# 吸脱着を持つ一次元非対称単純排他過程の動力学について

東京大学大学院 工学系研究科 一木 信吾 東京大学 先端科学技術研究センター 西成 活裕

# 概要

一次元非対称単純排他過程(TASEP)とは、一次元格子上 を体積排除の効果を持つ多数の粒子が相互作用しながら非対称 に移動する簡単なモデルである.このモデルは、車や生物など の自己駆動粒子の流れの解析において広く用いられている[1]. ここではさらに途中の格子が空いている場合にはある確率で粒 子が吸着し、格子が粒子で埋まっている場合にはある確率で脱 着するようなメカニズム(Langmuir Kinetics)を加えたモデ ル(TASEP-LK)の動力学について考察を行う.

#### 1 TASEP-LK の定常状態

TASEP-LK の定常状態については M. R. Evans et al. で研 究されている [2]. 彼らの論文では前方のセルが状態 0 のとき は,確率 1 で前方に進むと仮定しているが,ここでは一般化し て確率 p で前に進むものとしてまとめる.

ここでは、セル数がNの1次元開放系を考える。各セルは、 0または1を取ることとする。各セルの状態変数を $\tau_i$ とする と以下のとおりである。

 $\tau_i = 0$  or 1.

もし前方のセルが 0 であれば確率 p で前方のセルへ移るこ とができるとする. さらに, セルが 0 のとき, 確率  $\omega_A$  で 1 に 変わり, セルが 1 のとき確率  $\omega_D$  で 0 に変わるものとする. こ のとき,  $\omega_A$  は吸着,  $\omega_D$  は脱着を表していると考えることがで きる.

$$\begin{array}{cccc} 1 & 0 & \stackrel{p}{\longrightarrow} & 0 & 1. \\ * & 0 & \stackrel{\omega_A}{\longrightarrow} & * & 1. \\ 1 & * & \stackrel{\omega_D}{\longrightarrow} & 0 & * \end{array}$$

さらに、境界部分には他と異なる仮定を置く、一番左のセルは、確率  $\alpha$  で 0 から 1 へ変化するとし、確率  $\omega_A$  は考えないこととする.

 $0 \quad \stackrel{\alpha}{\longrightarrow} \quad 1.$ 

一番右のセルは, 確率  $\beta$  で 1 から 0 へ変化するとし, 確率  $ω_D$  は考えないこととする.

 $1 \quad \stackrel{\beta}{\longrightarrow} \quad 0.$ 

セルi (1 < i < N) の平均的な状態確率密度 <  $\tau_i$  > の時間 変化は以下のとおり表すことができる.たたし、<・> はある 分布における期待値を表す.

$$\frac{\partial \langle \tau_i \rangle}{\partial t} = p \langle \tau_{i-1}(1-\tau_i) \rangle - p \langle \tau_i(1-\tau_{i+1}) \rangle + \omega_A \langle 1-\tau_i \rangle - \omega_D \langle \tau_i \rangle.$$
(1)

また、境界では以下のようになる.

$$\begin{split} &\frac{\partial <\tau_1>}{\partial t}=-p<\tau_1(1-\tau_2)>+\alpha<1-\tau_1>-\omega_D<\tau_1>\,,\\ &\frac{\partial <\tau_N>}{\partial t}=p<\tau_{N-1}(1-\tau_N)>+\omega_A<1-\tau_N>-\beta<\tau_N>\,. \end{split}$$

Nを大きくとり、平均場近似を行う. つまり、<  $\tau_i(1 - \tau_{i+1}) > \varepsilon < \tau_{i-1} > (1 - < \tau_i >)$ と置き換えて次の式を用いる.

$$\langle \tau_{i\pm 1} \rangle = \rho(x) \pm \frac{1}{N} \frac{\partial \rho}{\partial x} + \dots$$

(1) は以下のようになる.

$$\frac{\partial \rho}{\partial \tau} = -p(1-2\rho)\frac{\partial \rho}{\partial x} + \omega_D N(K - \rho(K+1)).$$

ただし,  $\tau = \frac{t}{N}$ 及び  $K = \frac{\omega_A}{\omega_D}$ とした. ここで得られた偏 微分方程式は良く知られた形をしているので以下のことがわ かる.

$$\frac{dx}{d\tau} = p(1 - 2\rho).$$
$$\frac{d\rho}{d\tau} = \omega_D N(K - (K + 1)\rho).$$

*K* = 1 とすると以下のようになる.

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial \tau} &= -p(1-2\rho)\frac{\partial \rho}{\partial x} + \omega N(1-2\rho). \end{aligned} \tag{2} \\ \frac{dx}{d\tau} &= p(1-2\rho). \\ \frac{d\rho}{d\tau} &= \omega N(1-2\rho). \end{aligned}$$

ただし,  $\omega = \omega_A = \omega_D$  とした.

さらに, 定常状態の下でこの式を解く. つまり, (2) を次のように考える.

$$0 = (1 - 2\rho)(\omega N - p\frac{\partial\rho}{\partial x}).$$

これは簡単に解くことができ、 $\rho = \frac{1}{2}$ ,  $\frac{\omega N}{p}x$ となる. このモデルは、領域  $\alpha < \frac{1}{2}p$ ,  $\beta < \frac{1}{2}p$ の一部で衝撃波が発 生することが知られている.ここで言う衝撃波は一次元サイト の状態1の密度差が不連続になる点のことを言う.また、衝撃 波の速さ*v*は以下のようになることが知られている.

$$v = \frac{\rho_r (1 - \rho_r) - \rho_l (1 - \rho_l)}{\rho_r - \rho_l} = 1 - \rho_l - \rho_r$$

ただし,ここではセルの左側の密度を $\rho_l$ ,右側の密度を $\rho_r$ とした.定常状態では衝撃波の速さは0になるので $\rho_r = 1 - \rho_l$ という等式が成り立つことがわかる.

次に, 衝撃波の位置を求める. (2) を *x* について両側から解く. (2) は,

$$\frac{\partial x}{\partial \rho} = \frac{p}{\omega N},$$

となるので、

$$x = \int_{\alpha}^{\rho_l(x)} \frac{p}{\omega N} d\rho,$$
  
=  $\frac{p}{\omega N} (\rho_l(x) - \alpha)$ 

となる.また,

$$1 - x = \int_{\rho_r(x)}^{1-\beta} \frac{p}{\omega N} d\rho,$$
  
=  $\frac{p}{\omega N} (1 - \beta - \rho_r(x)),$ 

となる.衝撃波の位置  $x_{SW}$  を求めるため,これらの式と  $\rho_r = 1 - \rho_l$ を用いて x について解くと,

$$x_{SW} = \frac{p(\beta - \alpha)}{2\omega N} + \frac{1}{2}$$

が得られる.境界の確率が同じ  $(\alpha = \beta)$  であるとすると,

$$x_{SW} = \frac{1}{2},$$

となることがわかる. つまり,境界の確率が同じで,吸着  $\omega_A$  と脱着  $\omega_D$  が等しい際の定常状態では,衝撃波の位置は平 均的に 1 次元サイトの中央に現れることがわかる.境界の確率 が同じ ( $\alpha = \beta$ ) であるとすると,確率 p で前方に進むという 条件は衝撃波の位置に影響しないことがわかる.逆に,境界の 確率を変更すると確率 p による効果が現れ,衝撃波の位置が変 わることがわかる.

## 2 TASEP-LK の非定常状態

ここでは上記で考察した TASEP-LK の非定常状態について 取り上げる。特に非定常状態から定常状態へ移行するまでの時 間について考察する。境界条件を変更した際に非定常状態から 定常状態への移行時間がどのように変化するかを捉える。モデ ルの長さが一般の場合について考察することは難しいため、こ こでは3セルの TASEP-LK に限ってまとめる。

# 2.1 確率推移行列

3 セル TASEP-LK の確率推移行列を求める. 全てのセルの 状態は以下の 8 パターンである.

$$P_{1} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad P_{2} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad P_{3} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad P_{4} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$
$$P_{5} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad P_{6} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad P_{7} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad P_{8} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

確率推移行列を考える上で状態推移のアップデート方法は以 下のとおりとする。 1. 各セルの状態から ω<sub>A</sub> 及び ω<sub>D</sub> を考える.

各セルの状態から α, β 及び p を考える.

これらの状態推移を確率推移行列として表現すると以下のようになる.なお,立式の手順を確認し易くするため同類項をまとめずに記載する.

$$\begin{array}{c} P_{1} \quad P_{2} \quad P_{3} \quad P_{4} \quad P_{5} \quad P_{6} \quad P_{7} \quad P_{8} \\ P_{1} \\ P_{2} \\ P_{3} \\ P_{4} \\ P_{2} \\ P_{3} \\ P_{4} \\ P_{4} \\ P_{5} \\ P_{6} \\ P_{7} \\ P_{7} \\ P_{7} \\ P_{8} \\ P_{1} \\ P_{1}$$

$$\begin{pmatrix} w_{16} \\ w_{26} \\ w_{36} \\ w_{46} \\ w_{56} \\ w_{66} \\ w_{76} \\ w_{86} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \omega_D(1-\omega_A)\beta \\ (1-\omega_D)(1-p)(1-\omega_A)\beta \\ \omega_D\omega_A\beta + (1-\omega_D)p(1-\omega_A)\beta \\ (1-\omega_D)\omega_A\beta \\ (1-\omega_D)(1-p)(1-\omega_A)(1-\beta) \\ (\omega_D\omega_A(1-\beta) + (1-\omega_D)p(1-\omega_A)(1-\beta) \\ (1-\omega_D)\omega_A(1-\beta) \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} w_{17} \\ w_{27} \\ w_{37} \\ w_{47} \\ w_{57} \\ w_{67} \\ w_{77} \\ w_{87} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (1-\alpha)\omega_D\beta \\ \alpha\omega_D\beta \\ (1-\alpha)(1-\omega_D)\beta \\ (1-\alpha)\omega_D(1-\beta) \\ \alpha\omega_D(1-\beta) \\ (1-\alpha)(1-\omega_D)(1-\beta) \\ \alpha(1-\omega_D)(1-\beta) \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} w_{18} \\ w_{28} \\ w_{38} \\ w_{48} \\ w_{58} \\ w_{58} \\ w_{78} \\ w_{78} \\ w_{88} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \omega_D \omega_D \beta \\ (1 - \omega_D) \omega_D \beta \\ \omega_D \omega_D (1 - \beta) \\ (1 - \omega_D) (1 - \omega_D) \beta \\ (1 - \omega_D) \omega_D (1 - \beta) \\ (1 - \omega_D) (1 - \omega_D) (1 - \beta) \end{pmatrix}$$

## 2.2 緩和時間

緩和時間とは,非定常状態から定常状態に移行する時間であ る.ここでは,絶対値最大の固有ベクトルを求める方法につい て述べ,確率推移行列の第2固有値と緩和時間の関係を示す.

#### 記号 2.1

 $A \in \mathbb{R}$ :対角化可能な行列.  $\lambda_1, \lambda_2, \dots \lambda_n : A$ の固有値 *s.t.*  $|\lambda_1| > |\lambda_2| \ge \dots \ge |\lambda_n| \ge 0$ .  ${}^tx_1, {}^tx_2, \dots {}^tx_n$ :各固有値に対する左固有値ベクトル.

# 定義 2.1 (左固有ベクトル)

<sup>t</sup>**A**: **A** の転置行列.  
$$\lambda_i$$
: <sup>t</sup>**A** の固有値,  $1 \le i \le n$ ,  
 $x_i$ : 固有値 $\lambda_i$ の固有ベクトル

このとき、次の ${}^{t}x_{i}$ を行列 A の左固有ベクトルと呼ぶ.

$${}^{t}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_{i}=\lambda_{i}\boldsymbol{x}_{i} \iff {}^{t}\boldsymbol{x}_{i}\boldsymbol{A}=\lambda_{i}{}^{t}\boldsymbol{x}_{i}.$$

さて、Aは対角化可能なので、初期ベクトル $^{t}v$ をAの固有 ベクトルの線形結合で表すことができる。

$${}^{t}\boldsymbol{v} = v_{1}{}^{t}\boldsymbol{x}_{1} + v_{2}{}^{t}\boldsymbol{x}_{2} + \dots + v_{n}{}^{t}\boldsymbol{x}_{n}, \quad v_{1}, v_{2}, \dots v_{n} \in \mathbb{R}$$

この両辺に $A^k$ を掛けると,

$${}^{t}\boldsymbol{v}\boldsymbol{A}^{k} = v_{1}{}^{t}\boldsymbol{x}_{1}\boldsymbol{A}^{k} + v_{2}{}^{t}\boldsymbol{x}_{2}\boldsymbol{A}^{k} + \dots + v_{n}{}^{t}\boldsymbol{x}_{n}\boldsymbol{A}^{k},$$
  
$$= v_{1}\lambda_{1}^{kt}\boldsymbol{x}_{1} + v_{2}\lambda_{2}^{kt}\boldsymbol{x}_{2} + \dots + v_{n}\lambda_{n}^{kt}\boldsymbol{x}_{n},$$
  
$$= \lambda_{1}^{k} \Big( v_{1}{}^{t}\boldsymbol{x}_{1} + v_{2}\Big(\frac{\lambda_{2}}{\lambda_{1}}\Big)^{k}{}^{t}\boldsymbol{x}_{2} + \dots + v_{n}\Big(\frac{\lambda_{n}}{\lambda_{1}}\Big)^{k}{}^{t}\boldsymbol{x}_{n} \Big).$$

となる.  $|\lambda_1| > |\lambda_2| \ge \cdots \ge |\lambda_n| \ge 0$ より,  $\left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^k, \ldots, \left(\frac{\lambda_n}{\lambda_1}\right)^k$ の値は k が大きくなるにつれて 0 に近 づく. よって,絶対値最大の固有ベクトルは以下のように示さ れる.

$$\frac{1}{v_1}^t \boldsymbol{v} \Big( \frac{1}{\lambda_1} \boldsymbol{A} \Big)^k \quad \longrightarrow \quad \boldsymbol{x}_1, \ \ (k \longrightarrow \infty).$$

ここで考えている行列は確率推移行列である. それぞれの列 の和が1になるため、ペロン=フロベニウスの定理より最大固 有値は1になることが知られている. つまり固有値1におけ る固有ベクトルがモデルの定常状態を表していることがわか る. さらに上で述べた手順から緩和時間についても情報が得ら れる. 最大固有値の固有ベクトルに収束するスピードに最も影 響する項が2番目に大きい固有値の項である. つまり,第2固 有値が大きいほど収束は遅く,小さいほど収束が速いことを表 している.

# 2.3 数值計算例

ここでは境界の確率  $\alpha$  及び  $\beta$  を変化させたときの以下 2 つ の場合の第 2 固有値の計算結果を示す. 吸脱着がある場合と無 い場合を比較する.

- TASEP, p=1.
- TASEP-LK, p=1,  $\omega_A = \omega_D = 0.05$ .

一方で第2固有値が0に収束するステップ数nを求める. ここでは $y = 10^{-30}$ 以下になるステップ数を緩和時間と定義 する.ここで定義された緩和時間は以下のように求めることが できる.

$$y = \lambda_2^n, \quad n = \frac{\log y}{\log \lambda_2}.$$

**記号** 2.2  $\alpha_1 : \alpha = 0.1, \ \alpha_2 : \alpha = 0.2, \ \alpha_3 : \alpha = 0.3, \ \alpha_4 : \alpha = 0.4, \ \alpha_5 : \alpha = 0.5, \ \alpha_6 : \alpha = 0.6, \ \alpha_7 : \alpha = 0.7, \ \beta_1 : \beta = 0.1, \ \beta_2 : \beta = 0.2, \ \beta_3 : \beta = 0.3, \ \beta_4 : \beta = 0.4, \ \beta_5 : \beta = 0.5, \ \beta_6 : \beta = 0.6, \ \beta_7 : \beta = 0.7.$ 

 第2固有値 <sup>α1</sup>

 $\alpha_2$  $\alpha_3$  $\alpha_4$  $\alpha_5$  $\alpha_6$  $\alpha_7$  $(0.941 \ 0.899 \ 0.843 \ 0.778 \ 0.707 \ 0.629 \ 0.544)$  $\beta_1$  $\beta_2$ 0.899 0.882 0.844 0.795 0.7360.6690.593 $\beta_3$ 0.843 0.844 $0.821 \quad 0.785 \quad 0.737$ 0.679 0.610  $\beta_4$  0.778 0.795 0.785 0.759 0.721 $0.672 \quad 0.611$  $\beta_5$  0.707 0.736 0.737 $0.721 \quad 0.692$  $0.652 \quad 0.599$ 0.629 0.6690.679 $0.672 \quad 0.652$ 0.619 0.575 $\beta_6$  $\beta_7 \ 0.544 \ 0.593 \ 0.610 \ 0.611 \ 0.599 \ 0.575 \ 0.538$ 

	$\alpha_1$	$\alpha_2$	$\alpha_3$	$\alpha_4$	$\alpha_5$	$\alpha_6$	$\alpha_7$
$\beta_1$	(1142.5)	651.8	404.4	275.2	198.9	149.0	113.6
$\beta_2$	651.8	550.5	408.3	300.9	225.7	172.0	132.1
$\beta_3$	404.4	408.3	351.2	284.6	226.2	178.5	140.0
$\beta_4$	275.2	300.9	284.6	249.9	210.8	173.6	140.2
$\beta_5$	198.9	225.7	226.2	210.8	187.5	161.2	134.6
$\beta_6$	149.0	172.0	178.5	173.6	161.2	144.2	124.7
$\beta_7$	113.6	132.1	140.0	140.2	134.6	124.7	111.4
2.3.2 TASEP-LK, p=1, $\omega_A = \omega_D = 0.05$							

第2固有值

 $\alpha_1$  $\alpha_7$  $\alpha_2$  $\alpha_3$  $\alpha_4$  $\alpha_5$  $\alpha_6$  $\beta_1$ 0.872 0.8340.7840.7280.6680.6040.536 $\beta_2$ 0.8340.8120.7760.7310.6790.6210.556 $\beta_3$ 0.7840.7760.7140.6180.7500.6700.557 $\beta_4$ 0.7280.7310.6860.649 0.6030.7140.547 $\beta_5$ 0.668 0.6790.6700.6490.6180.5790.5290.604 0.6210.501 $\beta_6$ 0.6180.6030.5790.545 $\beta_7$ 0.5360.5560.5570.5470.5290.5010.463o 緩和時間  $\alpha_7$  $\alpha_1$  $\alpha_2$  $\alpha_3$  $\alpha_4$  $\alpha_5$  $\alpha_6$ 504.1379.4284.1218.0171.3137.1110.8  $\beta_1$  $\beta_2$ 379.4331.6 272.0220.1178.3144.9117.7 272.0 $\beta_3$ 284.1240.2205.1172.4143.5118.2 $\beta_4$ 218.0220.1205.1159.7136.6114.6183.2108.3

 $\beta_5$ 171.3 178.3 172.4159.7143.7126.3 $\beta_6$ 137.1 144.9 143.5136.6126.3113.999.9 $\beta_7$ 110.8 117.7 118.2 114.6 108.3 99.9 89.6 TASEP 及び TASEP-LK の緩和時間を比べると吸脱着を導

入した方が緩和時間が短くなることがわかる.吸脱着の導入に より収束が速くなることは直感的にも納得できる結果である. また,片側の境界 α の確率を大きくしていくほど緩和時間の減 衰は指数関数的な減衰より緩やかになることがわかる.



図1 TASEP, p=1, 緩和時間







図 3  $\beta = 0.1$ , 横軸:  $\alpha - \beta$ , 縦軸: 緩和時間

# 3 結論

ここでは TASEP-LK についてまとめた.特に、3 セルとい う最小のモデルを使って境界条件と緩和時間の関係を考察し た.しかし、ここで述べたモデルは長さが短いため境界条件の 影響を大きく受けている.そのため、一般の長さのモデルにつ いても類似した結果が得られるのかどうか分析する必要があ る.定常状態だけではなく、非定常状態についても詳しく分析 することでモデルから現象の特徴をより正確に捉えることがで きると考えられる.

# 参考文献

- A. Schadschneider, D. Chowdhury and K. Nishinari, Stochastic Transport in Complex Systems: From Molecules to Vehicles, Elsevier Science, 2010.
- [2] M. R. Evans, R. Juhász and L. Santen, Shock formation in an exclusion process with creation and annihilation, Phys. Rev. E 68, 026117, 2003.