

# 吸着レーン付き TASEP における吸着効率の逆転現象

江崎貴裕<sup>1</sup>, 西成活裕<sup>2</sup>

<sup>1</sup> 東京大学 工学系研究科 航空宇宙工学専攻

<sup>2</sup> 東京大学 先端科学技術研究センター

## 概要

本研究では非対称単純排除過程 (ASEP: Asymmetric Simple Exclusion Process) を 2 レーンに拡張し, 1 レーンを吸着レーンとして吸着・脱離 (adsorption/desorption) のダイナミクスを加える. 各々の粒子は境界に到達するまでに最大一度だけ吸着されるとしたとき, 粒子が一度の旅行で吸着される割合 (吸着効率) が重要な量となる. シミュレーションでは吸着・脱離を支配するパラメータによりこの吸着効率の密度依存性が逆転する現象が見られた. バランス方程式を基にした近似式を用いてこの現象について理論的に説明する.

## Reversal dynamics of “adsorption efficiency” in a totally asymmetric simple exclusion process with an adsorption lane

Takahiro Ezaki<sup>1</sup>, Katsuhiro Nishinari<sup>2,1</sup>

<sup>1</sup> Department of Aeronautics and Astronautics, School of Engineering, The University of Tokyo, 7-3-1, Hongo, Bunkyo-ku, Tokyo 113-8656, Japan

<sup>2</sup> Research Center for Advanced Science and Technology, The University of Tokyo, 4-6-1, Komaba, Meguro-ku, Tokyo 153-8904, Japan

## Abstract

We propose an extended asymmetric simple exclusion process with an adsorption lane. In the system, each particle can be adsorbed by the adsorption lane at most once per travel. The ratio of the adsorbed particle shows reversal dynamics for congestion of the system. We analyze this phenomenon by simulations and an approximate theory, and successfully derive its critical condition.

## 1 はじめに

近年, 非対称単純排除過程 (ASEP)[1] は非平衡物理のモデルとして [2], また交通流などの輸送過程のモデルとして [3] 様々な研究が進められている. ASEP はそのシンプルさから, 複数種類の粒子・レーンをはじめとして多くの拡張が考えられている [4, 5, 6, 7, 8] が, 一般に複雑なモデルになるほど解析的に調べるのが難しくなり, ほとんどの場合「平均場近似」や「クラスター近似」による評価が行われている.

本研究では, 粒子が最大一度吸着されてシステム

の外に出て行くモデルを考える. これは交通流でいうと大型駐車場などをイメージすると分かりやすい. 駐車場に入ってきた車は一度吸着され (駐車し), 用事を済ませると脱離 (駐車マスから出庫) する. 出庫した車は二度以上駐車せずにシステムから出て行く. ただし, 本研究は駐車場そのもののモデリングを行うわけではなく, 一般的にこのようなダイナミクスを持つ物理モデルについて調べることを目的としている.

このモデルの重要な性質は「一度だけ」吸着され

るという点で、これにより粒子の状態量が一つ増えるだけでなく明らかに空間が不均一になるため、従来の平均場近似といった空間均一性を前提とした解析方法を利用することが出来ない。本研究ではサイト間のバランス方程式から近似的に漸化式を導き、空間変化を捉える。更に、漸化式を和分することでシステムの重要な量である吸着効率が満たす方程式を導出し、そのダイナミクスについて説明する。

## 2 モデル

$L$  サイトから成る並列 1 次元格子を考える (各サイトは  $(i = 1 \dots L)$  によってラベル付けされている)。1 列は輸送レーンで通常の ASEP のレーンに対応し、1 列は吸着レーンに対応する。全  $2L$  サイトのうち、 $N$  サイトは粒子によって占められている。ただし各々のサイトは最大 1 つの粒子によって占められる。粒子はそれぞれ二つの状態 A (吸着後) と B (吸着前) のうちの一つを取る。一時間ステップでランダムに選ばれた粒子は確率によってその場所・状態を以下のルールに従って変化させる。

- 輸送レーンにいる B 粒子は確率  $p$  で隣の輸送サイト、確率  $\lambda$  で隣接する吸着サイトを選択する。選択されたサイトが他の粒子によって占められていなければ、そのサイトへ移動する。吸着が起こる場合その粒子の状態を A に変化させる。行き先サイトの選択は同時に行われる。 ( $p + \lambda \leq 1$ )
- 輸送レーンにいる A 粒子は確率  $p$  で隣の輸送サイトを選択する。選択されたサイトが他の粒子によって占められていなければ、そのサイトへ移動する。
- 吸着レーンにいる粒子 (自動的に A 粒子) は、確率  $\mu$  で隣接する輸送サイトを選択する。選択された輸送サイトが他の粒子によって占められていなければそのサイトへ移動する。

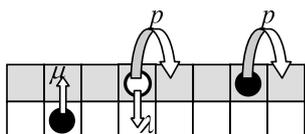


図 1: 粒子のアップデートルール。上のレーンは輸送レーン、下のレーンは吸着レーン。

境界については周期境界を設定する。ただし図 2 に示すように粒子が境界を跨ぐとき、その粒子の状態に関わらず状態 B に戻す。

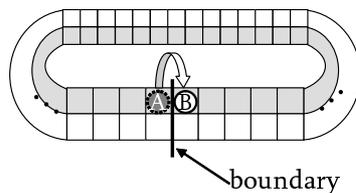


図 2: 系の全体図及び境界でのアップデートルール。境界を通過した粒子の状態は全て B 状態に戻される。

## 3 シミュレーション結果

ここで、吸着効率  $q$  (系の定常状態において、境界を通過する粒子のうち、A 状態である粒子の割合) を考える。この量は、粒子がどれだけ吸着されるかという系の重要な指標となる。吸着確率  $\lambda$ , 脱離確率  $\mu$ , システムにおける粒子の密度  $\rho_s = N/L (\leq 2)$  によって吸着効率  $q$  がどう変化するかを調べる。系のサイズ  $L = 100$ , ホップ確率  $p = 0.8$  と固定した場合のシミュレーション結果を図 3 に示す。全体の特徴

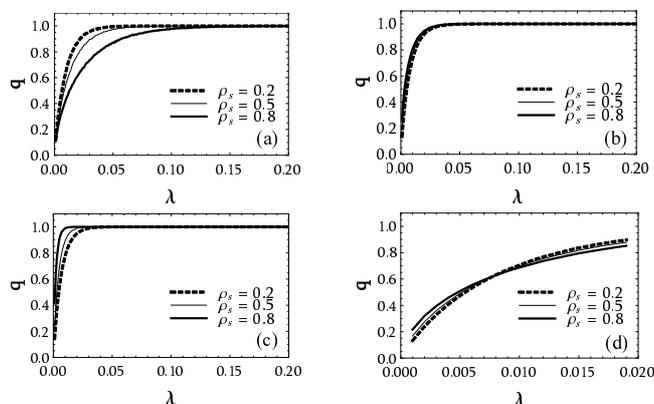


図 3: 吸着効率と吸着確率の関係。(a)  $\mu = 0.001$ , (b)  $\mu = 0.01$ , (c)  $\mu = 0.1$ , (d)  $\mu = 0.005$ 。

として、吸着確率が大きければほぼ全ての粒子が境界に到達する前に吸着されるため  $q = 1$  に漸近する。

一方で、各々のグラフに示されている三本の曲線の関係がパラメータ領域によって異なることもわかる。すなわち、(a) では系の密度が大きいほど  $q$  が小さくなっているのに対し、(c) では逆に系の密度が大

きいほど  $q$  が大きくなっている。さらに、(d) では三本の曲線がほぼ一点で交わっていることが分かる。(a) の領域では、密度が大きくなると吸着レーンの空気が減り吸着効率の減少につながるが、一方で (c) の領域では密度が大きくなると輸送レーンの密度が上昇し、システム滞在時間が増加し、吸着される機会が増すため結果として吸着効率の増加を引き起こす。すなわちパラメータ領域によっては「混雑」によって吸着効率を上げることが出来るという興味深い現象がみられる。

## 4 解析とまとめ

まず、変数  $\tau_i^B, \tau_i^A, \tau_i^C$  を定義する。それぞれ、輸送レーンにおいて B 状態粒子、A 状態粒子、吸着レーンにおいて粒子がサイト  $i$  に、「ある  $\tau_i = 1$ 」、「ない  $\tau_i = 0$ 」を表す変数である。粒子の流れについて時間平均を取ってサイト間の相関を無視することで以下のバランス方程式を得る。

$$\rho_{i-1}^B(1-\rho_0)p = \rho_i^B(1-\rho_0)p + \rho_i^B(1-\rho_i^C)\lambda \quad (1)$$

$$\rho_i^B(1-\rho_i^C)\lambda = \rho_i^C(1-\rho_0)\mu. \quad (2)$$

ただし、 $\rho_i^\alpha = \langle \tau_i^\alpha \rangle$  ( $\alpha = A, B, C$ ),  $\rho_0 = \rho_i^A + \rho_i^B$  で、輸送レーンにおける粒子の密度は場所に依存せず一定  $\rho_0$  と仮定する。式 (1) は輸送レーンのサイト  $i$  における B 状態粒子の収支、式 (2) はサイト  $i$  における吸着・脱離の収支を表している。二式を連立することで、

$$\rho_{i-1}^B = \rho_i^B + \frac{\mu}{p}\rho_i^C \quad (3)$$

$$= \rho_i^B + \frac{\mu}{p} \frac{\lambda\rho_i^B}{(1-\rho_0)\mu + \lambda\rho_i^B} \quad (4)$$

を得る。ただし境界においてはそのルールから初期条件  $\rho_0^B = \rho_0$  である。したがって  $\rho_0$  の値がわかれば順次密度を計算することができる。また、(3) の和をとることで得られる

$$\rho_0 = \rho_L^B + \frac{\mu}{p} \sum_{i=1}^L \rho_i^C \quad (5)$$

と、系全体の粒子数を数えることにより得られる

$$L\rho_0 + \sum_{i=1}^L \rho_i^C = L\rho_s \quad (6)$$

から、吸着効率  $q = \frac{\rho_0 - \rho_L^B}{\rho_0}$  を用いて、関係式

$$\rho_0 = \rho_s \frac{1}{1 + \frac{pq}{L\mu}} \quad (7)$$

が導出される。

未知変数  $\rho_0, q$  を評価するため、別の方法で  $q$  が満たす式を考える。 $q$  は「一回の旅行で、ある粒子が吸着される確率」と解釈し、近似的に以下のように評価する。

$$\begin{aligned} 1 - q &\approx \prod_{i=1}^L \{1 - \lambda(1 - \rho_i^C)\}^{\frac{1}{p(1-\rho_0)}} \\ &\approx \exp\left(-\sum_{i=1}^L \frac{\lambda(1 - \rho_i^C)}{p(1 - \rho_0)}\right) \\ &= \exp\left(\frac{\lambda L}{p}\right) \exp\left(-\frac{\lambda L}{p} \frac{2 - \rho_s}{1 - \rho_s / (1 + \frac{pq}{L\mu})}\right) \end{aligned} \quad (8)$$

ただし、 $q < 1$  となる場合に興味があるので、 $\lambda$  は十分小さいとして近似を行い、式変形には上で得た関係式を適宜用いることで最終的に  $q$  が満たす超越方程式を得た。この式から  $q$  が求まり、さらにその  $q$  を利用して  $\rho_0$  その他の量が求まる。

さて、前章で触れた逆転現象について考える。グラフにおいて線がほぼ一点で交わることから、「逆転がおきる点においてはその  $q$  の値は密度によらない」と仮定する。すなわち、このときの  $q$  を  $q^*$  と書く

$$\frac{\partial q^*}{\partial \rho_s} \equiv 0 \quad (9)$$

である。式 (8) よりこの条件から

$$q^* = \frac{L\mu}{p} \quad (10)$$

を得る。この式を (8) の最右辺に代入すると確かに  $\rho_s$  に依存しない値になっている。本研究では主に吸着・脱離のダイナミクスに注目し、 $L, p$  を一定にして  $\lambda, \mu$  を変化させることを考えたいのでこの  $q^*$  を与える  $\lambda, \mu$  をそれぞれ  $\lambda^*, \mu^*$  と書く。式 (10) を (8) に代入して、このような  $q^*$  が得られる (すなわち逆転の分岐線となる)  $\lambda^*, \mu^*$  の関係式

$$1 - \frac{\mu^* L}{p} = \exp\left(\frac{-\lambda^* L}{p}\right) \quad (11)$$

を得る。この分岐線を図 4 に示す。近似のときに仮定した  $\lambda$  が十分小さい領域ではよくあっていること

がわかる。この線より  $\mu$  が大きい場合、系の密度を上げると輸送レーンの密度が上がりやすく、滞在時間の増加により吸着効率が增加する。一方、逆の場合は吸着レーンの密度が上がりやすく、空き吸着サイト減少の効果により吸着効率が下がる。

以上で、提案した吸着効果つき ASEP モデルに対してシミュレーション・理論解析を行い、吸着効率におけるダイナミクスを説明することができた。ただし、特殊な境界条件を設定したため、一般の条件、特に開放系におけるダイナミクスなどを今後調べる必要がある。

## 参考文献

- [1] J.T. MacDonald, J.H. Gibbs, and A.C. Pipkin, Biopolymers 6,1 (1968).
- [2] B. Derrida and M. Evans, in Nonequilibrium Statistical Mechanics in One Dimension, edited by V. Privman (Cambridge University Press, Cambridge, England, 1997), Chap. 14, pp. 277-304.
- [3] D. Chowdhury, L. Santen, A. Schadschneider, Phys. Rep. 329 (2000) 199.
- [4] V. Karimipour, Europhys. Lett. 47, 304 (1999).
- [5] A. Kolomeisky, J. Phys. A 31, 1153 (1998).
- [6] G. Tripathy and M. Barma, Phys. Rev. Lett. 78, 3039 (1997).
- [7] V. Popkov and I. Peschel, Phys. Rev. E 64, 026126 (2001).
- [8] A. Parmeggiani, T. Franosch, and E. Frey, Phys. Rev. Lett. 90, 086601 (2003).

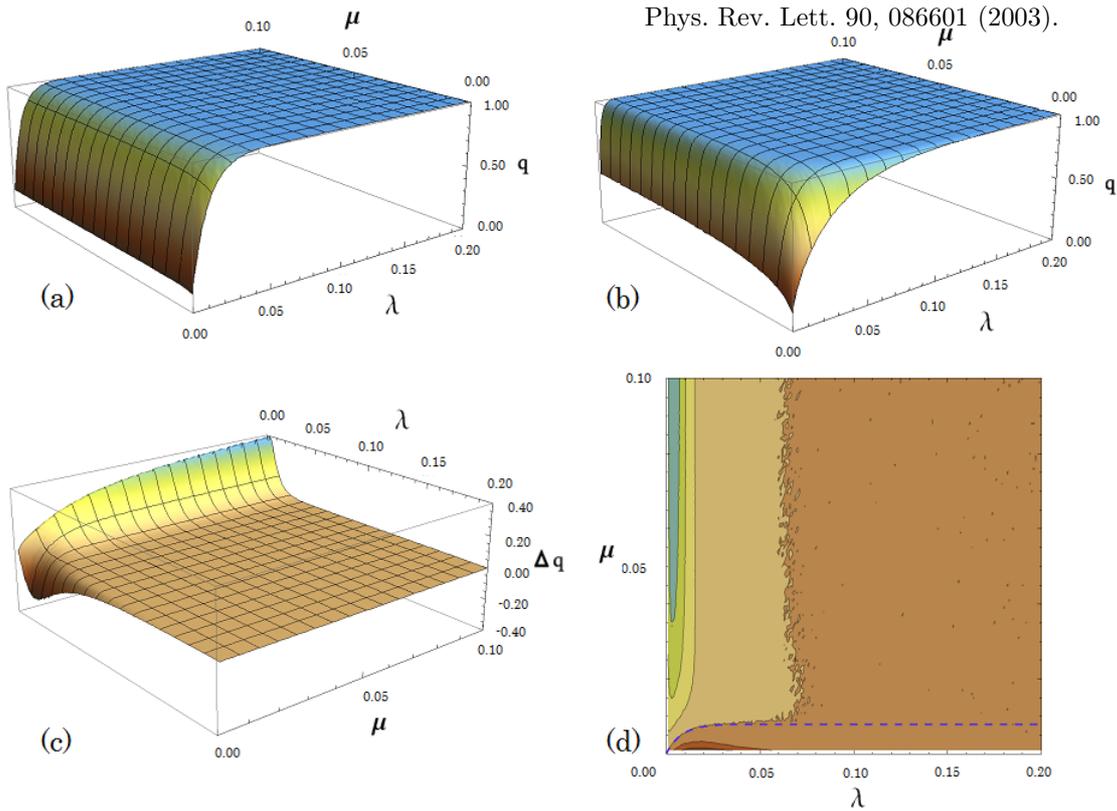


図 4: モンテカルロシミュレーションにより得られた  $\lambda, \mu$  と吸着効率の関係。(a)  $\rho_s = 0.2$  (b)  $\rho_s = 0.8$ . (c)(d) は (a) と (b) の差,  $\Delta q = q |_{\rho_s=0.8} - q |_{\rho_s=0.2}$  で (d) は (c) を上からみた図. 破線は式 (11) で求めた理論線.