

# 周期格子上での開境界 TASEP の実現

金井政宏

東京大学大学院数理科学研究科

## 概要

本論文では、開境界を持つ非対称単純排他過程 (TASEP) を周期格子上で実現する方法を提案する。このモデルでは、各サイトに粒子が複数入ることが可能とし、各粒子のホップ確率が出発するサイトと目標となるサイトの両方の粒子数に依存するような確率ダイナミクスを持つ。また、このホップ確率にある条件を課したモデルは *misanthrope process* と呼ばれる可解な確率過程となるが、これは TASEP の知られている可解条件の一つと対応する。

## Realization of the totally asymmetric simple exclusion process with open boundary conditions on a ring

Masahiro Kanai

Graduate School of Mathematical Sciences, The University of Tokyo

## Abstract

In this work, we propose a realization of the totally asymmetric simple exclusion process (TASEP) with open boundary conditions on a ring. In the present model, each site may contain more than one particle, and each particle hops with a hop rate depending on both particle numbers of the departure and target sites. It is remarkable that if we choose appropriate hop rates, the model corresponds to an exactly solvable stochastic process, i.e. the *misanthrope process*.

## 1 はじめに

開境界を持つ非対称単純排他過程 (TASEP) は、図 1 にあるように、有限の 1 次元格子の左端から粒子が確率  $\alpha$  で流入し、一つずつ左隣のサイトへ移動していき、右端に達すると確率  $\beta$  で系の外に出る多粒子系モデルである。粒子間には同一のサイトを占めることを禁じた排他的相互作用が働き、各粒子は左隣のサイトが空いていれば単位時間当たり確率  $p$  でそこに移動する。(これはいわゆるランダム更新である。)

TASEP に関しては、行列の積の形 (Matrix Product Ansatz) により定常状態における各配置の実現確率が厳密に計算可能であることが知られている [1]。一方、周期境界を持つ TASEP では、MPA における行列の積が可換となり、定常状態の実現確率が関数の積の形 (Function Factorized Form) となると考えられ

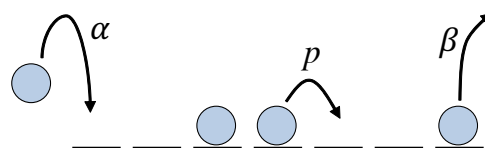


図 1: 非対称単純排他過程 (TASEP)

ているが [2], 直接的な関係は明らかにされていない。そこで、我々は MPA と FFF の対応を明らかにすることを目標として、開境界を周期格子上に実現する方法を提案する。

## 2 モデル

まず、開境界 TASEP を実現するモデルについて述べる。サイト数  $L$  の 1 次元周期格子上を  $N$  個の

粒子が次の確率ダイナミクスに従って一定方向に運動する系を考える。各サイト  $l = 1, \dots, L$  には粒子  $n_l \geq 0$  個が入り、単位時間当たり  $u(n_l, n_{l+1})$  の割合で一つの粒子がサイト  $l$  から右隣のサイト  $l+1$  に移動する。ここで、 $u(m, n) = 0$  を次のように定めるれば、図1の TASEP が実現される：

$u(m, n)$	$n = 0$	$n = 1$	$n = 2$	$n = 3$	$\dots$
$m = 0$	0	0	0	0	$\dots$
$m = 1$	$p$	0	$\beta$	$\beta$	$\dots$
$m = 2$	$\alpha$	0	*	*	$\dots$
$m = 3$	$\alpha$	0	*	*	$\dots$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\ddots$

(\* の箇所は任意.)

排他的相互作用は  $u(m, 1) = 0$  により実現され、一度一人部屋になった粒子は以後他の粒子の入室を拒否する。こうして、粒子の相部屋は徐々に解消されていく。その一方で、2粒子以上が入ったサイトでは、 $u(m \geq 2, 0) = \alpha$  によって粒子の放出されると同時に  $u(1, n \geq 2) = \beta$  によって流入が続く。これらの効果によって、定常状態に達するとある一つのサイトが粒子溜まりとなって、TASEP の左端と右端の役割を同時に果たす。(図2 参照.)

この方法で開境界 TASEP が周期格子上で実現されることはシミュレーションによって確かめられるが、今回はこのモデルと同様の確率ダイナミクスを持つ misanthrope process と比較しながら理論的に考察する。

## 2.1 Misanthrope Process と定常状態の厳密解

Misanthrope process は前出の多粒子系の確率モデルにおいて  $u(m, n)$  に上記の条件とは別の条件を課したモデルで、定常状態における粒子配置の実現確率が FFF によって厳密に計算できる。このため、misanthrope process となる条件を可解条件という。以降の章で、misanthrope process の可解条件、および FFF で与えられる定常状態の確率を求める。さらに、misanthrope process であって同時に開境界 TASEP を実現するようにホップ確率を与えることが可能であること、およびこの場合の流量の厳密解が既存の結果と一致することを見る。

Misanthrope process の定常状態は、マスター方程

式から

$$\sum_{l=1}^L [u(n_{l-1} + 1, n_l - 1)P(\dots, n_{l-1} + 1, n_l - 1, \dots) - u(n_{l-1}, n_l)P(\dots, n_{l-1}, n_l, \dots)] = \frac{\partial}{\partial t} P(n_l) = 0$$

の解として与えられる。ここで、積形の解

$$P(n_1, \dots, n_L) \propto \prod_{l=1}^L f(n_l) \quad (2)$$

を仮定し、 $f(n)$  を決定する。このとき、詳細釣り合いを満たす解、すなわち、

$$u(n_{l-1} + 1, n_l - 1)f(n_{l-1} + 1)f(n_l - 1) = u(n_{l-1}, n_l)f(n_{l-1})f(n_l)$$

となる  $f(n)$  は存在しない。そこで、便宜的に  $\bar{f}(n)$  を導入して

$$\begin{aligned} \bar{f}(n_{l-1})f(n_l) - f(n_{l-1})\bar{f}(n_l) \\ = u(n_{l-1} + 1, n_l - 1)f(n_{l-1} + 1)f(n_l - 1)\theta(n_l) \\ - u(n_{l-1}, n_l)f(n_{l-1})f(n_l)\theta(n_{l-1}) \end{aligned}$$

とする。このとき、左辺の  $l$  についての総和は確かに 0 になる。

以下でこの式を満たす  $f(n)$  を求める。まず、次の二つの場合を考える。

(i)  $n_{l-1} = 0, n_l = n > 0$

$$\bar{f}(0)f(n) - f(0)\bar{f}(n) = u(1, n-1)f(1)f(n-1)$$

(ii)  $n_{l-1} = n > 0, n_l = 0$

$$\bar{f}(n)f(0) - f(n)\bar{f}(0) = -u(n, 0)f(n)f(0)$$

よって、(i) と (ii) の辺々を足し合わせて

$$f(n) = \frac{u(1, n-1)f(1)}{u(n, 0)f(0)} f(n-1) \quad (n > 0)$$

を得る。この  $f(n)$  に関する漸化式は直ちに解けて

$$f(n) = f(0) \left( \frac{f(1)}{f(0)} \right)^n \prod_{k=1}^n \frac{u(1, k-1)}{u(k, 0)}$$

$f(0)$  および  $f(1)$  は不定であるが、これらは確率の規格化の際に消える。また、

$$\bar{f}(n) = \left( \frac{\bar{f}(0)}{f(0)} - u(n, 0) \right) f(n)$$

である。

続けて次の場合を考える。

(iii)  $n_{l-1} = m > 0, n_l = n > 0$

$$\begin{aligned} \bar{f}(m)f(n) - f(m)\bar{f}(n) &= -u(m,n)f(m)f(n) \\ &\quad + u(m+1,n-1)f(m+1)f(n-1) \end{aligned}$$

であるから、上の結果を代入すると、

$$u(n,0) - u(m,0) = \frac{u(m+1,n-1)u(1,m)u(n,0)}{u(m+1,0)u(1,n-1)} - u(m,n) \quad (3)$$

を得る。

以上をまとめると、Misanthrope process のホップ確率  $u(m,n)$  が可解条件 (3) を満たすならば、定常状態の確率分布は (2) において

$$f(n) = f(0) \left( \frac{f(1)}{f(0)} \right)^n \prod_{k=1}^n \frac{u(1,k-1)}{u(k,0)}$$

により与えられることが分かる。  $f(0)$  と  $f(1)$  は不定であるが、結果に影響しない。

### 3 Misanthrope process による開境界 TASEP の実現

今、ホップ確率  $u(m,n)$  を次のように取る：

$$\begin{array}{cccccc} & & n & & & \\ & & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ m & & p & \epsilon & \beta & \beta & \cdots \\ & & \alpha & * & * & * & \cdots \\ & & \alpha & * & * & * & \cdots \\ & & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{array} \quad (0 < \alpha, \beta, p, \epsilon < 1)$$

このとき、既に

$$\begin{aligned} f(n) &= f(0) \left( \frac{f(1)}{f(0)} \right)^n \prod_{k=1}^n \frac{u(1,k-1)}{u(k,0)} \\ &= f(0)^{1-n} f(1)^n \epsilon \alpha^{1-n} \beta^{n-2} \quad (n \geq 2) \end{aligned}$$

と決まってしまう。以下で、このホップ確率が可解条件 (3) を満たすように未定の部分 \* を決める。

まず、

$$u(n,0) - u(m,0) = \frac{u(m+1,n-1)u(1,m)u(n,0)}{\alpha u(1,n-1)} - u(m,n)$$

である。

$$(i) \ n = 1 : p - u(m,0) = u(1,m) - u(m,1)$$

$$(a) \ m = 1 : \text{trivial.}$$

$$(b) \ m \geq 2 : p - \alpha = \beta - u(m,1)$$

$$\therefore u(m \geq 2, 1) = \alpha + \beta - p$$

$$(ii) \ n = 2 : \alpha - u(m,0) = u(m+1,1) \frac{u(1,m)}{\epsilon} - u(m,2)$$

$$(a) \ m = 1 : \alpha - p = u(2,1) - \beta$$

$$\therefore u(2,1) = \alpha + \beta - p$$

$$(b) \ m \geq 2 : 0 = u(m+1,1)\beta/\epsilon - u(m,2)$$

$$\therefore u(m \geq 2, 2) = (\alpha + \beta - p)\beta/\epsilon$$

(iii)  $n \geq 3$  :

$$\alpha - u(m,0) = u(m+1,n-1) \frac{u(1,m)}{\beta} - u(m,n)$$

$$(a) \ m = 1 : \alpha - p = u(2,n-1)\epsilon/\beta - \beta$$

$$\therefore u(2, n \geq 2) = (\alpha + \beta - p)\beta/\epsilon$$

$$(b) \ m \geq 2 : 0 = u(m+1,n-1) - u(m,n)$$

$$\therefore u(m \geq 3, n \geq 2) = u(2, m+n-2)$$

以上をまとめると、

$$\begin{array}{cccccc} & & & n & & \\ & & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ & & p & \epsilon & \beta & \beta & \cdots \\ m & & \alpha & \gamma & \beta\gamma/\epsilon & \beta\gamma/\epsilon & \cdots & \gamma := \alpha + \beta - p \quad (4) \\ & & \alpha & \gamma & \beta\gamma/\epsilon & \beta\gamma/\epsilon & \cdots \\ & & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{array}$$

となる。

(4) において特に  $\gamma = \epsilon, \epsilon \rightarrow 0$  とすると第 2 章に挙げたホップ確率 (1) となり、開境界 TASEP が実現される。

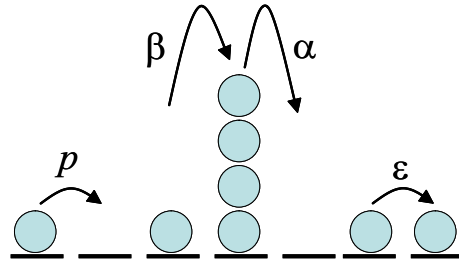


図 2: 開境界 TASEP を実現するホップ確率

#### 3.1 状態確率 $P(\omega)$

以降、粒子配置を  $\omega = (n_1, \dots, n_L)$  と書き、粒子が  $k$  個入ったサイトの個数を  $\sigma_k(\omega) := \#\{l; n_l = k\}$  と書くことにすれば、 $\sum_{k \geq 0} \sigma_k(\omega) = L, \sum_{k \geq 0} k\sigma_k(\omega) = N$

であることに注意して,

$$\prod_{l=1}^L f(n_l) = f(0)^{L-N} f(1)^N e^{L-\sigma_0(\omega)-\sigma_1(\omega)} \cdot \alpha^{L-N-\sigma_0(\omega)} \beta^{N-2L+2\sigma_0(\omega)+\sigma_1(\omega)}$$

よって, 配置  $\omega$  が実現する確率  $P(\omega)$  は, 分配関数

$$Z_{LN} = f(0)^{L-N} f(1)^N F_{LN},$$

$$F_{LN} := \sum_{\omega} e^{L-\sigma_0(\omega)-\sigma_1(\omega)} \alpha^{L-N-\sigma_0(\omega)} \beta^{N-2L+2\sigma_0(\omega)+\sigma_1(\omega)} \quad (5)$$

を用いて,

$$P(\omega) = \frac{f(0)^{L-N} f(1)^N}{Z_{LN}} e^{L-\sigma_0(\omega)-\sigma_1(\omega)} \cdot \alpha^{L-N-\sigma_0(\omega)} \beta^{N-2L+2\sigma_0(\omega)+\sigma_1(\omega)}$$

と与えられる.

この結果を用いると, 流量  $Q_{LN}$  は以下のように求められる. Misanthrope process の可解条件より

$$\alpha + \beta = p + \epsilon, \quad f(n) = f(0)^{1-n} f(1)^n \epsilon \alpha^{1-n} \beta^{n-2}$$

であることを用いると, 流量  $Q_{LN}$  は

$$Q_{LN} = \sum_{\omega} u(n_1, n_2) P(\omega)$$

$$= (\alpha + \beta) \frac{F_{L-2, N-1}}{F_{LN}} + \epsilon \left[ -(\alpha + \beta) \frac{F_{L-2, N-1}}{F_{LN}} + \sum_{m=2}^N \left( \frac{\beta}{\alpha} \right)^{m-2} \frac{F_{L-2, N-m}}{F_{LN}} \right]$$

$$+ \epsilon^2 \sum_{m=1}^N \sum_{n=1}^N \alpha^{2-(m+n)} \beta^{(m+n)-3} \frac{F_{L-2, N-m-n}}{F_{LN}} \quad (6)$$

となる.

### 3.2 分配関数 $Z_{LN}$

$\epsilon \rightarrow 0$  の極限を考える.  $L < N$  の場合, 粒子溜まりは常に存在し, 定常状態において開境界 TASEP が実現される. 逆に  $L > N$  の場合は, いずれ全ての粒子溜まりが消滅し, 系全体で周期境界 TASEP となる. そして,  $L = N$  の場合は凝固してしまう. このように, 今回のモデルではサイト数と粒子数の関係によって系の性質が大きく変わる.

この状況は,  $\sigma_0(\omega) = s_0, \sigma_1(\omega) = s_1$  であるような状態  $\omega$  の個数  $\Gamma_{LN}(s_0, s_1)$  に顕著に表れる.

$$\gamma_{LN}(s_0, s_1) := \binom{L}{s_0} \binom{L-s_0}{s_1} \binom{N-L+s_0-1}{L-s_0-s_1-1}$$

とすると,

$$(i) N > L : \begin{cases} \Gamma_{LN}(s_0, s_1) = \gamma_{LN}(s_0, s_1) \\ (0 \leq s_0 \leq L-1, 0 \leq s_1 \leq L-1) \end{cases}$$

$$(ii) N \leq L :$$

$$(a) \Gamma_{LN}(L-N, s_1) = \binom{L}{N} \delta_{s_1, N} \quad (0 \leq s_1 \leq N)$$

$$(b) \Gamma_{LN}(s_0, s_1) = \gamma_{LN}(s_0, s_1) \quad (s_0 > L-N, 0 \leq s_1 < L-s_0 \leq N)$$

以上の結果を用いると, (5) で定義した分配関数  $Z_{LN}$  は

$$Z_{LN} = f(0)^{L-N} f(1)^N \sum_{s_0} \sum_{s_1} \left[ \Gamma_{LN}(s_0, s_1) \epsilon^{L-s_0-s_1} \cdot \alpha^{L-N-s_0} \beta^{N-2L+2s_0+s_1} \right]$$

と書ける.

### 3.3 流量

ここまでの計算で状態の実現確率の表示まで得られた. この結果を用いると, やや煩雑な計算の後に物理量の期待値が得られる. 特に流量 (6) は

$$Q_{LN} = \begin{cases} (i) N > L : & \left(1 - \frac{1}{L}\right) \frac{\alpha\beta}{\alpha + \beta} + O(\epsilon) \\ (ii) N = L : & O(\epsilon) \\ (iii) N < L : & p \frac{N(L-N)}{L(L-1)} + O(\epsilon) \end{cases}$$

となる. (i) の場合の初項は  $\alpha + \beta = p$  を満たす開境界 TASEP についてよく知られた結果であり [2],  $p$  依存性は消失する. (ii) は自明. (iii) の場合の初項は周期境界 TASEP に対して知られた結果であり [2], 両端の効果  $\alpha, \beta$  の依存性は消失する.

## 4 まとめと展望

今回の研究では, misanthrope process という可解な確率モデルを調節することによって, (可解な) 開境界 TASEP を周期格子に実現した. そして, 既に得られている流量の厳密解を再現することによりモデルの妥当性を検証した. 今後は, 可解条件を外した場合に, これまでに知られている多くの結果を検証することが研究の目標となる.

### 参考文献

- [1] B. Derrida, M. R. Evans, V. Hakim and V. Pasquier, J. Phys. A: Math. Gen. **26** (1993) 1493.
- [2] M. R. Evans and T. Hanney, J. Phys. A: Math. Gen. **38** (2005) R195.