

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と複雑ネットワークへの応用

一木, 信吾
東京大学先端科学技術研究センター

柳澤, 大地
東京大学先端科学技術研究センター

西成, 活裕
東京大学先端科学技術研究センター

<https://doi.org/10.15017/1832816>

出版情報：応用力学研究所研究集会報告. 28A0-S6 (1), pp.93-98, 2017-03. Research Institute for Applied Mechanics, Kyushu University

バージョン：

権利関係：



応用力学研究所研究集会報告 No.28AO-S6
「非線形波動研究の深化と展開」 (研究代表者 辻本 諭)

Reports of RIAM Symposium No.28AO-S6

Deepening and expansion of nonlinear wave science

Proceedings of a symposium held at Chikushi Campus, Kyushu University,
Kasuga, Fukuoka, Japan, November 3 - November 5, 2016

Article No. 15 (pp. 93 - 98)

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と複雑ネットワークへの応用

一木 信吾 (ICHIKI Shingo), 柳澤 大地 (YANAGISAWA Daichi), 西成 活裕 (NISHINARI Katsuhiko)

(Received 16 January 2017; Accepted 12 March 2017)



Research Institute for Applied Mechanics
Kyushu University
March, 2017

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と複雑ネットワークへの応用

東京大学 先端科学技術研究センター 一木 信吾 (ICHIKI Shingo)
東京大学 先端科学技術研究センター 柳澤 大地 (YANAGISAWA Daichi)
東京大学 先端科学技術研究センター 西成 活裕 (NISHINARI Katsuhiko)

概要 前方の隣接サイトの状態に依存する吸脱着機構を持つ一次元開放系の完全非対称単純排他過程に関して、平均場近似を用いて定常状態について解析した結果を紹介する。また、最後に、この模型の今後の展望の一つとして、複雑ネットワークへの応用について言及する。

1 はじめに

非対称単純排他過程 (Asymmetric simple exclusion process; ASEP) とは、排除体積効果を持つ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 [1–4]。特に、粒子が一方向にのみ動く場合は、完全非対称単純排他過程 (Totally asymmetric simple exclusion process; TASEP) と呼ばれている。これらは、模型自身の厳密な理論解析から、車や生物などの自己駆動粒子系に見られる現象を理解するために用いられるなど、多方面から研究されている [4]。

最近、図 1 のように、開放境界を持つ一次元格子上的 TASEP に、Langmuir kinetics (LK) と呼ばれる格子上的任意の場所における粒子の吸脱着メカニズムを加えた模型が、生物物理の文脈で提案された [5]。この模型では、TASEP

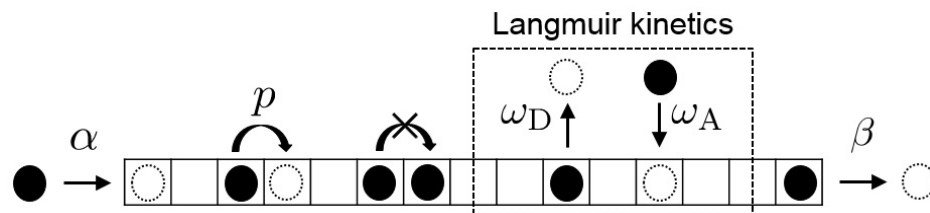


図 1 開放系 TASEP-LK の模式図。

と同様に、粒子は前方の隣接サイトが空いているとき、レート p (時間 dt の間に確率 pdt) で前方へ移動する。また、両境界それぞれにおいて粒子は、左端からレート α で流入し、右端からレート β で流出する。さらに、サイトが空いていれば、レート ω_A で粒子が吸着し、サイト上の粒子はレート ω_D で脱離するといった LK を持つ。本稿において、当該模型を TASEP-LK と呼ぶ。TASEP-LK は、平均場近似を用いた手法によって、定常状態における密度プロファイルや相図について詳しく調べられている [5–7]。さらに近年では、LK が隣接サイトの状態に依存して吸脱着レートが変化するような模型がいくつか提案されている [8–11]。

本稿では、[11] に基づいて、前方の隣接サイトの状態によって吸脱着レートが異なる LK を持つ TASEP-LK について詳細に紹介する。さらに、この模型の一つの発展として、複雑ネットワークについて簡潔に述べる。

本稿の構成は、次のとおりである。まず、2 では、本稿で扱う模型の詳細について説明する。次に、3 において、当該模型の定常状態について解析する。3.1 では、平均場近似を用いることで、理論的に定常状態における密度プロファイルを導出する。そして、3.2 では、平均場解析によって得られる密度プロファイルと有限系の模型をモンテカルロシミュレーションすることで得られる密度プロファイルを比較検証する。さらに、3.3 では、平均場解析によって得られる理論式を用いることで、境界の流出入レートをパラメータとした相図を示す。この相図から、境界の流出入レートの値によって、密度プロファイルがどのように変化するか分かる。最後に、今後の展望の一つとして、複雑ネットワークへの応用について言及することでまとめる。

2 模型

ここでは、本稿で扱う前方の隣接サイトの状態に依存する吸脱着機構を持つ一次元開放系の TASEP について説明する。本稿では、当該模型を開放系 TASEP-LKF と呼ぶことにする。図 2 は、開放系 TASEP-LKF の模式図である。

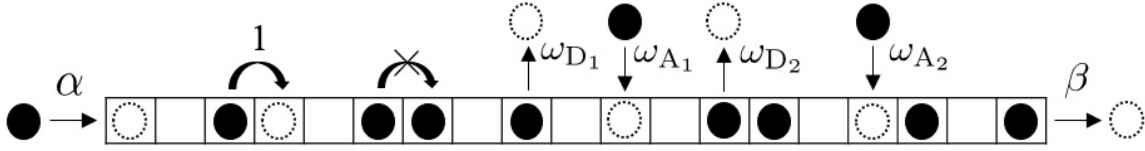


図 2 開放系 TASEP-LKF の模式図。

まず、サイト数 L ($L \geq 3$) の一次元格子を考える。サイト $i \in [1, L]$ では、粒子がある状態 ($\tau_i = 1$)、または、粒子がない状態 ($\tau_i = 0$) のいずれかを取る。

次に、粒子の動きについて定める。ここでは簡単のため、粒子は前方のサイトが空いているとき、レート 1 で前方へ移動するとする。また、左端 ($i = 1$) では、粒子は左端からレート α で流入し、右端 ($i = L$) では、レート β で流出するとする。

最後に LK について定める。まず、隣接する前方のサイトに粒子がない場合について考える。サイト $i \in [2, L-1]$ に粒子がないとき、粒子がレート $\omega_{A_1} (> 0)$ で吸着するとする。また、サイト $i \in [2, L-1]$ に粒子があるとき、粒子がレート $\omega_{D_1} (> 0)$ で離脱するとする。次に、隣接する前方のサイトに粒子がある場合について考える。サイト $i \in [2, L-1]$ に粒子がないとき、粒子がレート $\omega_{A_2} (> 0)$ で吸着するとする。また、サイト $i \in [2, L-1]$ に粒子があるとき、粒子がレート $\omega_{D_2} (> 0)$ で離脱するとする。なお、両端 ($i = 1, L$) において LK は考えないものとする。

3 定常状態の解析

ここでは、前章で設定した模型の定常状態について解析をする。まず、3.1 では、平均場近似を用いることで定常状態の密度プロファイルを導出する。次に、3.2 では、平均場解析によって得られる密度プロファイルと有限系の模型をモンテカルロシミュレーションすることで得られる密度プロファイルを比較検証する。最後に、境界の流出入レートによって、密度プロファイルがどのように変化するかを相図によって示す。

3.1 平均場解析

ここでは、定常状態における密度プロファイルを導出する。まず、サイト $i \in [2, L]$ の粒子密度に関する期待値の時間発展について定式化すると、次のように表現できる。

$$\begin{aligned} \frac{d\langle \tau_i \rangle}{dt} &= \langle \tau_{i-1}(1 - \tau_i) \rangle - \langle \tau_i(1 - \tau_{i+1}) \rangle \\ &\quad + \omega_{A_1} \langle (1 - \tau_i)(1 - \tau_{i+1}) \rangle + \omega_{A_2} \langle (1 - \tau_i)\tau_{i+1} \rangle - \omega_{D_1} \langle \tau_i(1 - \tau_{i+1}) \rangle - \omega_{D_2} \langle \tau_i\tau_{i+1} \rangle. \end{aligned} \quad (1)$$

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、それぞれ次のように表現できる。

$$\frac{d\langle \tau_1 \rangle}{dt} = \alpha \langle 1 - \tau_1 \rangle - \langle \tau_1(1 - \tau_2) \rangle. \quad (2)$$

$$\frac{d\langle \tau_L \rangle}{dt} = \langle \tau_{L-1}(1 - \tau_L) \rangle - \beta \langle \tau_L \rangle. \quad (3)$$

次に、式 (1) に対して平均場近似を実行する。そして、次式を用いて空間スケールを変換する。

$$\langle \tau_{i\pm 1} \rangle = \rho(x) \pm \frac{1}{L} \frac{\partial \rho}{\partial x}(x) + \frac{1}{2} \frac{1}{L^2} \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2}(x) + \mathcal{O}\left(\frac{1}{L^3}\right). \quad (4)$$

ただし、 $x = i/L$ とした。さらに、 $t = \bar{t}L$ となるように時間のスケールを変換する。最後に、 L に対して極限を取ると

($L \rightarrow \infty$), 式 (1) は次のようになる.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + (1 - 2\rho) \frac{\partial \rho}{\partial x} = a\rho^2 + b\rho + c. \quad (5)$$

ただし, $a = \Omega_{A_1} - \Omega_{A_2} + \Omega_{D_1} - \Omega_{D_2}$, $b = -2\Omega_{A_1} + \Omega_{A_2} - \Omega_{D_1}$, $c = \Omega_{A_1}$ 及び $\Omega_{X_j} = \omega_{X_j} L$ ($X = A, D, j = 1, 2$) と置いた. 注意すべき点として, ここでは $\Omega_{X_j} = \omega_{X_j} L$ が, 有限となるような極限操作を考える必要がある.

本稿では, 模型の定常状態に興味があるので, 式 (5) の $\partial \rho / \partial t$ を 0 と置き換えることで, 定常状態における密度プロファイルを満たす方程式が次のように得られる.

$$(1 - 2\rho) \frac{d\rho}{dx} = a\rho^2 + b\rho + c. \quad (6)$$

ただし, ここでは, 式 (6) の右辺の係数は 0 ではないとする. なお, 注意すべき点として, ここでは $\Omega_{X_j} > 0$ ($X = A, D, j = 1, 2$) を考えていることから, $D := b^2 - 4ac = (\Omega_{A_2} - \Omega_{D_1})^2 + 4\Omega_{A_1}\Omega_{D_2} > 0$ となることがわかる. よって, $\rho \neq 1/2$ の場合において, 式 (6) から次式が得られる.

$$\log |\rho - \rho_+|^A |\rho - \rho_-|^B = x + C. \quad (7)$$

ただし, ρ_+ 及び ρ_- は $a\rho^2 + b\rho + c = 0$ の解, そして,

$$A = \frac{1 - 2\rho_+}{a(\rho_+ - \rho_-)}, \quad (8)$$

$$B = \frac{2\rho_- - 1}{a(\rho_+ - \rho_-)}, \quad (9)$$

とし, C は境界条件から決まる積分定数である. なお, 定常状態において両境界では, 式 (2) 及び (3) から, それぞれ近似的に $\rho(1) = \alpha$ 及び $\rho(L) = 1 - \beta$ と置くことができる. これらの境界条件を用いることで, 左近傍解 ρ_L 及び右近傍解 ρ_R は次のように得られる.

$$x = \log \left| \frac{\rho_L(x) - \rho_+}{\alpha - \rho_+} \right|^A \left| \frac{\rho_L(x) - \rho_-}{\alpha - \rho_-} \right|^B, \quad (10)$$

$$x = 1 + \log \left| \frac{\rho_R(x) - \rho_+}{1 - \beta - \rho_+} \right|^A \left| \frac{\rho_R(x) - \rho_-}{1 - \beta - \rho_-} \right|^B. \quad (11)$$

次に, TASEP 及び TASEP-LK などにも見られる密度プロファイルが不連続になる点, すなわち衝撃波の位置 x_S について考察する. 衝撃波の前後で流量が保存していると仮定すると, 衝撃波の速さ v_S は, 次式で表現できることがわかる [3, 12].

$$v_S = \frac{\rho_R(1 - \rho_R) - \rho_L(1 - \rho_L)}{\rho_R - \rho_L} = 1 - \rho_L - \rho_R. \quad (12)$$

なお, 定常状態における衝撃波の位置 x_S は安定している ($v_S = 0$) と仮定すると (3.2 で示すとおり, 実際にシミュレーション結果からわかる.), 左近傍解 ρ_L と右近傍解 ρ_R の関係式が次のとおり得られる.

$$\rho_R(x_S) = 1 - \rho_L(x_S). \quad (13)$$

衝撃波の位置 x_S は, 式 (10), (11) 及び (13) から決めることができる.

特に, 吸着レートと脱離レートが等しい場合は ($\omega_{A_j} = \omega_{D_j}$ ($j = 1, 2$)), 次のように左近傍解 ρ_L , 右近傍解 ρ_R 及び衝撃波の位置 x_S を明示的に表すことができる.

$$\rho_L(x) = \left(\alpha + \frac{\Omega_1}{\Omega_2 - \Omega_1} \right) e^{(\Omega_2 - \Omega_1)x} - \frac{\Omega_1}{\Omega_2 - \Omega_1}, \quad (14)$$

$$\rho_R(x) = \left(1 - \beta + \frac{\Omega_1}{\Omega_2 - \Omega_1} \right) e^{(\Omega_2 - \Omega_1)(x-1)} - \frac{\Omega_1}{\Omega_2 - \Omega_1}, \quad (15)$$

$$x_S = \frac{1}{\Omega_1 - \Omega_2} \log \left| \frac{1}{\Omega_1 + \Omega_2} \left[\Omega_1 + (\Omega_2 - \Omega_1)\alpha + [\Omega_2 - (\Omega_2 - \Omega_1)\beta] e^{\Omega_1 - \Omega_2} \right] \right|. \quad (16)$$

ただし, $\Omega_1 := \Omega_{A_1} = \Omega_{D_1}$, $\Omega_2 := \Omega_{A_2} = \Omega_{D_2}$ 及び $\Omega_1 \neq \Omega_2$ である.

以上から, 得られた左近傍解 ρ_L 及び右近傍解 ρ_R を用いることで, 定常状態における密度プロファイルを構成することができる.

3.2 密度プロファイル

ここでは, 3.1 において, 平均場近似を用いて導いた密度プロファイルが, 実際の現象を精度良く表現できているのかについて, モンテカルロシミュレーションを用いた結果と比較することで現象論的に考察する. そこで, 表 1 のとおり, いくつか具体的な吸脱着レートを考えて比較検証を行った.

	Ω_{A_1}	Ω_{D_1}	Ω_{A_2}	Ω_{D_2}
(A)	0.8	0.1	0.2	0.4
(B)	0.2	0.4	0.8	0.1
(C)	0.5	0.5	0.25	0.25

表 1 吸脱着レート.

(A) は, Ω_{A_1} 及び Ω_{D_2} の値を, Ω_{A_2} 及び Ω_{D_1} の値よりそれぞれ大きく取った場合である. これは, 前方が空いているときはより粒子が吸着し, 前方が埋まっているときは, より粒子が脱離する場合を表している. (B) は, (A) の逆で, Ω_{A_2} 及び Ω_{D_1} の値を, Ω_{A_1} 及び Ω_{D_2} の値よりそれぞれ大きく取った場合である. 最後に, (C) は, $\Omega_{A_1} = \Omega_{D_1}$ 及び $\Omega_{A_2} = \Omega_{D_2}$ となる場合である. つまり, 隣接する前方サイトの状態が同じであれば, 吸着レートと脱離レートが等しくなる場合を表している.

図 3 は, 平均場解析から得られた密度プロファイル (実線) とモンテカルロシミュレーションから得られた密度プロファイル (点線) を比較してまとめたものである. ここでは, いくつか具体的な境界の流出入レートを取り上げて, 密度プロファイルの特徴を図示した.

このモデルでは, 境界の流出入レートの値によって, 最大 7 つの相に区別することができる. 具体的には, 3 つの基本相 (低密度相 (L)・高密度相 (H)・最大流量相 (M)) 及び混合相 (衝撃波相 (S)・低密度相及び最大流量相 (LM)・最大流量相及び高密度相 (MH)・低密度相, 最大流量相及び高密度相 (LMH)) が観測できる. 低密度相 (L) (高密度相 (H)) は, ρ_L (ρ_R), 最大流量相 (M) は, $1/2$ で表現される相で, 混合相はこれらを組み合わせた相である. なお, ρ_L と ρ_R が不連続にぶつかる点は, 流体力学などで良く知られている衝撃波と解釈することができる. このような特徴が見られる相をここでは衝撃波相 (S) と呼ぶ.

図 3 から, 平均場解析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良く一致していることがわかる. つまり, 平均場近似を用いることで, 密度プロファイルを精度良く構成できることが理解できる.

3.3 相図

3.2 において, 境界の流出入レートの値によって, 密度プロファイルが大きく変化することがわかった. ここでは, 境界の流出入レートの値によって, どのような相が見られるのか, 平均場解析によって得られた理論式から相図を示す. 図 4 は, 表 1 の (A), (B) 及び (C) の相図を示したものである. 相図によって, 境界の流出入レートの値が密度プロファイルに与える影響を体系的に捉えることができる.

なお, 図 4 の (A) 及び (B) においては, 参考までに点線で, TASEP-LK ($\Omega_A := \Omega_{A_1} = \Omega_{A_2} = 0.5$, $\Omega_D := \Omega_{D_1} = \Omega_{D_2} = 0.25$) の場合の相境界を示した. この吸脱着レートは, (A) 及び (B) それぞれの吸着レートの和 ($\Omega_{A_1} + \Omega_{A_2}$) 及び脱離レートの和 ($\Omega_{D_1} + \Omega_{D_2}$) と同じになるように設定されている.

(A) は, TASEP-LK (点線) に比べて, 高密度相に支配される領域が縮小していることがわかる. これは, 交通流を例に取って考えると, 前方が空いているところに車線変更し, 前方が混んできたなら他車線へ車線変更するといった合理的な動きをすることで, 境界の流出入レートの変化に対して, 道路全体が混雑する状況が減ることを意味している. また, (B) は (A) とは逆に, 高密度相に支配される領域が広がっている.

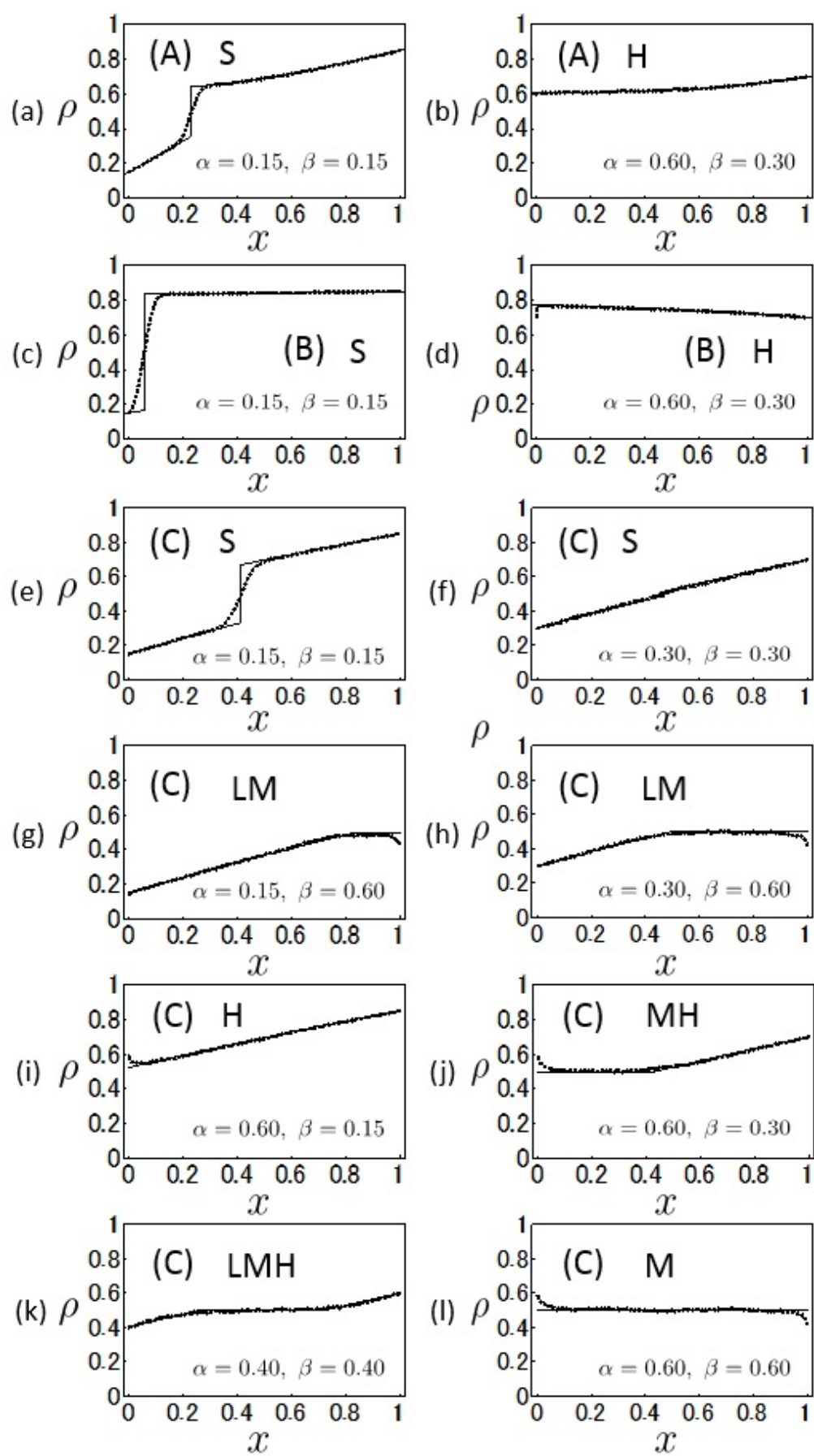


図3 吸脱着レートを表1の (A), (B) 及び (C) としたときの密度プロファイルの例.

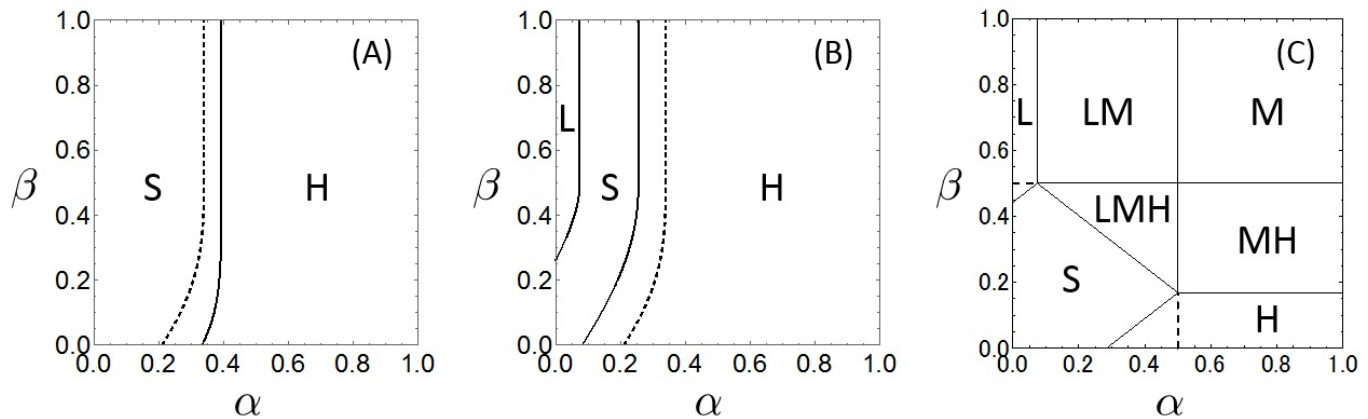


図4 吸脱着レートを表1の (A), (B) 及び (C) としたときの相図.

4 複雑ネットワークへの応用について

最後に, TASEP-LKF の今後の展望の一つとして, 複雑ネットワークについて簡単に言及する.

複雑ネットワークの研究では, 抽象化したネットワーク構造 (ノードのつながり方など) に着目した研究が中心で, ノード間の距離やリンク上に構造を考えないことが多い. このように抽象化することで, 数学的に扱いやすくなり, 実際のネットワークを考察する上で, 多くの示唆や本質が得られるからである. 一方で, 高速道路, インターネット回線や微小管など, 実際のネットワークにおいて “もの” が移動する際, 目的地までの距離があり, そして時間が掛かる. より現実に近い議論をするには, ノード間の距離を考える方が自然である. しかし, このようなモデルを設計すると, とたんに数学的な扱いが困難になり, 定式化や定量的な扱いができなくなる恐れがある. この数学的扱いの困難さを軽減する一案として, リンクを ASEP にする方法が考えられる. このようなモデルは, 多くの先行研究があり, TASEP-LK をリンクとしたネットワークモデルの研究も行われている [13,14].

そこで, 本稿で紹介した TASEP-LKF をリンクに用いることで, 先行研究よりも複雑な吸脱着機構を持つ発展的なネットワークモデルを考えることができる. 前章まで述べたとおり, 進行方向前方へ依存して “もの” が出入りする仕組みを考えることは実現象を考える上で自然である. また, TASEP-LKF は, 平均場近似を用いることで定式化が可能であることから, ネットワークに拡張してもある程度, 数学的な議論が可能であることがわかってきている. これらの詳細な議論については, 今後の課題としたい.

参考文献

- [1] C.T. MacDonald, J.H. Gibbs, and A.C. Pipkin, *Biopolymers* **6**, 1 (1968).
- [2] B. Derrida, M.R. Evans, V. Hakim, and V. Pasquier, *J. Phys. A: Math. Gen.* **26**, 1493 (1993).
- [3] R.A. Blythe and M.R. Evans, *J. Phys. A: Math. Theor.* **40**, R333 (2007).
- [4] A. Schadschneider, D. Chowdhury, and K. Nishinari, *Stochastic Transport in Complex Systems: From Molecules to Vehicles* (Elsevier Science, 2010).
- [5] A. Parmeggiani, T. Franosch, and E. Frey, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 086601 (2003).
- [6] M.R. Evans, R. Juhász, and L. Santen, *Phys. Rev. E* **68**, 026117 (2003).
- [7] A. Parmeggiani, T. Franosch, and E. Frey, *Phys. Rev. E* **70**, 046101 (2004).
- [8] H.D. Vuijk, R. Rens, M. Vahabi, F.C. MacKintosh, and A. Sharma, *Phys. Rev. E* **91**, 032143 (2015).
- [9] S. Ichiki, J. Sato, and K. Nishinari, *J. Phys. Soc. Jpn.* **85**, 044001 (2016).
- [10] S. Ichiki, J. Sato, and K. Nishinari, *Eur. Phys. J. B* **89**, 135 (2016).
- [11] D. Yanagisawa and S. Ichiki, *Lecture Notes in Computer Science* **9863**, *Cellular Automata*, 405 (2016).
- [12] M.J. Lighthill and G.B. Whitham, *Proc. R. Soc. London, Ser. A* **229**, 317 (1955).
- [13] I. Neri, N. Kern, and A. Parmeggiani, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 098102 (2013).
- [14] I. Neri, N. Kern, and A. Parmeggiani, *New J. Phys.* **15**, 085005 (2013).