

# 隣接サイトの状態に依存する吸脱着機構を持つ完全非対称単純排他過程

一木 信吾 (Shingo Ichiki)\*; 佐藤 純 (Jun Sato)†; 西成 活裕 (Katsuhiro Nishinari)†

## 概要

吸脱着機構を持つ完全非対称単純排他過程 (Totally asymmetric simple exclusion process with Langmuir kinetics; TASEP-LK) について考察する. 特に, 隣接サイトの状態に依存して吸脱着レートが異なる TASEP-LK を考える. そして, この模型の非平衡定常状態について平均場近似を用いて解析する.

## 1 はじめに

非対称単純排他過程 (Asymmetric simple exclusion process; ASEP) とは, 一次元格子路上を排除体積効果を持った多数の粒子が非対称にランダムウォークする確率過程模型である. 特に, 粒子が一方方向にのみ動く模型は, 完全非対称単純排他過程 (Totally asymmetric simple exclusion process; TASEP) と呼ばれている. これらの模型は, 非平衡統計力学を始めとする幅広い分野で研究が行われている. 特に, 車や生物などの自己駆動粒子系に見られる現象を表現する模型として広く用いられている [1].

また, 図 1 のように, Langmuir kinetics と呼ばれる格子路上の任意の場所で吸脱着が可能なメカニズムを持つ模型も提案されている. この模型では, 粒子は前方のサイトが空いているとき, レート  $p$  (時間  $dt$  の間に確率  $pdt$ ) で前方へホップする. また, 粒子は左端からレート  $\alpha$  で流入し, 右端からレート  $\beta$  で流出する. なお, サイトが空いていれば, レート  $\omega_A$  で粒子がサイトに吸着し, サイト上の粒子はレート  $\omega_D$  で脱離する. 吸脱着機構を持つ完全非対称単純排他過程 (TASEP-LK) は, 境界の流入レートを変化させることで, 高密度相と低密度相を分離する衝撃波の存在など興味深い現象が知られている [2, 3].

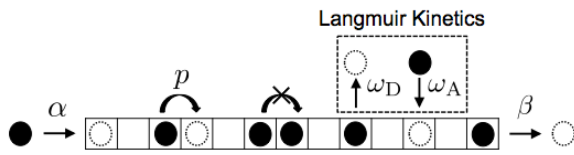


図 1 TASEP-LK の模式図.

最近, 隣接サイトの状態に依存するある吸脱着機構を持つ模型が研究されている [4]. 本稿では, この模型を, 隣接サイトの状態ごとに吸着レートと脱離レートが等しい場合について, 各吸脱着レートが任意かつ独立に値を取ることができるように拡張する. なお, 本稿において “吸脱着レート” とは, 隣接サイトの状態ごとに吸着レートと脱離レートが等しい場合に用いるものとする.

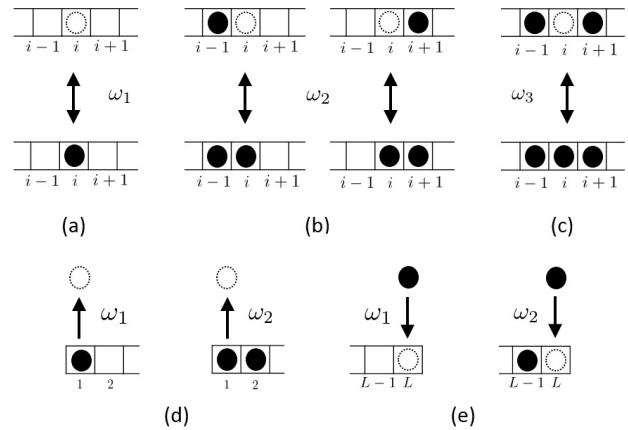
## 2 拡張 TASEP-LK

隣接サイトの状態に依存して吸脱着レートが異なる TASEP-LK について説明する. そして, 平均場近似を用いることで, 密度プロファイルが満たす偏微分方程式を導く.

### 2.1 模型

サイト数  $L$  ( $L \geq 3$ ) の一次元格子を考える. サイト  $i$  では, 粒子がある状態 ( $\tau_i = 1$ ), またはない状態 ( $\tau_i = 0$ ) のいずれかを取る. ここでは, 粒子は前方のサイトが空いているとき, レート 1 で前方へホップする. そして, 粒子は左端からレート  $\alpha$  で流入し, 右端からレート  $\beta$  で流出する.

次に, 吸脱着機構について説明する. 隣接する両サイトに粒子がない場合, 図 2 (a) のとおり, 粒子はレート  $\omega_1$  で吸脱着する. 隣接するサイトのどちらか一方に粒子がある場合, 図 2 (b) のとおり, 粒子はレート  $\omega_2$  で吸脱着する. 隣接する両サイトに粒子がある場合, 図 2 (c) のとおり, 粒子はレート  $\omega_3$  で吸脱着する. 左端のサイトでは, 図 2 (d) のとおり, 左端から 2 番目のサイトに粒子がない場合はレート  $\omega_1$ , 粒子がある場合はレート  $\omega_2$  で脱離する. また, 右端のサイトでは, 図 2 (e) のとおり, 右端から 2 番目のサイトに粒子がない場合はレート  $\omega_1$ , 粒子がある場合はレート  $\omega_2$  で吸着する.



\* 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

図2 (a) 隣接する両サイトに粒子がない場合. (b) 隣接するサイトのどちらか一方に粒子がある場合. (c) 隣接する両サイトに粒子がある場合. (d) 左境界. (e) 右境界.

## 2.2 平均場近似

このモデルの密度プロファイルに関する偏微分方程式を導出する. サイト  $i$  ( $1 < i < L$ ) の粒子密度の期待値変化は次のように表現できる.

$$\begin{aligned} \frac{d\langle\tau_i\rangle}{dt} = & \langle\tau_{i-1}(1-\tau_i)\rangle - \langle\tau_i(1-\tau_{i+1})\rangle \\ & + \omega_1\langle(1-\tau_{i-1})(1-\tau_i)(1-\tau_{i+1})\rangle \\ & + \omega_2\langle(1-\tau_{i-1})(1-\tau_i)\tau_{i+1}\rangle \\ & + \omega_2\langle\tau_{i-1}(1-\tau_i)(1-\tau_{i+1})\rangle \\ & + \omega_3\langle\tau_{i-1}(1-\tau_i)\tau_{i+1}\rangle \\ & - \omega_1\langle(1-\tau_{i-1})\tau_i(1-\tau_{i+1})\rangle \\ & - \omega_2\langle(1-\tau_{i-1})\tau_i\tau_{i+1}\rangle \\ & - \omega_2\langle\tau_{i-1}\tau_i(1-\tau_{i+1})\rangle - \omega_3\langle\tau_{i-1}\tau_i\tau_{i+1}\rangle, \quad (1) \end{aligned}$$

ただし,  $\langle\cdot\rangle$  は期待値を表している. また, 両端のサイト ( $i = 1, L$ ) は次のように表現できる.

$$\begin{aligned} \frac{d\langle\tau_1\rangle}{dt} = & \alpha\langle 1-\tau_1\rangle - \langle\tau_1(1-\tau_2)\rangle \\ & - \omega_1\langle\tau_1(1-\tau_2)\rangle - \omega_2\langle\tau_1\tau_2\rangle. \\ \frac{d\langle\tau_L\rangle}{dt} = & \langle\tau_{L-1}(1-\tau_L)\rangle - \beta\langle\tau_L\rangle \\ & + \omega_1\langle(1-\tau_{L-1})(1-\tau_L)\rangle + \omega_2\langle\tau_{L-1}(1-\tau_L)\rangle. \end{aligned}$$

次に, 式 (1) に対して, 平均場近似及び流体力学極限を取ることで次の偏微分方程式が得られる.

$$\begin{aligned} \frac{\partial\rho}{\partial t} + (1-2\rho)\frac{\partial\rho}{\partial x} = & (1-2\rho) \\ & \times \left[ \Omega_1(1-\rho)^2 + 2\Omega_2\rho(1-\rho) + \Omega_3\rho^2 \right], \quad (2) \end{aligned}$$

ただし,  $\Omega_j = \omega_j L$  ( $j = 1, 2, 3$ ),  $t = L\bar{t}$  及び  $x = \frac{i}{L}$  ( $i = 1, 2, \dots, L$ ) とする.

## 3 解析

拡張 TAESP-LK の定常状態について考察する.

### 3.1 定常解

式 (2) から定常解を導く. 定常状態では  $\frac{\partial\rho}{\partial t} = 0$  と置くことができる. このことから直ちに, 自明な解  $\rho(x) = \frac{1}{2}$  を持つことがわかる. また, 次の微分方程式を解くことで, その他の解を得ることができる.

$$\begin{aligned} \frac{d\rho}{dx} = & \Omega_1(1-\rho)^2 + 2\Omega_2\rho(1-\rho) + \Omega_3\rho^2 \\ = & (\Omega_1 - 2\Omega_2 + \Omega_3)\rho^2 - 2(\Omega_1 - \Omega_2)\rho + \Omega_1. \quad (3) \end{aligned}$$

ここでは,  $\Omega_1 - 2\Omega_2 + \Omega_3 \neq 0$  の場合を考える. 式 (3) の微分方程式は, 定数係数であることから次の特殊解を持つことが

わかる.

$$\xi_{\pm} = \frac{\Omega_1 - \Omega_2 \pm \sqrt{\Omega_2^2 - \Omega_1\Omega_3}}{\Omega_1 - 2\Omega_2 + \Omega_3}.$$

そして,  $\Omega_2^2 - \Omega_1\Omega_3 > 0$  のとき, 特殊解  $\xi := \xi_+$ , 左境界条件  $\rho(0) = \alpha$  及び右境界条件  $\rho(1) = 1 - \beta$  を用いることで, 定常状態における左近傍解  $\rho_L(x)$  及び右近傍解  $\rho_R(x)$  が次のとおり得られる.

$$\begin{aligned} \rho_L(x) = & \frac{[a(\alpha + \xi) + b]\xi e^{-(2a\xi+b)x} + (a\xi + b)(\alpha - \xi)}{[a(\alpha + \xi) + b]e^{-(2a\xi+b)x} - a(\alpha - \xi)}, \\ \rho_R(x) = & \frac{[a(1 - \beta + \xi) + b]\xi e^{(2a\xi+b)(1-x)} + (a\xi + b)(1 - \beta - \xi)}{[a(1 - \beta + \xi) + b]e^{(2a\xi+b)(1-x)} - a(1 - \beta - \xi)}, \end{aligned}$$

ただし,  $a = \Omega_1 - 2\Omega_2 + \Omega_3$  及び  $b = -2(\Omega_1 - \Omega_2)$  とする. なお,  $\Omega_2^2 - \Omega_1\Omega_3 = 0$  のとき, 先行研究の模型と一致する [4].

次に, 密度プロファイルに見られる衝撃波の位置について考察する. 衝撃波の速さ  $v_S$  は, 次の式で表現できることが知られている [5, 6].

$$v_S = \frac{\rho_R(1 - \rho_R) - \rho_L(1 - \rho_L)}{\rho_R - \rho_L} = 1 - \rho_L - \rho_R.$$

また, 定常状態を考えていることから, 衝撃波が安定していると仮定する. つまり, 衝撃波の速さ  $v_S$  を 0 とすることで, 衝撃波の位置において左近傍解と右近傍解の関係は次のように得られる.

$$\rho_R(x_S) = 1 - \rho_L(x_S), \quad (4)$$

ただし,  $x_S$  は衝撃波の位置とする. 衝撃波の位置は,  $\rho_L(x)$ ,  $\rho_R(x)$  及び式 (4) から求めることができる. そして  $\Delta = \rho_R(x_S) - \rho_L(x_S) > 0$  及び  $0 < x_S < 1$  となるとき, 衝撃波は存在する.

以上から, 定常状態における密度プロファイルが得られる. 衝撃波が存在するとき, 密度プロファイルは次のように与えられる.

$$\rho(x) = \begin{cases} \rho_L(x) & (0 < x < x_S) \\ \rho_R(x) & (x_S < x < 1) \end{cases}$$

また, その他の場合は次のように表現される.

$$\rho(x) = \begin{cases} \rho_L(x) & (0 < x < x_1) \\ \frac{1}{2} & (x_1 < x < x_2) \\ \rho_R(x) & (x_2 < x < 1) \end{cases}$$

$x_1$  及び  $x_2$  はそれぞれ  $\rho_L(x_1) = \frac{1}{2}$  及び  $\rho_R(x_2) = \frac{1}{2}$  となる位置である. ただし,  $x_1 < 0$  ( $x_2 > 1$ ) のときは,  $\rho_L(x)$  ( $\rho_R(x)$ ) が無いとする. なお, 両境界ではそれぞれ,  $\rho(0) = \alpha$  及び  $\rho(1) = 1 - \beta$  となる.

### 3.2 相図と密度プロファイル

具体例として,  $\Omega_1 = 0.3$ ,  $\Omega_2 = 0.4$  及び  $\Omega_3 = 0.2$  のときの相図及び各相における密度プロファイルを示す.

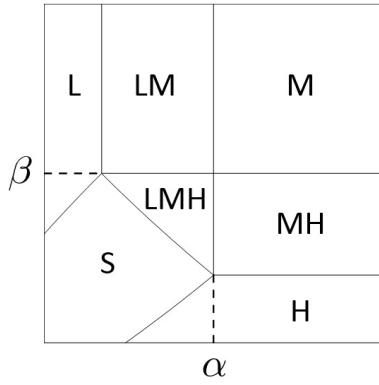


図3  $\Omega_1 = 0.3$ ,  $\Omega_2 = 0.4$  及び  $\Omega_3 = 0.2$  のときの相図.

図3は、 $\Omega_1 = 0.3$ ,  $\Omega_2 = 0.4$  及び  $\Omega_3 = 0.2$  のときの相図である。この場合、7つの相に区別することができる。まず、3つの基本相（高密度相（H）・低密度相（L）・最大流量相（M））が見られる。“H”（“L”）では、密度が $\frac{1}{2}$ より高く（低く）なる。そして、密度プロファイルは、 $\rho_R$ （ $\rho_L$ ）で表現される。また、“M”では、密度は $\frac{1}{2}$ となる。密度が $\frac{1}{2}$ のとき流量が最大となることから、最大流量相と呼ぶ。次に、“S”は、衝撃波が観測される相を示している。最後に、混合相（最大流量相及び高密度相（MH）・低密度相及び最大流量相（LM）・低密度相、最大流量相及び高密度相（LMH））が見られる。“MH”（“LM”）の密度プロファイルは、 $\frac{1}{2}$  及び  $\rho_R$ （ $\rho_L$  及び  $\frac{1}{2}$ ）で構成される。また、“LMH”の密度プロファイルは、 $\rho_L$ ,  $\frac{1}{2}$  及び  $\rho_R$  で表現される。なお、衝撃波相の境界は、衝撃波の存在と位置を考慮することで導くことができる。

さらに、図4では、平均場近似及びモンテカルロシミュレーションによって得られた各相における密度プロファイルを示している。実線は平均場近似から、また、点線はモンテカルロシミュレーションからそれぞれ得られた密度プロファイルである。この図から、平均場近似によって得られた密度プロファイルがモンテカルロシミュレーションの結果と精度良く一致していることがわかる。

## 4 まとめ

本稿では、隣接サイトの状態に依存して吸脱着レートが異なるTASEP-LKについて考察した。特に、各吸脱着レートが任意かつ独立に値を取ることができるようにモデルを拡張した。そして、平均場近似を用いることで、相図及び定常状態の密度プロファイルを得ることに成功した。隣接サイトの状態ごとに吸着レート及び脱離レートそれぞれが任意かつ独立に値が取れるよ

うな場合や実際の現象への応用などについては、今後の課題である。

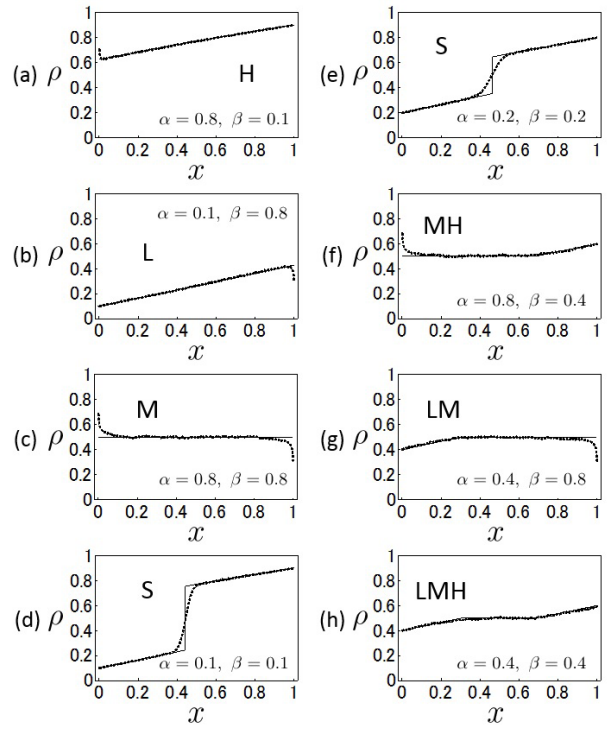


図4  $\Omega_1 = 0.3$ ,  $\Omega_2 = 0.4$  及び  $\Omega_3 = 0.2$  の場合における各相の密度プロファイル.

## 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] A. Parmeggiani, T. Franosch, and E. Frey, Phys. Rev. Lett. **90**, 086601 (2003).
- [3] M. R. Evans, R. Juhász and L. Santen, Phys. Rev. E **68**, 026117 (2003).
- [4] H. D. Vuijk, R. Rens, M. Vahabi, F. C. MacKintosh, and A. Sharma, Phys. Rev. E **91**, 032143 (2015).
- [5] M. J. Lighthill and G. B. Whitham, Proc. R. Soc. London, Ser. A **229**, 317 (1955).
- [6] R. A. Blythe and M. R. Evans, J. Phys. A: Math. Theor. **40**, R333 (2007).