

# ASEP の釣り合いネットワークとそのいくつかの例

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

Asymmetric Simple Exclusion Process (ASEP) は境界条件によってさまざまな挙動を示すが、周期境界条件を課した場合は「すべての粒子の配置が等確率で現れる」状態が定常状態となる。本発表では、これを複数「釣り合い状態で」つないだネットワークが厳密に解けることを示す。このネットワークはさまざまなモデルを含むが、中でも重要な複数レーン ASEP、粒子脱着 ASEP について具体的な例を紹介する。

## Balance network of asymmetric simple exclusion process and related models

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

<sup>1</sup>Department of Aeronautics and Astronautics, School of Engineering, The University of Tokyo

<sup>2</sup>Research Center for Advanced Science and Technology, The University of Tokyo

## Abstract

In the asymmetric simple exclusion process (ASEP) with periodic boundary conditions, all possible configurations of particles are found with the same probability in the stationary state (, which property is called “equiprobable”). In this research, we introduce a “balanced network” of ASEPs with periodic boundary conditions. In this model, particles can hop to a different ASEP or a particle reservoir, and these transitions satisfy the detailed balance condition, for which property the probability distribution of the system has simple structure. We show some specific examples included in this network.

## 1 はじめに

ASEP (asymmetric simple exclusion process) は一次元格子上で定義される排他過程である [1]。その定義のシンプルさとダイナミクスの多様性から、生物・物理・数学などの各分野で様々な研究が行われてきた。現状では ASEP の定常状態は厳密に求まっているが、一方でルールを拡張したモデルで厳密解が求まっているものは稀である。本発表では既に厳密解が求まっている周期系の ASEP を「釣り合い状態」を保ったまま繋げると解が求まることを示し、いくつかの物理量を計算する。またその繋げ方は任

意であるため、例えば複数車線の ASEP や粒子の脱着効果を含めた ASEP などもこのカテゴリとして考えることができる。この対応関係にも言及する。

## 2 モデル

### 2.1 釣り合いネットワーク

最大一つ粒子浴と周期系の ASEP 複数から成る系を考える (図 1)。粒子浴とは粒子を無限に供給、受け入れ可能なサイトのことで、あってもなくてもよい。粒子は各 ASEP の内部だけでなく、予め指定されたリンクを通じて他の ASEP や粒子浴に移動する

ことができる。 $j$  番目の ASEP 中にある粒子のダイナミクスは以下のように定める [2]。(図 2)

(i)ASEP 内部のルール

各粒子は、自分の前の隣接サイトが他の粒子によって占められていなければ、レート  $p_j$  で前進する。

(ii)ASEP 間のルール

各粒子はリンクによってつながれたサイトが空いていれば、レート  $\chi_j$  で移動する。相手が粒子浴の場合はいつでも移動できる。

(iii) 粒子浴のルール

粒子浴はつながれたサイトが空いていれば、そこへレート  $\chi_R$  で粒子を供給する。

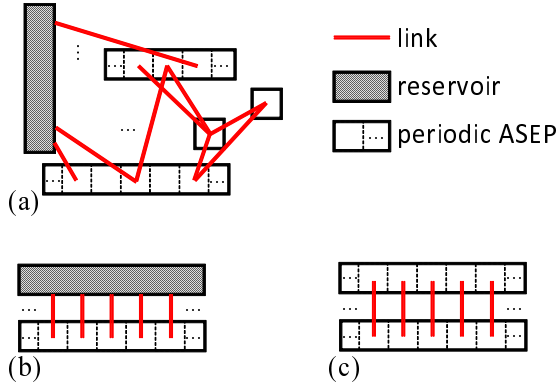


図 1: (a) 一般的なネットワーク。サイトのつながり方によって (b) 粒子脱着 ASEP や (c) 複数レーン ASEP を表現することができる。

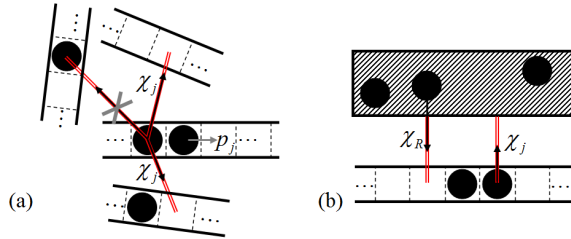


図 2: システムのルール。(a) ASEP 間および ASEP 内部での粒子の移動 (b) 粒子浴と ASEP での粒子のやり取り。

このルールで重要なのは、「同じ ASEP (粒子浴) から粒子が出るレートは共通である」ということと、「リンクは双方向の粒子の動きを許す」ということである。これにより、定常状態で ASEP 同士、ASEP と粒子浴間でつり合い状態を作ることができる。また図 1 に示したように、組み合わせ方によって粒子

脱着 ASEP [3] や複数レーン ASEP [4] を表現できる。以下では、このネットワークは孤立した部分を持たないと仮定する<sup>1</sup>。

### 3 系の定常分布

系の定常状態は以下に示すように、すべての粒子の配置に対してそれが実現している確率を与えることで記述する。粒子の配置は各 ASEP ( $1 \leq j \leq K$  でラベルづけする) について  $\{\tau_i^j\}_j$  で表現される。 $\tau_i^j$  は  $j$  番目の ASEP の  $i$  番目のサイトに粒子がいる ( $\tau_i^j = 1$ ) ・ いない ( $\tau_i^j = 0$ ) ことを表現するための変数で、 $\{\tau_i^j\}_j$  はその ASEP に含まれるすべてのサイトの分だけ集めた集合である。系がある粒子の配置  $\{\tau_i^1\}_1, \dots, \{\tau_i^K\}_K$  となる確率は、粒子浴の有無に応じて以下のように書ける。

(i) 粒子浴がある場合

$$P(\{\tau_i^1\}_1, \dots, \{\tau_i^K\}_K) = \Xi^{-1} \prod_{j=1}^K \left( \frac{\chi_R}{\chi_j} \right)^{n_j}, \quad (1)$$

$$\Xi = \sum_{n_1=0}^{L_1} \dots \sum_{n_K=0}^{L_K} \prod_{j=1}^K \left( \frac{\chi_R}{\chi_j} \right)^{n_j} \binom{L_j}{n_j}. \quad (2)$$

(ii) 粒子浴がない場合

$$P(\{\tau_i^1\}_1, \dots, \{\tau_i^K\}_K) = Z_N^{-1} \prod_{j=1}^K \left( \frac{1}{\chi_j} \right)^{n_j} \times \delta \left( \sum_{i=1}^K n_j - N \right) \quad (3)$$

$$Z_N = \sum_{n_1=0}^{L_1} \dots \sum_{n_K=0}^{L_K} \prod_{j=1}^K \left( \frac{1}{\chi_j} \right)^{n_j} \binom{L}{n_j} \delta \left( \sum_{i=1}^K n_j - N \right). \quad (4)$$

ここで  $L_j, n_j$  はそれぞれ  $j$  番目の ASEP に含まれるサイト数、粒子数  $n_j = \sum_{i=1}^{L_j} \tau_i^j$  である。また  $\Xi, Z$  は規格化定数で、(ii) では粒子浴がないために粒子数の拘束  $\delta \left( \sum_{i=1}^K n_j - N \right)$  が入っている。ここで全体の粒子数は  $N$  である。

これらの式の意味を簡潔に述べると、「各 ASEP に含まれる粒子の数のみによってその配置が現れる確率の重みが定まり、全体としてそれらの積で重みが決まる」ということである。以下でこの式が系の定常状態を与えていることを示す。系が定常状態にあ

<sup>1</sup>孤立した部分を持たないとは、系の中の任意の 2 つのサイトの間を粒子が (リンクやほかの ASEP を介して) 移動できるという意味である。もし孤立した部分がある場合はそれぞれの部分系で解けばよい。

るとは、確率遷移行列  $T$  と確率ベクトル  $P$  について  $TP = P$  が成り立つことである。またこれは移項して  $HP = 0$  のように書くこともできる。 $(H$  をハミルトニアンと呼ぶことにする。) ここでは、 $H$  を (i)ASEP 内部での遷移  $H_{\text{int}}$ 、(ii)ASEP 間での遷移  $H_{\text{ext}}^1$ 、(iii) ASEP と粒子浴との間の遷移  $H_{\text{ext}}^2$  に分けて ( $H = H_{\text{int}} + H_{\text{ext}}^1 + H_{\text{ext}}^2$ )、それぞれがこのマスター方程式を満たすことを示し、全体としてこれが成り立つことを確認する。

まず ASEP 内部の遷移について考える。周期系の (閉じた) ASEP はすべてのあり得る粒子配置が同じ割合で現れる定常状態をもつ。そこで  $H_{\text{int}}$  を各 ASEP ごと、各粒子数ごとに分解する ( $H_{\text{int}} = \sum_{j=1}^K \sum_{n_j=1}^{L_j} H_{\text{int}}^{j,n_j}$ )。すると各  $H_{\text{int}}^{j,n_j}$  は孤立した ASEP (粒子数  $n_j$ ) のハミルトニアンとなる。一方、解 (1) または (3) は各 ASEP の粒子数が固定されていれば、全ての取り得る粒子配置は同じ確率で現れるので、当然元の ASEP のマスター方程式を満たしている。したがって  $H_{\text{int}}^{j,n_j}$  に対応する部分<sup>2</sup>はすべて 0 になり、全体として  $H_{\text{int}}P = 0$  となる。

次に ASEP 同士の粒子のやり取りについて考える。この遷移は ASEP 内部の遷移とは異なり、それぞれの粒子の移動に対してその逆が可能である。この逆の動きが保障されているため、それぞれの移動に対してそれと釣り合わせる事ができる。実際、ハミルトニアンと確率ベクトルの積のうち、ASEP- $j_1$  から  $j_2$  ( $j_1 < j_2$ ) へのある粒子の移動と、全くその逆の遷移 (他の部分の状態は共通) に対応する部分を取り出すと<sup>3</sup>

$$\begin{aligned} & \Xi^{-1} \prod_{j=1, j \neq j_1, j_2}^K \left( \frac{\chi_R}{\chi_j} \right)^{n_j} \\ & \times \left[ \left( \frac{\chi_R}{\chi_{j_1}} \right)^{n_{j_1}} \left( \frac{\chi_R}{\chi_{j_2}} \right)^{n_{j_2}} \chi_{j_1} \right. \\ & \quad \left. - \left( \frac{\chi_R}{\chi_{j_1}} \right)^{n_{j_1}-1} \left( \frac{\chi_R}{\chi_{j_2}} \right)^{n_{j_2}+1} \chi_{j_2} \right] \\ & = 0. \end{aligned} \quad (5)$$

となり詳細つり合いが成り立っていることがわかる。遷移に関係しない、他の共通する部分に対応する因子は最初の積の部分でくることができ、当該の ASEP

<sup>2</sup>具体的には、一つ決めた粒子数に対応する配置に対する確率をすべて列挙したもの。またこれに該当しない「対応しない部分」はそもそも  $H$  を分解した時点で 0 になるので  $H_{\text{int}}^{j,n_j}P = 0$  は成り立っている。

<sup>3</sup>粒子数の変化で書くと  $\{\dots, n_{j_1}, \dots, n_{j_2}, \dots\} \rightarrow \{\dots, n_{j_1} - 1, \dots, n_{j_2} + 1, \dots\}$  とその逆

が持っている粒子数と移動レート  $\chi_j$  の掛け算でバランスしている。結局、すべての遷移についてその逆が釣り合っているのでマスター方程式の各項はペアでそれぞれ 0 とすることができ、 $H_{\text{ext}}P = 0$  となる。式 (5) は粒子浴ありの場合で示したが、粒子浴がない場合も同様の式が成り立つ。また、粒子浴との粒子のやり取り ( $H_{\text{ext}}^2$ ) についても全く同様なのでここでは省略する。

以上から、(1) 及び (3) で与えた式が系の定常状態を満たすことが確認できた<sup>4</sup>。

## 4 具体例

以上の議論はモデルの構成さえ守れば一般的に成り立つが、ここでいくつかの例について述べる。

### 4.1 粒子脱着 ASEP

粒子脱着 ASEP は ASEP に粒子の生成・消滅ルールを加えたモデルであり、生物物理の文脈で重要なモデルである [5]。既存の研究では ASEP の境界条件を open にして近似計算で解析しているものが多い。ここで考えるモデルは図 1 (b) に示すモデルで、ASEP の前進レート 1、粒子の脱離 (消滅) レートを  $\chi_d$ 、粒子の吸着 (生成) レートを  $\chi_a$  とする。粒子浴との粒子のやり取りが吸着・脱離に対応している。規格化定数は簡単に計算することができ、 $\Xi = \left(1 + \frac{\chi_a}{\chi_d}\right)^L$  となる<sup>5</sup>。アンサンブル平均によりそれぞれ  $\rho = \langle \tau_i \rangle$ ,  $J = \langle \tau_i (1 - \tau_{i+1}) \rangle$  で定義される密度・流量は、 $\rho = \Xi^{-1} \sum_{N=1}^L \left(\frac{\chi_a}{\chi_d}\right)^N L-1 C_{N-1} = \frac{\chi_a}{\chi_d} (1 + \frac{\chi_a}{\chi_d})^{-1}$ ,  $J = \Xi^{-1} \sum_{N=1}^{L-1} \left(\frac{\chi_a}{\chi_d}\right)^N L-2 C_{N-1} = \frac{\chi_a}{\chi_d} (1 + \frac{\chi_a}{\chi_d})^{-2} = \rho(1 - \rho)$ . のように求まる<sup>6</sup>。流量の式から、系のサイズが有限でも隣接するサイト間の相関が切れていることがわかる。また系の粒子数  $N$  の分散については  $\text{Var}[\tau_i] = \langle \tau_i^2 \rangle - \langle \tau_i \rangle^2 = \frac{\chi_a}{\chi_d} (1 + \frac{\chi_a}{\chi_d})^{-2} = J$  という関係式が成り立つ。

<sup>4</sup>もし系が既約であれば定常状態の確率分布は一意的に定まる。従ってこのとき一つ定常状態を見つければそれが求めるべき解である。

<sup>5</sup>一般に粒子浴がある場合は簡単に計算できるが、粒子数に拘束がかかる場合には計算ができないため、熱力学極限での評価を行う。これは統計力学のカノニカルアンサンブル・グランドカノニカルアンサンブルにおける事情と同じである。

<sup>6</sup>密度を求める際にはサイト  $i$  が 1 になっているすべての場合について確率の和をとる。流量を求める際には、サイト  $i, i+1$  の状態が 1, 0 になるすべての場合について和を取っている。

## 4.2 複数レーン ASEP

次に粒子数の拘束がある系の具体例として、図 1 (c) に示すような複数レーンの ASEP について調べる [4]。ここでは一般に  $K$  レーンの ASEP を考え、それぞれの系の長さを  $L$  で統一する。その上で粒子の密度を保ったまま  $L \rightarrow \infty$  の極限を考え、そのふるまいを鞍点法によって評価する。まず規格化定数  $Z_N$  の母関数  $\mathcal{Z}(s) = \sum_{n_1=0}^L \cdots \sum_{n_K=0}^L \prod_{j=1}^K \left(\frac{1}{\chi_j}\right)^{n_j} L C_{n_j} s^{n_j} = \prod_{j=1}^K \left(1 + \frac{s}{\chi_j}\right)^L \equiv [F(s)]^L$  を定義する<sup>7</sup>。この多項式の  $s^N$  の係数が  $Z_N$  なので、複素積分を用いて  $Z_N = \oint \frac{ds}{2\pi i} \frac{\mathcal{Z}(s)}{s^{N+1}}$  と書ける。この積分の値は  $L \rightarrow \infty$  の極限で、被積分関数の鞍点の値によって評価できる。関数  $\phi(s) = -\rho \ln s + \ln[F(s)]$  を定義すると、鞍点  $z$  は  $\phi(z) = 0$  により関係式  $\rho = \sum_{j=1}^K \frac{z}{\chi_j} \left(1 + \frac{z}{\chi_j}\right)^{-1}$  から求まる ( $\rho = N/L$ )。この  $z$  を用いて、 $Z_N$  は  $Z_N \rightarrow (2\pi L)^{-1/2} z^{1-N} |\phi''(z)|^{-1/2} \mathcal{Z}(z)$  と評価できる。流量  $J$  を求めるためには、式 (3) の重み部分を「ある連続したサイトの状態が 10 になっている」全ての場合について和を取る必要があるが、この和も母関数を考えることで  $Z_N$  と同様に計算することができる。この母関数を計算すると  $\frac{s}{\chi_j} \left(1 + \frac{s}{\chi_j}\right)^{-2} [F(s)]^L$  となるため、 $Z_N$  の極限との比をとって、 $J_j = \frac{z}{\chi_j} \left(1 + \frac{z}{\chi_j}\right)^{-2} p_j$  と計算できる<sup>8</sup>。密度についても同様の計算をすることで  $\rho_j = \frac{z}{\chi_j} \left(1 + \frac{z}{\chi_j}\right)^{-1}$  と求まる。

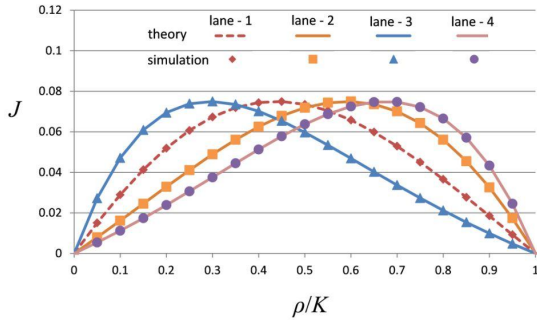


図 3: 複数レーン ASEP の基本図。  $K = 4, (\chi_1, \chi_2, \chi_3, \chi_4) = (0.1, 0.2, 0.05, 0.3), p_1 = p_2 = p_3 = p_4 = 0.3, L = 1000$  全体の密度に対して、それぞれのレーンのピークが順番に現れる。

<sup>7</sup>これはカノニカルアンサンブルをグランドカノニカルアンサンブルで表現したことに相当する。この後、鞍点を求める式が粒子数拘束をかけることに対応する。

<sup>8</sup>この比を取る際に、有限ではそれぞれの鞍点  $z$  は異なるが、極限では両者一致するため共通のものとして書いている。また、ここでの流量はそれぞれの ASEP におけるホップレート  $p_j$  をかけて定義する。

## 5 考察とまとめ

本研究では周期境界 ASEP を詳細つり合い条件を満たすように繋ぐことで、そのつなぎ方によらず定常状態がシンプルな形で与えられることを示した。周期境界による配置の等確率性のため統計力学の枠組みで計算を行うことができる。系は粒子浴をもつかどうかによって粒子数の拘束条件が変化するが、全体としての振る舞いは大きくは変化しない。粒子数の拘束がない例として粒子脱着 ASEP について述べた。この系では粒子浴の効果で、サイトの長さが有限にもかかわらずサイト間の相関が切れるため、たとえば平均場近似などの手法が厳密な予測を与える。粒子の拘束がある場合の例として複数レーン ASEP の熱力学極限について述べたが、この系でのそれぞれの ASEP の密度  $\rho_j = \frac{z}{\chi_j} \left(1 + \frac{z}{\chi_j}\right)^{-1}$  は鞍点を決める式の右辺の一部となっており、この式が「各 ASEP の密度の和 = 全体の密度」という式であったことがわかる。また、粒子脱着 ASEP の結果との比較から、鞍点  $z$  は仮想的な粒子浴と同じ働きをしていることがわかる。すなわち、それぞれの ASEP に粒子が入ってくるレートは、他の ASEP から粒子が出てくるレートの力関係によって決まっているということである。(粒子浴がある場合はその役割をすべて粒子浴が引き受けてしまう。)

今回は粒子浴を最大一つに制限した。もし粒子の供給レートの異なる粒子浴が二つ以上あると、その間で流れが生じてしまい今回利用した釣り合い条件が崩れる。このため定常状態は異なった形になってしまい、簡単な形では表せなくなる。今後はこのネットワークの拡張や、その利用について調べる予定である。

## 参考文献

- [1] J. T. MacDonald, J. H. Gibbs, and A. C. Pipkin, *Biopolymers* **6**, 1 (1968).
- [2] T. Ezaki and K. Nishinari, *J. Stat. Mech.* P11002 (2012).
- [3] T. Ezaki and K. Nishinari, *J. Phys. A: Math. Theor.* **45**, 185002 (2012).
- [4] T. Ezaki and K. Nishinari, *Phys. Rev. E* **84**, 061141 (2011).
- [5] A. Parmeggiani, T. Franosch and E. Frey, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 086601 (2003).