な生物系があれば、それはスピン系で知られた等価性を經由して、細胞選別の数理モデルと等価になることに気がつく。1次元の XY 模型は一般化されたランダムウォークの生成規則であると見なすことができ、このランダムウォークと細胞選別との間に等価性があることがわかる。実際、2次元細胞選別の接着確率を、拡張された1次元ランダムウォークの相関関数によって書くことができる。そしてこのランダムウォークは遺伝情報からタンパク質を生成するリポゾームの確率過程に非常に近い構造を持つ。つまりスピン系で知られた等価性を生物の問題に移植することで、一見異なる生物あるいは生命現象のシステムの間、共通の数理構造が隠されていることがわかる。

2. 研究の目的

生物あるいは数理生物の分野では、それぞれの生物が個別に研究され、その生物の数理モデルが立てられ解析されているが、異なる生物の間の構造としての共通性・普遍性という視点は、まだ希薄である。生物系では、数理モデルの解析は基本的な平均場近似や直接的な数値計算が主流であり、モンテカルロによる計算もまだ比較的少ない。

一般に、自由度を持つ少数または多数のユニットが互いに相互作用をして、全体として何らかの構造を示す系、例えば情報や物流の社会的ネットワーク、生態系の変化、生物システムに関する諸問題は、未解決の大きな問題である。この種の問題の解析には、統計力学の理論的取り扱いが、意識的に、あるいはそれとは気づかぬままに、しばしば用いられて

きた。例えば、生態系の侵入のある種の模型は、Ising 模型のダイナミクスに極めて類似しており、そこで使われる「ペア近似」は、一種の平均場近似である。またランダム性を持つネットワーク系の中には、スピングラスの構造を持つと思われるものがある。

複数の状態を持つ単位が互いに相互作用しながら全体で多体系としての性質を示すとき、これは格子模型の統計力学と、同一ではないしる類似した数理構造を持ち、統計力学の古典的な手法が利用できることは自然に納得できる。しかし、これらは多自由度ではあるが有限であり、場合によっては非一様な構造が本質的になるため、それを支配する構造は無限自由度の系と同じではなく、既知の手法が全くそのまま適切であるとは限らない。格子模型とは構造として一部共通のものを持ち、同時にいくつもの点で異なる。

これらの系に対して既に蓄積のある格子模型の手法を系統的に応用することは、長期的に見てひとつのあたらしい流れになる可能性がある。スピン系の技術的蓄積が圧倒的なので、スピン系で得られている知見を生物系に応用することは、非常に強力な武器になる。格子模型における等価性を生物系に移植し、また両分野の技術的な相互作用を図ること、それを通じて単純には移植できない両者の構造の違いを明確にすることが、さらに次の進歩への基礎になる。

生物系の数理モデルは、特に格子上で定義されている場合には、一般にスピン演算子で書き直すことが可能で、格子上のスピン模型に等価になる。本研究では、格子上のスピン模型の性質を調べ、特に厳密解や厳密な結果を得て、さらにそれらを生物系の数理モデルに応用すること、またスピン模型において成り立つ等価性等を調べ、さらに異なる生物の数理モデル間の構造としての共通性・普遍性を見出すことを目標にする。

3. 研究の方法

格子模型の自由エネルギーと物理量を厳密に導出し、またそれらの性質を厳密に議論し、これらについては成果を得た。数値計算等の格子模型で発達した手法を生物の数理モデルに系統的に応用することを目指したが、現時点ではそれに至っていない。

格子模型に関する厳密な結果を導く手法のうち、本研究の核となるのは、free fermion 系と伝送行列法である。Fermion とは、1つの量子力学的な状態に0または1つの粒子が存在できるという性質を持つ粒子系で、特に粒子間に相互作用がない場合には、対角化して固有値を求めることが容易にできる。格子上のスピン模型についても、適当な変換によ

って模型を free fermion 系に移すことができれば、固有値を求め自由エネルギーを導出することができる。下記の研究成果の(1)はこの free fermion 系への変換に関するものである。

格子模型に関する厳密な結果を導く手法のうち、本研究にとってもう一つの核となるものは伝送行列法である。模型の自由エネルギーを求める際には、各状態の Boltzmann 因子をすべて足し上げる必要があるが、これを系統的に行列の積によって実行し、問題を行列の固有値問題に帰着させるのが伝送行列法である。下記の研究成果の(2)と(3)は、この伝送行列法を基礎とする研究である。

4. 研究成果

(1) スピン 1/2 の 1 次元 XY 模型はある種のランダムウォークの生成演算子であると見なすことができ、それと等価な 2 次元の Ising 模型は細胞選別の簡単な模型であると考えることができる。これらはいずれも free fermion 系に変換されて厳密解が得られる。

1 次元 transverse Ising 模型は、量子効果を含む最も基本的なスピン模型である。この模型の自由エネルギーは既に得られているが、これを既存の方法とは違う形で解き直し、その導出を見直してみたところ、自由エネルギーが交換関係のみによって導かれていることに気づく。したがって、ハミルトニアンがスピン演算子によって具体的にどのように書かれているかによらず、そこに現れる項の交換関係が適当な条件をみたせば、同じ方法によって自由エネルギーを求めることができることがわかる。その結果、1 次元 transverse Ising 模型、磁場のある 1 次元 XY 模型、2 次元 Ising 模型という古くから知られる一連の模型とその一般化を、同一の手続きによって対角化することができた。

このことを一般化して、量子スピン鎖のハミルトニアンを構成する演算子が特定の交換関係をみたすとき、一般にそのハミルトニアンを free fermion 系に変換し分配関数を厳密に導出する方法を見出した。模型を解く際には、ハミルトニアンを対角化する基底を見つけることが本質的で、その基底に移るための変換を求めることが鍵になるが、この方法によれば、条件をみたす演算子系から対角化できる Hamiltonian とそれを対角化する変換が同時に得られる。この方法によって、現在までに知られている代表的な可解模型である $S=1/2$ の 1 次元 transverse Ising 模型、1 次元 Kitaev 模型、1 次元 XY 模型、2 次元正方格子 Ising 模型、およびこれらを拡張した種々の模型の厳密解が得られる。さらにいままでに知られていなかった可解な模型として、相互作用に自由度を含む模型、多体の相互作用を持つ模型、長距離相互作用を持つ模

型等の分配関数が新しく厳密に得られる。この変換は free fermion 系への変換として古典的なものである Jordan-Wigner 変換、Majorana fermion への変換、南部による fermion 系への変換をその特別な場合として含む。さらに、トポロジカル相や量子情報との関連から議論されている 1 次元 cluster 模型について、cluster 模型を含むその拡張を導入し、自由エネルギー、自発磁化、String 相関を厳密に導出した。さらに、可算個の可解模型からなる系列を複数得ている。

(2) 一様な相互作用の Ising 型模型の零磁場の量子帯磁率については、それを計算するための一般式が得られている (Minami 1998)。これを基礎にして、ランダムな相互作用を持つ 1 次元スピン 1/2 Ising 模型の量子帯磁率を積分表示で書き、相互作用の確率分布のモーメントで展開した。Ising 鎖に対するランダム性の効果は、古典的な量に関して Fan and McCoy による結果があるが、今回の結果によって量子効果を含む量について、ランダム性による支配的な効果が帯磁率を減少させることが厳密に示された。展開の一般項は Bernoulli 数を利用して書き下すことができる。展開の 0 次の項は既に知られている一様な場合の解を与え、低次の項は量子帯磁率に対するランダム性の主要な効果を示す。絶対零度への極限は S に依存しない。 S を無限大にする古典極限も得られる、非常に弱い相互作用が小さな確率で現れる場合に、帯磁率が不規則な曲線を描くことが導かれた。

(3) 可解な格子模型の代表例である 2 次元正方格子 Ising 模型は、磁場と異方性のある 1 次元 XY 模型に等価である。この等価性は周期的境界条件の下で示されていたが、同様の等価性が開放端の場合や、相互作用と磁場にランダム性がある場合にも成り立つことを示した。一方向に開放端の 2 次元 Ising 模型に等価になるのは、開放端で両端点に内部とは異なる磁場があり異方性のある 1 次元 XY 模型である。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文](計 4 件)

(1) Kazuhiko Minami, Solvable Hamiltonians and fermionization transformations obtained from operators satisfying specific commutation relations,

J. Phys. Soc. Jpn. 85, 024003 (2016). 査読有,

DOI: <http://dx.doi.org/10.7566/JPSJ.85.024003>

(2) Kazuhiko Minami,
Equivalence between the two-dimensional
Ising model and the quantum XY chain with
randomness and with open boundary.
Europhys. Lett., 108, 30001 (2014). 査
読有,
<http://iopscience.iop.org/article/10.1209/0295-5075/108/30001/meta>

(3) Kazuhiko Minami,
Exact transverse susceptibility of
one-dimensional random bond Ising model
with alternating spin.
J. Phys. A: Math. Theor. 46, 505005 (2013).
査読有
<http://iopscience.iop.org/article/10.1088/1751-8113/46/50/505005/meta>

(4) 南 和彦,
細胞選別-ランダムウォークの等価性と生体内の1次元確率過程
京都大学数理解析研究所講究録 1796 (2012)
72-80. 査読なし.
<http://www.kurims.kyoto-u.ac.jp/~kyodo/kokyuroku/contents/pdf/1796-12.pdf>

〔学会発表〕(計 13 件)

(1) 南 和彦: '交換関係から構成される変換による自由エネルギーの導出と応用'
日本物理学会年会(2016年3月21日、東北学院大、宮城県仙台市)

(2) 南 和彦: '交換関係から構成される変換による1次元量子スピン鎖・2次元 Ising 模型の厳密解の導出'
日本物理学会年会(2015年9月17日、関西大学千里山キャンパス、大阪府吹田市)

(3) 柳原祐治 南 和彦: '多種粒子コンタクトプロセスの相関等式について'
日本物理学会年会(2015年9月17日、関西大学千里山キャンパス、大阪府吹田市)

(4) 南 和彦: '可換 - 反可換の混在する演算子系と量子スピン鎖の自由エネルギー'
日本物理学会年会(2015年3月21日、早稲田大学早稲田キャンパス、東京都新宿区)

(5) 柳原祐治 南 和彦: '多種粒子コンタクトプロセスの相関等式について'
日本物理学会年会(2015年3月21日、早稲田大学早稲田キャンパス、東京都新宿区)

(6) 南 和彦: '1次元磁性体における反交換演算子'
日本物理学会秋季大会(2014年9月8日、中部大学、愛知県春日井市)

(7) 柳原祐治 南 和彦: '多種粒子コンタクトプロセスの相関等式について'
日本物理学会秋季大会(2014年9月8日、中部大学、愛知県春日井市)

(8) 南 和彦: 'Spin S-1/2-S random bond Ising 鎖の transverse 帯磁率'
日本物理学会年会(2014年3月27日、東海大学湘南キャンパス、神奈川県平塚市)

(9) 柳原祐治 南 和彦: '多種粒子コンタクトプロセスの相関等式について'
日本物理学会年会(2014年3月30日、東海大学湘南キャンパス、神奈川県平塚市)

(10) 南 和彦: '交替および一様なスピンをもつランダム Ising 模型の量子帯磁率'
日本物理学会秋季大会(2013年9月25日、徳島大学常三島キャンパス、徳島県徳島市)

(11) 柳原祐治 南 和彦: 'n 種系コンタクトプロセスの相関等式'
日本物理学会秋季大会(2013年9月28日、徳島大学常三島キャンパス、徳島県徳島市)

(12) 南 和彦: 'ランダム性があり一般のスピン Ising 型模型の熱力学量'
日本物理学会年会(2013年3月27日、広島大学東広島キャンパス、広島県東広島市)

(13) 南 和彦: '2次元 alternating/random Ising 模型と1次元 alternating/random XY 模型の等価性'
日本物理学会秋季大会(2012年9月20日、横浜国立大学常盤台キャンパス、神奈川県横浜市)

〔図書〕(計 1 件)

(1) 南 和彦「格子模型の数理解析」SGC ライブラリ 108 別冊数理解析(サイエンス社 2014)

〔産業財産権〕
出願状況(計 0 件)

取得状況(計 0 件)

〔その他〕
特になし

6. 研究組織

(1) 研究代表者
南 和彦 (MINAMI, Kazuhiko)
名古屋大学・大学院多元数理解析研究科・
准教授
研究者番号: 40271530