吸脱着を持つ一次元完全非対称単純排他過程の動力学について

一木　信吾（Shingo Ichiki）*，西成　活裕（Katsuhiro Nishinari）†

概要

一次元完全非対称単純排他過程（TASEP）とは, 一次元格子上において排除体積効果を持つ多数の粒子が相互作用をしながら一方向に移動する簡単な模型である．この模型は, 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, サイトが空いている場合にはあるレートで粒子が吸着し, 粒子で埋まっている場合にはあるレートで脱離するようなメカニズム（Langmuir kinetics）を加えた模型（TASEP-LK）の動力学について考察する．

1　TASEP-LK の定常状態

TASEP-LK の定常状態については [2] などで詳しく研究されている．ここでは平均場近似を用いて得られる定常状態の密度プロファイルについて [2] の結果に沿って簡単にまとめる．

サイト数 L の一次元開放系を考える．各サイトは, 粒子がある場合とない場合の 2 状態を取る．そこでサイト i の状態変数を次のように定義する．

$$\tau_i = \begin{cases} 1 & (\text{粒子がある}) \\ 0 & (\text{粒子がない}) \end{cases} . \tag{1}$$

そして, もし前方のサイトが 0 であれば粒子はレート 1 で前方のサイトへ移ることができる．また, サイトが 0 のとき, レート ω_A で 1 に変わり, サイトが 1 のとき, レート ω_D で 0 に変わるものとする．つまり, ω_A は吸着, ω_D は脱離を表している．

$$\begin{aligned} 1\,0 &\xrightarrow{1} 0\,1 \\ 0 &\xrightarrow{\omega_\mathrm{A}} 1 \\ 1 &\xrightarrow{\omega_\mathrm{D}} 0 \end{aligned}$$

さらに, 境界部分は他と異なる仮定を置く．一番左のサイトは, レート α で 0 から 1 へ変化するとし, レート ω_A は考えないものとする．

$$0 \xrightarrow{\alpha} 1$$

また, 一番右のサイトは, レート β で 1 から 0 へ変化するとし, レート ω_D は考えないものとする．

$$1 \xrightarrow{\beta} 0$$

サイト i $(1 < i < L)$ の平均的な状態密度 $\langle\tau_i\rangle$ の時間変化は以下のとおり表すことができる．

$$\frac{\mathrm{d}\langle\tau_i\rangle}{\mathrm{d}t} = \langle\tau_{i-1}(1-\tau_i)\rangle - \langle\tau_i(1-\tau_{i+1})\rangle + \omega_\mathrm{A}\langle 1-\tau_i\rangle - \omega_\mathrm{D}\langle\tau_i\rangle. \tag{2}$$

ただし, $\langle\cdot\rangle$ は期待値を表す．また, 境界では次のようになる．

$$\frac{\mathrm{d}\langle\tau_1\rangle}{\mathrm{d}t} = \alpha\langle 1-\tau_1\rangle - \langle\tau_1(1-\tau_2)\rangle - \omega_\mathrm{D}\langle\tau_1\rangle, \tag{3}$$

$$\frac{\mathrm{d}\langle\tau_L\rangle}{\mathrm{d}t} = \langle\tau_{L-1}(1-\tau_L)\rangle - \beta\langle\tau_L\rangle + \omega_\mathrm{A}\langle 1-\tau_L\rangle. \tag{4}$$

次に平均場近似を行う．つまり, $\langle\tau_i\tau_{i+1}\rangle$ を $\langle\tau_i\rangle\langle\tau_{i+1}\rangle$ と置き換える．さらに, 次の式を用いて流体力学極限を取る．

$$\langle\tau_{i\pm1}\rangle = \rho(x) \pm \frac{1}{L}\frac{\partial\rho}{\partial x} + \mathcal{O}\Big(\frac{1}{L^2}\Big) . \tag{5}$$

(2) は次のようになる．

$$\frac{\partial\rho}{\partial\bar{t}} = -(1-2\rho)\frac{\partial\rho}{\partial x} + \Omega_\mathrm{A}(1-\rho) - \Omega_\mathrm{D}\rho. \tag{6}$$

ただし, $\Omega_\mathrm{A} = \omega_\mathrm{A}L$, $\Omega_\mathrm{D} = \omega_\mathrm{D}L$, $\bar{t} = t/L$ 及び $x = i/L$ とした．また, Ω_A 及び Ω_D が有限になるように $L \to \infty$ を考える．なお, 境界については (3) 及び (4) から近似的にそれぞれ $\rho(0) = \alpha$ 及び $\rho(1) = 1-\beta$ となることがわかる．以降では簡単のため $\Omega := \Omega_\mathrm{A} = \Omega_\mathrm{D}$ の場合について考える．

ここでは定常状態を考えているため, 密度の時間変化を 0 と置くことで次の式を得る．

$$0 = (1-2\rho)(\Omega - \frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}x}). \tag{7}$$

まず, (7) から自明な解 $\rho(x) = 1/2$ を持つことがわかる．そして, 他の解は以下の微分方程式を解くことで得られる．

$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}\rho} = \frac{1}{\Omega}. \tag{8}$$

なお, 両境界条件を同時に満たす解は存在しないため, 境界ごとに別々に考える．

まず, 左側の密度を $\rho_\mathrm{L}(x)$ として左境界から ρ について積分すると

$$\begin{aligned} x &= \int_\alpha^{\rho_\mathrm{L}(x)} \frac{1}{\Omega}\mathrm{d}\rho \\ &= \frac{1}{\Omega}(\rho_\mathrm{L}(x) - \alpha) \end{aligned}$$

が得られる．次に, 右側の密度を $\rho_\mathrm{R}(x)$ として右境界から ρ について積分すると

$$\begin{aligned} 1 - x &= \int_{\rho_\mathrm{R}(x)}^{1-\beta} \frac{1}{\Omega}\mathrm{d}\rho \\ &= \frac{1}{\Omega}(1 - \beta - \rho_\mathrm{R}(x)) \end{aligned}$$

* 東京大学大学院 工学系研究科

† 東京大学 先端科学技術研究センター

が得られる．つまり, 左近傍解及び右近傍解はそれぞれ次のようになることがわかる．

$$\rho_{\mathrm{L}}(x) = \Omega x + \alpha, \tag{9}$$
$$\rho_{\mathrm{R}}(x) = \Omega(x-1) + 1 - \beta. \tag{10}$$

また, この模型は衝撃波相を持つことが知られている．ここで言う衝撃波とは, 密度プロファイルが不連続になる点のことである．

そこで次に衝撃波の位置について考える．流体の保存則から衝撃波の速さ v_{S} は次のように表現できることが知られている．

$$v_{\mathrm{S}} = \frac{\rho_{\mathrm{R}}(1-\rho_{\mathrm{R}}) - \rho_{\mathrm{L}}(1-\rho_{\mathrm{L}})}{\rho_{\mathrm{R}} - \rho_{\mathrm{L}}} = 1 - \rho_{\mathrm{L}} - \rho_{\mathrm{R}}. \tag{11}$$

さらに, この模型では定常状態において衝撃波の位置が安定して現れることが知られているため, (11) の左辺を 0 と置くことで関係式 $\rho_{\mathrm{R}}(x_{\mathrm{S}}) = 1 - \rho_{\mathrm{L}}(x_{\mathrm{S}})$ が得られる．ただし, 衝撃波の位置を x_{S} とした．よって, 衝撃波の位置は, (9), (10) 及び $\rho_{\mathrm{R}}(x_{\mathrm{S}}) = 1 - \rho_{\mathrm{L}}(x_{\mathrm{S}})$ から

$$x_{\mathrm{S}} = \frac{\beta - \alpha}{2\Omega} + \frac{1}{2}$$

と得られる．両境界の流出入レートが等しければ

$$x_{\mathrm{S}} = \frac{1}{2}$$

となることがわかる．つまり, 定常状態において流出入レートが等しく, 吸着レート ω_{A} と脱離レート ω_{D} が等しいとき, 衝撃波は中央に現れることがわかる．

以上から定常状態における密度プロファイルは次のように考えられる．まず, 衝撃波が存在するときは

$$\rho(x) = \begin{cases} \rho_{\mathrm{L}}(x) & (0 < x < x_{\mathrm{S}}) \\ \rho_{\mathrm{R}}(x) & (x_{\mathrm{S}} < x < 1) \end{cases} \tag{12}$$

となる．また, その他の場合は

$$\rho(x) = \begin{cases} \rho_{\mathrm{L}}(x) & (0 < x < x_1) \\ 1/2 & (x_1 < x < x_2) \\ \rho_{\mathrm{R}}(x) & (x_2 < x < 1) \end{cases} \tag{13}$$

となる．ただし, x_1 及び x_2 はそれぞれ $\rho_{\mathrm{L}}(x_1) = 1/2$ 及び $\rho_{\mathrm{R}}(x_2) = 1/2$ となる位置である．また, $x_1 < 0$ $(x_2 > 1)$ のときは, $\rho_{\mathrm{L}}(x)$ $(\rho_{\mathrm{R}}(x))$ がないとする．なお, 両境界ではそれぞれ $\rho(0) = \alpha$ 及び $\rho(1) = 1 - \beta$ となる．

平均場近似から得られる密度プロファイル (12) 及び (13) は, L が十分大きいとき, シミュレーション結果と精度良く一致することが知られている [2].

2　TASEP-LK の非定常状態

ここでは定常状態へ移行するまでの時間について考察する．模型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 $L = 3$ の場合について考える．

2.1　確率推移行列

TASEP-LK（$L = 3$）の確率推移行列を示す．

まず, 取り得る全ての状態 (τ_1, τ_2, τ_3) は以下のとおりである．

$$\sigma_1 = (0,0,0),\ \sigma_2 = (0,0,1),\ \sigma_3 = (0,1,0),\ \sigma_4 = (0,1,1),$$
$$\sigma_5 = (1,0,0),\ \sigma_6 = (1,0,1),\ \sigma_7 = (1,1,0),\ \sigma_8 = (1,1,1).$$

また, ある時刻 t において, 状態 σ_i を取る確率を $P_t(\sigma_i)$ と書くことにする．そして, ある時刻 t における全ての状態の確率を次のようにベクトルで表したものを状態ベクトルと呼ぶ．

$$|P_t\rangle = \begin{pmatrix} P_t(\sigma_1) \\ P_t(\sigma_2) \\ \vdots \\ P_t(\sigma_8) \end{pmatrix}. \tag{14}$$

この状態ベクトルを用いると系の時間発展は次のマスター方程式で記述される．

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}}|P_t\rangle = \mathcal{M}|P_t\rangle. \tag{15}$$

ただし,

$$\mathcal{M} = \begin{pmatrix} M_{11} & \beta & \omega_{\mathrm{D}} & 0 & \omega_{\mathrm{D}} & 0 & 0 & 0 \\ \omega_{\mathrm{A}} & M_{22} & 1 & \omega_{\mathrm{D}} & 0 & \omega_{\mathrm{D}} & 0 & 0 \\ \omega_{\mathrm{A}} & 0 & M_{33} & \beta & 1 & 0 & \omega_{\mathrm{D}} & 0 \\ 0 & \omega_{\mathrm{A}} & \omega_{\mathrm{A}} & M_{44} & 0 & 1 & 0 & \omega_{\mathrm{D}} \\ \alpha & 0 & 0 & 0 & M_{55} & \beta & \omega_{\mathrm{D}} & 0 \\ 0 & \alpha & 0 & 0 & \omega_{\mathrm{A}} & M_{66} & 1 & \omega_{\mathrm{D}} \\ 0 & 0 & \alpha & 0 & \omega_{\mathrm{A}} & 0 & M_{77} & \beta \\ 0 & 0 & 0 & \alpha & 0 & \omega_{\mathrm{A}} & \omega_{\mathrm{A}} & M_{88} \end{pmatrix},$$
$$M_{jj} = -\sum_{\substack{k=1 \\ k \neq j}}^{8} M_{kj} \tag{16}$$

である．この $\mathcal{M}$ がここで考えている模型の確率推移行列である．

2.2　緩和時間

緩和時間とは, ある初期状態から定常状態に移行する時間スケールである．なお, ここでは (15) の確率推移行列 $\mathcal{M}$ について, 第 2 固有値と緩和時間の関係を考える．

確率推移行列は, Perron-Frobenius の定理から最大固有値は縮退せずに 0 になることがわかる．つまり, 固有値 0 に対する非負成分を持つ固有ベクトルが模型の定常状態である．

記号 2.1

$$\begin{aligned} \lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_8 \ &:\ \mathcal{M} \text{ の固有値},\ \lambda_j := -x_j + iy_j, \\ & \quad x_j, y_j \in \mathbb{R},\ j = 1, \cdots, 8, \\ & \quad \mathrm{Re}\ \lambda_1 > \mathrm{Re}\ \lambda_2 \geq \cdots \geq \mathrm{Re}\ \lambda_8. \\ |q_1\rangle, |q_2\rangle, \ldots, |q_8\rangle \ &:\ \text{各固有値に対する固有値ベクトル}. \\ & Q := (|q_1\rangle, |q_2\rangle, \ldots, |q_8\rangle). \end{aligned}$$

まず, マスター方程式 (15) は,

$$Q^{-1}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}}|P_t\rangle = Q^{-1}\mathcal{M}QQ^{-1}|P_t\rangle$$
$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}}|\tilde{P}_t\rangle = D|\tilde{P}_t\rangle \tag{17}$$

と書き直すことができる．ただし, $|\tilde{P}_t\rangle := Q^{-1}|P_t\rangle$, $D := Q^{-1}\mathcal{M}Q$ とした．そして, (17) から

$$|\tilde{P}_t\rangle = \begin{pmatrix} e^{\lambda_1 t} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & e^{\lambda_2 t} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & e^{\lambda_8 t} \end{pmatrix} |\tilde{P}_0\rangle \tag{18}$$

となることがわかる．よって状態ベクトルは

$$\begin{aligned} |P_t\rangle &= Q|\tilde{P}_t\rangle \\ &= c_1 e^{\lambda_1 t}|q_1\rangle + c_2 e^{\lambda_2 t}|q_2\rangle + \cdots + c_8 e^{\lambda_8 t}|q_8\rangle \end{aligned} \tag{19}$$

と表すことができる．ただし,

$$|\tilde{P}_0\rangle = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_8 \end{pmatrix} \tag{20}$$

とした．

(19) から, 定常状態に収束するスピードに最も影響するのは, 固有値の実部が 2 番目に大きい項であることがわかる．つまり, 第 2 固有値の実部が大きいほど収束は遅く, 小さいほど収束が速いことを意味している．

定義 2.1（緩和時間） ある物理量 X が

$$X_t = X_\infty + Ce^{-t/T} \tag{21}$$

と緩和するとき, 緩和時間は T で定義される．ただし, t は時間, X_∞ は定常状態の物理量, C は定数とした．

つまり, 緩和時間と第 2 固有値の関係は,

$$T = \frac{1}{x_2} \tag{22}$$

となる．

2.3 数値計算

ここでは, 数値計算を用いて流出入レートと緩和時間の関係を示す．具体的に 2 つの例を取り上げて考察する．

2.3.1 TASEP

		α						
		0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7
β	0.1	16.86	10.04	6.678	4.921	3.889	3.227	2.776
	0.2	10.04	8.349	6.437	5.078	4.153	3.511	3.050
	0.3	6.678	6.437	5.528	4.660	3.968	3.439	3.036
	0.4	4.921	5.078	4.660	4.126	3.636	3.227	2.895
	0.5	3.889	4.153	3.968	3.636	3.290	2.977	2.710
	0.6	3.227	3.511	3.439	3.227	2.977	2.736	2.520
	0.7	2.776	3.050	3.036	2.895	2.710	2.520	2.343

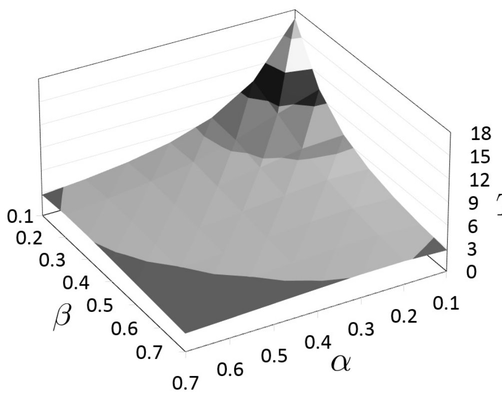

図 1　TASEP, 緩和時間 T

2.3.2 TASEP-LK, $\omega_{\mathrm{A}} = \omega_{\mathrm{D}} = 0.05$

		α						
		0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7
β	0.1	7.810	6.040	4.730	3.846	3.238	2.806	2.490
	0.2	6.040	5.317	4.489	3.813	3.295	2.902	2.601
	0.3	4.730	4.489	4.007	3.535	3.134	2.809	2.547
	0.4	3.846	3.813	3.535	3.211	2.908	2.646	2.426
	0.5	3.238	3.295	3.134	2.908	2.678	2.468	2.285
	0.6	2.806	2.902	2.809	2.646	2.468	2.298	2.144
	0.7	2.490	2.601	2.547	2.426	2.285	2.144	2.014

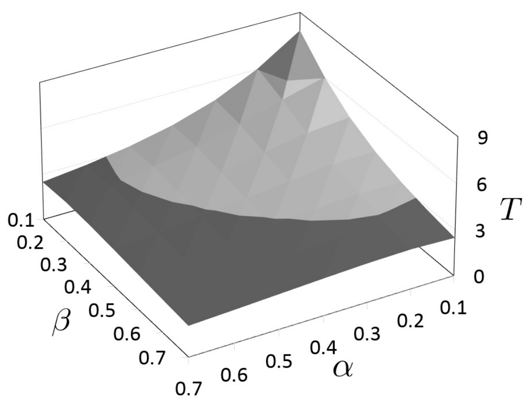

図 2　TASEP-LK, 緩和時間 T

2.3.3 考察

図 1 及び図 2 から 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, 流出レートを $\beta = 0.1$ と固定したときの $\alpha - \beta$ と緩和時間 T の関係を片対数グラフで図 3 に示した．直線及び点線は, $\alpha - \beta$ が 0 から 0.1 までの近似直線である．流出レート β に対して流入レート α が大きくなるほど, 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．

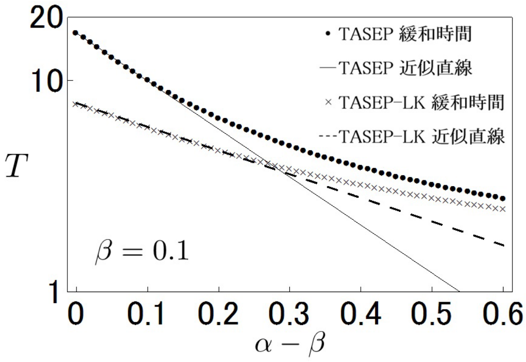

図 3　$\alpha - \beta$ と緩和時間 T の関係（片対数グラフ）

3　まとめ

本稿では TASEP-LK について簡単にまとめた．特に, $L = 3$ の小さな模型を使って境界条件と緩和時間の関係を考察した．具体的に数値計算をすることで, 境界条件と緩和時間の関係に一定の示唆が得られた．一方, ここで考察した模型は系が小さいため境界条件の影響を大きく受ける．そのため, 一般の系についても類似した結果が得られる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調べることで, 現象の理解が深まると共に, 応用研究の発展が期待できる．

謝辞

佐藤純先生には多くのご指導, ご助言をいただきました．この場を借りてお礼申し上げます．

参考文献

[1] 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, Phys. Rev. E **68**, 026117 (2003).