円周上の離散時間 TASEP の定常状態における速度相関

山田泰之, 香取眞理

中央大学理工学部物理学科

概要

1次元周期境界条件下の離散時間 Totally Asymmetric Simple-Exclusion Process (TASEP) の 定常状態について議論する.我々はこのモデルに対して k 粒子速度相関関数を定義し,それら が一般にガウスの超幾何関数の和で与えられることを示す.特に k=2 の場合の速度相関関数 を用いて,速度共分散を求めることができる.その結果,熱力学的極限において速度共分散は ゼロになるという結果が得られる.つまり,無限粒子極限において粒子の速度は漸近的に独立な確率変数となる.

Velocity correlations of discrete-time TASEP in stationary state on a circle

Yasuyuki Yamada, Makoto Katori

Department of Physics, Faculty of Science and Engineering, Chuo University

Abstract

We discuss a discrete-time version of Totally Asymmetric Simple-Exclusion Process (TASEP) in stationary state on a finite one-dimensional lattice with the periodic boundary condition. We define k-particle velocity correlation functions for this model and give their exact and explicit expressions using the Gauss hypergeometric functions. We study covarience of two particles obtained from the velocity correlation functions with k=2. We prove that the velocity correlation becomes zero in the thermodynamic limit. It implies that velocities become independent asymptotically in the infinite particle limit.

1 イントロダクション

1次元離散時間 TASEP とは,1次元格子点上を粒子が一定確率pで一方向に進んでいく確率モデルである.ただし,行き先の最隣接格子点が他粒子で占有されているときは,粒子の遷移は禁止される(排他効果). 本稿では TASEP を特別な場合として含む Zero Range Process (ZRP) を導入する. ZRP はTASEP と同様に 1次元格子上を粒子が移動するモデルであり,本研究では TASEP との対応から,ZRP粒子の進行方向も一方向に限るものとする. ZRP は粒子に排他効果を与えていないモデルであるが,排他過程への対応付けが可能である.そのためには,(a) ZRP のサイトを TASEP 粒子に対応させ,(b) ZRP 粒子を TASEP 粒子が進行方向に対して持つ粒子間隔に対応させればよい.

一般に ZRP の遷移確率は各サイト上の粒子数の 関数であり、1 サイトから同時に複数個の粒子が遷 移可能である.しかし、TASEP と等価となる ZRP では、遷移確率は一定値であり、一つのサイトから 一度に遷移する粒子は一つだけである [1] . 以後 , 本 研究では TASEP , ZRP ともに周期境界条件を与え , 遷移はパラレル・アップデートとする .

金井,西成,時弘は上述の ZRP との対応を用いることにより以下のような結果を得た [2].

いま ZRP のサイト数を L , 粒子数を N とする(これは L+N サイト , L 粒子の TASEP に対応)、 ZRP の粒子配置を $\mathbf{n}=\{n(j)\}_{j=1}^L\in\{0,1,\ldots,N\}^L$, $\sum_{j=1}^L n(j)=N$ とし , 粒子配置全体の集合を $\Omega_{L,N}$ とすると , マスター方程式の定常解として次のように定常分布関数が求められる .

$$\mathbf{P}_{L,N}(\mathbf{n}) = \frac{1}{Z_{L,N}} \prod_{j=1}^{L} f(n(j)).$$
 (1)

ここで, $Z_{L,N}$ は分配関数である.f(n(j))はサイト

ウェイト関数であり,

$$f(n) = \begin{cases} 1, & \text{if } n = 0\\ (1-p)^{n-1}, & \text{if } n \ge 1 \end{cases}$$
 (2)

とすると,分配関数は.

$$Z_{L,N} \equiv \sum_{\mathbf{n} \in \Omega_{L,N}} \prod_{j=1}^{L} f(n(j))$$

$$= \frac{(-p)^{L+N} L}{(1-p)^{L+1}} F\left(L+1, N+1; 2; \frac{1}{1-p}\right)$$
(3)

となる.ここで,

$$F(\alpha, \beta; \gamma; z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha)_n(\beta)_n}{(\gamma)_n} \frac{z^n}{n!}$$
 (4)

はガウスの超幾何関数 $.(\alpha)_0 = 1$ $,(\alpha)_n = \alpha(\alpha +$ $1)\cdots(\alpha+n-1), n\geq 1$ である.

 $Z_{L,N},\;\mathbf{P}_{L,N}(\mathbf{n})$ より,1粒子平均速度は次のよ うに与えられる.

$$\mathbf{E}_{L,N}[V_j] = p \sum_{\mathbf{n} \in \Omega_{L,N}} \mathbf{1}(n(j) \ge 1) \mathbf{P}_{L,N}(\mathbf{n})$$

$$= \frac{\sum_{n=0}^{N-1} (-1)^{N+1-n} Z_{L,n}}{Z_{L,N}}$$

$$= -\frac{1-p}{L} \frac{F(L,N;1;1/(1-p))}{F(L+1,N+1;2;1/(1-p))}$$

 $\mathbf{E}_{L,N}[V_i]$ は j 番目の粒子の速度 V_i の期待値を表わ す、また、 $\mathbf{1}(\omega)$ は指示関数で、事象 ω が起これば 1(2) を,それ以外では0を返す関数である

1 粒子平均速度 $v_{L,N}(p) \equiv \mathbf{E}_{L,N}[V_i]$ はリッカチ の微分方程式

$$\frac{dv_{L,N}(p)}{dp} + \frac{L}{p(1-p)}v_{L,N}(p)^{2} - \frac{L+N}{p(1-p)}v_{L,N}(p) + \frac{N}{1-p} = 0$$
 (6)

を満たす [2] . 次に $v_{L,N}(p)$ をシステムサイズ K=

$$v_{L,N}(p) = v_0 + v_1 \frac{1}{K} + v_2 \frac{1}{K^2} + \cdots$$
 (7)

の形に展開して,(6)式を逐次法で解いた.また,粒 子密度 $\rho \ (= L/K)$ を一定に保ちながらシステムサ イズ $K \to \infty$ の極限をとることにより,熱力学的極 限での1粒子平均速度が得られる[2].

$$= \frac{\sum_{n=0}^{N-1} (-1)^{N+1-n} Z_{L,n}}{Z_{L,N}}$$

$$= -\frac{1-p}{L} \frac{F(L,N;1;1/(1-p))}{F(L+1,N+1;2;1/(1-p))} \cdot \lim_{\substack{L \to \infty, N \to \infty; \\ \rho = \text{const.}}} \mathbf{E}_{L,N}[V] = \frac{1-\sqrt{1-4p\rho(1-\rho)}}{2\rho},$$

$$0 \le \rho, p \le 1.$$
(8)

k 粒子速度相関関数 2

我々は(5)式を拡張して, k $(1 \le k \le L)$ 個の粒子の速度の積の期待値として, k 粒子速度相関関数を定 義する [3] . すなわち , 着目する粒子を $1 \leq j_1 < j_2 < \dots < j_k \leq L$ と順番付け , j_ℓ 番目の粒子の速度を V_{j_ℓ} とし,k 粒子速度相関関数を次のように定義する.

$$F_{L,N}(\{V_{j_{\ell}}\}_{\ell=1}^{k}) = \mathbf{E}_{L,N} \left[\prod_{\ell=1}^{k} V_{j_{\ell}} \right] = p^{k} \sum_{\mathbf{n} \in \Omega_{L,N}} \prod_{\ell=1}^{k} \mathbf{1}(n(j_{\ell}) \ge 1) \mathbf{P}_{L,N}(\mathbf{n}).$$
(9)

ここで, ZRP 粒子の分布関数 (1) は ZRP のサイトウェイト関数 f(n) をサイト数 L だけ掛けあわせた形 をしていることから,k粒子速度相関関数が次式で与えられることが証明できる[3].

$$F_{L,N}(k) \equiv F_{L,N}(\{V_{j_{\ell}}\}_{\ell=1}^{k})$$

$$= \frac{p^{k}}{Z_{L,N}} \sum_{s=0}^{k} (-1)^{s} {k \choose s} Z_{L-s,N}$$

$$= \frac{p^{k}}{LF(L+1,N+1;2;1/(1-p))} \sum_{s=0}^{k} (L-s) {k \choose s} \left(\frac{1-p}{p}\right)^{s} F\left(L-s+1,N+1;2;\frac{1}{1-p}\right)$$
(10)

(10) は着目する粒子数 k に依るが,着目する粒子の位置に依らない.このことは,サイトウェイト関数 f(n) がシステムサイズには依存しないことに起因する.

(10) は $k\geq 2$ で, $F_{L,N}(k)\neq (F_{L,N}(1))^k$ ということを主張している.つまり,有限系では粒子速度は相関を持っている.

3 速度共分散

TASEP 粒子の速度相関を特徴付けるため,我々は速度共分散を計算した.着目する二つの粒子の速度をそれぞれV,V'とすると,速度共分散は定義より,

$$Cov_{L,N}[V, V'] = \mathbf{E}_{L,N}[VV'] - \mathbf{E}_{L,N}[V]^2.$$
 (11)

ここで (10) は着目する粒子の位置に依存しないので,速度共分散も任意の 2 粒子に対して同じものとなる.(10) で k=1,2 の場合を用いると,次のように表わすことができる.

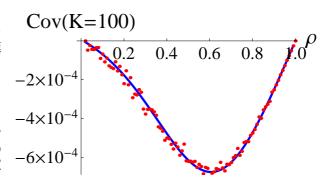


図 1: 密度対共分散 . システムサイズ K=100 , 遷移確率 p=0.5 とした . 曲線が理論値 (12) , ドットがシミュレーション値である . シミュレーションは各密度に対して 10000 ステップ行い , 後半 8000 ステップのデータをもちいた . ドットは試行 10000 回行った平均値 .

$$\operatorname{Cov}_{L,N}[V,V'] = p^{2} \left\{ \frac{Z_{L-2,N}}{Z_{L,N}} - \left(\frac{Z_{L-1,N}}{Z_{L,N}}\right)^{2} \right\}$$

$$= (1-p)^{2} \left\{ \frac{(L-2)F(L-1,N+1;2;1/(1-p))}{LF(L+1,N+1;2;1/(1-p))} - \left(\frac{(L-1)F(L,N+1;2;1/(1-p))}{LF(L+1,N+1;2;1/(1-p))}\right)^{2} \right\}.$$
(12)

我々は実際に速度共分散の数値シミュレーションを行った.その結果を粒子密度に対してプロットしたものが図 1 である.理論式 (12) とシミュレーションの一致を見ることができた.また,理論式,シミュレーションともに,全密度に対して速度共分散が負の値を持っていることが分かる.つまり,粒子同士は互いに進むことを妨げる働きをしている.

4 熱力学的極限

我々は (12) の速度共分散に対し熱力学極限を計算した.ガウスの超幾何関数の漸化式により,(12) は次のように書き換えられる.

$$\operatorname{Cov}_{L,N}[V,V'] = (1-p)^2 \left[\frac{1}{1-p} - 1 + \left(1 - \frac{L-N-1}{2(L-1)} \frac{1}{1-p} \right)^2 - \left\{ Y_{L,N}(p) - \left(1 - \frac{L-N-1}{2(L-1)} \frac{1}{1-p} \right) \right\}^2 \right].$$
 (13)

ここで,

$$Y_{L,N}(p) \equiv \frac{(L-1)F(L,N+1;2;1/(1-p))}{LF(L+1,N+1;2;1/(1-p))}$$
(14)

とおいた. 我々はこの $Y_{L,N}(p)$ が次のリッカチの微分方程式を満たすことを示した [3] .

$$\frac{dY_{L,N}(p)}{dp} + \frac{L-1}{p} \frac{v_{L-1,N}(p)}{v_{L,N}(p)} Y_{L,N}(p)^{2} + \left[\frac{d}{dp} \log \frac{v_{L-1,N}(p)}{v_{L,N}(p)} + \frac{p^{2} + 2(L-1)p - (L+N-1)}{p(1-p)} \right] Y_{L,N}(p) - \frac{L-1}{1-p} \frac{v_{L,N}(p)}{v_{L-1,N}(p)} = 0.$$
(15)

ここで, $v_{L,N}(p)\equiv \mathbf{E}_{L,N}\left[V\right]$, $v_{L-1,N}(p)\equiv \mathbf{E}_{L-1,N}\left[V\right]$ とした.そして, $v_{L,N}(p)$, $v_{L-1,N}(p)$, $Y_{L,N}(p)$ に対してシステムサイズ K で負のべき展開を行い,係数比較法により(15)を解いた.その結果,粒子密

度 ho を一定に保ち $K
ightarrow \infty$ の極限をとると , $Y_{L,N}(p)$ の極限値は

$$Y_0 = \lim_{\substack{K \to \infty; \\ \rho = \text{const.}}} Y_{L,N}(p) = \frac{(1 - 2\rho p) \pm \sqrt{1 - 4\rho p(1 - \rho)}}{2\rho(1 - p)}.$$
 (16)

となることが分かった.このことより,

$$\lim_{\substack{K \to \infty; \\ \rho = \text{const.}}} \text{Cov}_{L,N}[V, V'] = p(1-p) + \left[\frac{1-2\rho p}{2\rho}\right]^2 - \left[(1-p)Y_0 - \left(\frac{1-2\rho p}{2\rho}\right)\right]^2$$

$$= 0. \tag{17}$$

であることが導かれる.したがって,熱力学的極限の下では,速度共分散は漸近的にゼロになり,粒子速度は互いに独立な確率変数とみなすことができる.図2では,速度共分散がゼロになることを,実際にシミュレーションを行って確認した結果を示したものである.

5 今後の課題

今後の課題としては、A. M. Povolotsky, V. B Priezzhev らによる,同条件下の TASEP の非定常状態の研究 [4] との関係がある.初期配置 X^0 から時刻 t での粒子配置 X への推移確率は次のようになる.

$$P(X;t|X^{0};0) = \frac{\mathcal{F}_{K}(X,X^{0},t)}{\mathcal{F}_{K}(X,X,0)}.$$
 (18)

ここで $\mathcal{F}_L(X,X,0)=(1-p)^{\mathcal{N}_c(X)}$. $\mathcal{N}_c(X)$ は X についてのある関数 . また ,

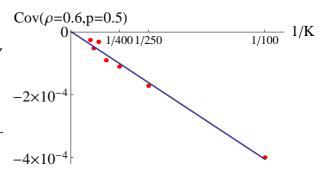


図 2: システムサイズ K の逆数に対する,速度共分散のグラフ・粒子密度 $\rho=0.6$,遷移確率 p=0.5 とした.曲線は理論値 (12) 式,ドットがシミュレーション値である.シミュレーションは各システムサイズで 30000 ステップ行い,後半 10000 ステップのデータを用いた.ドットは試行 10000 回行った平均値. $K\to\infty$ とすると速度共分散 $\mathrm{Cov}_{L,N}\left[V,V'\right]$ がゼロになることが見てとれる.

$$\mathcal{F}_{L}(X,Y,t) = \sum_{n_{1}=-\infty}^{\infty} \cdots \sum_{n_{L}=-\infty}^{\infty} (-1)^{(L-1)\sum_{i=1}^{L} n_{i}} \det_{1 \leq i,j \leq L} \left[f\left(i-j+Ln_{i}-\sum_{k=1}^{L} n_{k}, x_{i}-y_{j}+n_{i}K, t\right) \right]$$
(19)

である.ここで,

$$f(a,b,c) = (1-p)^t \begin{cases} \left(\frac{p}{p-1}\right)^b \frac{(-t-a)_b}{b!} F(a,-t-a+b;p/(p-1)), & \text{if } b > 0, \\ \frac{(a)_{-b}}{(-b)!} F(a-b,-t-a;-b+1;p/p-1), & \text{if } b \le 0. \end{cases}$$
(20)

この (18) の $t \to \infty$ 極限として,定常状態の分布関数が導けることが期待される.

参考文献

- [1] M. R. Evans, T. Hanney, J. Phys. A: Math. Gen. 38, R195 (2005).
- [2] M. Kanai, K. Nishinari, T. Tokihiro, J. Phys. A: Math.Gen 39, 9071 (2006).
- [3] Y.Yamada, M. Katori, Phys. Rev. E (in press); arXiv:1108.0753.
- [4] A. M. Povolotsky, V.B. Priezzhev, J. Stat. Mech. (2007) P08018.

連絡先:山田泰之, yasuyuki@phys.chuo-u.ac.jp 香取眞理, katori@phys.chuo-u.ac.jp