

# 連続 OV モデルにおける安定・不安定平衡点周りの quasi-potential の数値解析

石渡 龍輔<sup>1</sup>, 野村 保之<sup>2</sup>, 杉山 雄規<sup>3</sup>

<sup>1</sup> 東北大学 東北メディカル・メガバンク機構 ゲノム医科学情報学分野,  
<sup>2</sup> 福井工業高等専門学校, <sup>3</sup> 名古屋大学 大学院情報学研究科 複雑系科学専攻

## 概要

連続 OV モデルの解析計算で得られた安定・不安定平衡点が数値計算でも再現されることを検証する。さらに、それらの平衡点周りで巨視的ゆらぎ理論の quasi-potential を計算する。

## Numerical analysis of quasi-potentials around stable and unstable equilibrium points in the continuous OV model

Ryosuke Ishiwata<sup>1</sup>, Yasuyuki Nomura<sup>2</sup>, Yuki Sugiyama<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Department of Informatics for Genomic Medicine, Tohoku Medical Megabank Organization, Tohoku University, <sup>2</sup> National Institute of Technology, Fukui College,  
<sup>3</sup> Department of Complex Systems Science, Graduate School of Informatics, Nagoya University

## Abstract

We verify that the stable and unstable equilibrium points obtained from analytical calculations of the continuous OV model are reproduced numerically. Furthermore, we calculate the quasi-potentials defined in the macroscopic fluctuation theorem around those equilibrium points.

## 1 はじめに

魚や鳥や昆虫の群れの移動、自動車の交通流などは、非対称相互作用を持つ個体からなる多体现象とみなせる。非対称相互作用はエネルギーの散逸とともに導入され、そのような物理系は、非対称散逸系 (Asymmetric Dissipative System) とよばれる [1]。熱やエネルギーなどの巨視的量を使うことで、系の動力学を直接解析することなく振る舞いを予測することができるため、集団運動を特徴づける巨視的な物理量を調べることは、非対称散逸系においても重要であると考えられる。

巨視的な物理量を吟味するために、まずは連続化

された最適速度模型 (OV) モデルにおいて解析計算によって予見されている安定・不安定平衡点への収束ならびに発散が再現されることを確認する。その後、巨視的物理量として古典物理におけるポテンシャルに対応した巨視的ゆらぎ理論 (MFT) [2] における quasi-potential (準ポテンシャル) を取り上げ、非対称散逸系である OV モデルにおいて得られる quasi-potential を評価する。

## 2 連続 OV モデル

OV モデルは交通流の数理モデルであり、 $j$  番目の粒子の位置  $x_j$  ( $1 \leq j \leq n$ ) の運動方程式が

$$\dot{x}_j = a[V(\Delta x_j) - \dot{x}_j] \quad (1)$$

で与えられる [3]. ただし  $\Delta x_j = x_j - x_{j-1}$  であり周期境界を考える場合,  $x_0 = x_n - L$  および  $x_{n+1} = x_1 + L$  とする ( $L$  はシステムの大きさを表す定数). また  $V$  は  $\tanh$  型の OV 関数  $V(x) = v_0[\tanh \beta(x - b^*) + \Gamma]$  とする, ただし  $\Gamma = \tanh \beta b^*$ .

ここで変数  $r_j = \Delta x_j - b$  を導入して方程式 (1) を書き換える (ただし  $b$  は平均車間).  $x_{j+1}$  と  $x_j$  の方程式の差を取れば  $r_j$  の運動方程式が得られる.

$$\ddot{r}_j = a[V(r_{j+1} + b) - V(r_j + b) - \dot{r}_j]. \quad (2)$$

ただし  $V(x) = v_0 \tanh \beta(x - b^*)$  と置き換えて良い. ここで添字を  $r_j(t) \equiv r(t, j)$  と表現しても良いこと, さらに  $r(t, j)$  が  $j$  に関してべき級数展開できる関数で与えられる ( $r(t, j) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{r^{(k)}(t, 0)}{(k!)} j^k$ ) とし, シフトオペレーターを作用させると  $\exp\left(\frac{\partial}{\partial j}\right)r(t, j) = r(t, j+1)$  となる [4, 1]. シフトオペレーターを用いた表記にして平均車間を  $b = L/n$  と固定した上で,  $n$  について連続極限  $bj \rightarrow x, r(t, j) \rightarrow r(t, x), N \rightarrow \infty, L \rightarrow \infty$  をとると式 (2) は次のように書き換えられる.

$$\frac{\partial^2 r}{\partial t^2} = a \left[ \left( \exp\left(b \frac{\partial}{\partial x}\right) - 1 \right) V(r+b) - \frac{\partial r}{\partial t} \right].$$

このとき  $r$  が定常伝播解を持つと仮定して,  $r(t, x) = u(\xi), \xi = x - ct$  ( $c$  は伝播するクラスタの速度) とおいて,  $\exp\left(\pm b \frac{\partial}{\partial x}\right)$  の 3 次まで展開して  $\xi$  について積分をおこない任意の  $b$  で  $u = 0, \dot{u} = 0$  の解を持つように積分定数を設定し  $v := \frac{du}{d\xi}$  とすれば,

$$\dot{u} = v, \quad (3a)$$

$$\dot{v} = \frac{6}{ab^3 V'} [c^2 v - cau - abV] - \frac{3v}{b} - \frac{V''}{V'} v^2, \quad (3b)$$

となる. ただし  $V(r+b) = v_0 \tanh \beta(r+b - b^*) - v_0 \tanh \beta(b - b^*)$  である.

### 3 平衡点周りの数値解析

得られた式 (3) を 4 次ルンゲ=クッタ法を用いて数値計算をおこなった (図 1). 先行研究 [4] にて解析計算で得られている  $b = b^*, a < a_c^*$  における不安定平衡点 (らせん状の発散) と  $b \neq b^*, a_c < a$  での安定平衡点 (1 点へのらせん状の収束) を確認した.

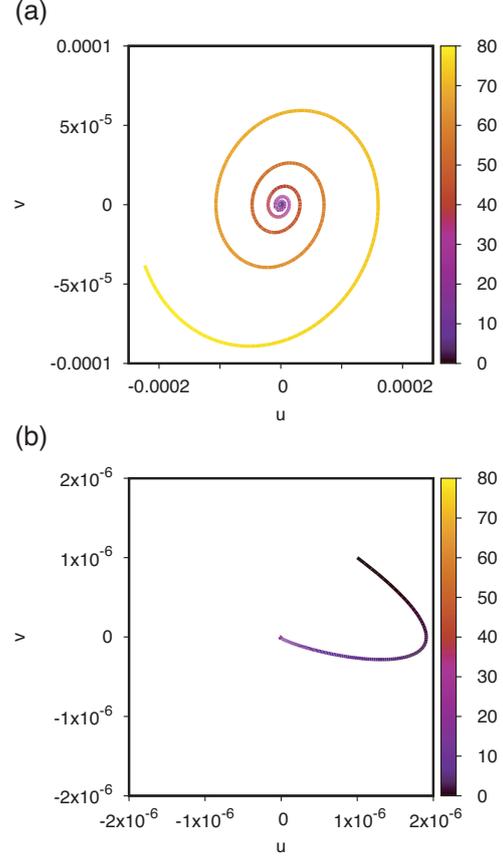


図 1: 色でタイムステップを表した. (a)  $b = b^* = 1, a = a_c^* - 0.2, c(a) = c^* \left(1 - \frac{a_c^* - a}{3a_c^*}\right) = -0.966667$ . (b)  $b = 0.8, a = a_c + 0.3, a_c = 2V'(b) = 1.92209, c(a_c) = -bV'(b), c(a) = c(a_c) \left[1 - \frac{a_c^*(a - a_c)^2}{12a_c^2(a_c^* - a_c)}\right] = -0.781472$ .

どちらも  $u_0 = v_0 = 1 \times 10^{-6}$  からのシミュレーション計算で,  $b^* = 1, v_0 = 1, \beta = 1$  と設定し, 解析計算 [4] により得られている  $a_c^* = 2\beta v_0, c^* = -b^* \beta v_0$  ならびにクラスタ速度  $c(a)$  を用いた.  $b \neq b^*$  の場合に  $a$  が  $a_c$  と近すぎた場合数値が発散することがあったが, これは  $a$  の値が共存相に含まれてしまったことが原因だと考えられる. これを除いて, 解析計算を再現する結果が得られたと言える.

### 4 Quasi-potential

任意の連続力学系に摂動を加えた次の確率微分方程式 (SDE) を考える.

$$d\vec{x}(t) = \vec{b}(\vec{x}(t))dt + \sqrt{2\varepsilon}g(\vec{x}(t))d\vec{w}(t), \quad \vec{x} \in \mathbb{R}^n, \quad (4)$$

ただし  $w$  はウィーナー過程で平均 0 で共分散が  $\mathbf{E}[dw^i(t)dw^j(t')] = \delta^{ij}\delta(t-t')dt$  をみたとする. またこの論文では  $\vec{w} \in \mathbb{R}^n$  とし  $g$  を単位行列  $g(\vec{x}) = I$  とする.

このとき (4) の確率過程の軌道を  $\vec{x}(\cdot)$  と表し, 絶対連続な軌道を  $\hat{x}(\cdot)$  とする<sup>\*1</sup>. Freidlin と Wentzell は先行研究 [5] において時間  $[t_i, t_f]$  に, それらの経路が任意に近づく確率を次のように求めた.

$$\begin{aligned} & \lim_{\delta \searrow 0} \liminf_{\varepsilon \searrow 0} \varepsilon \ln P \left( \sup_{t_i \leq t \leq t_f} \|\vec{x}(t) - \hat{x}(t)\| < \delta \right) \\ &= \lim_{\delta \searrow 0} \limsup_{\varepsilon \searrow 0} \varepsilon \ln P \left( \sup_{t_i \leq t \leq t_f} \|\vec{x}(t) - \hat{x}(t)\| < \delta \right) \\ &= -S_{t_i t_f}[\hat{x}(\cdot)]. \end{aligned} \quad (5)$$

ただし  $\|\cdot\|$  は  $\mathbb{R}^d$  内のベクトルのノルムを表しており,  $S_{t_i t_f}$  は, 次で定義される汎関数であり Freidlin-Wentzell 汎関数とよばれる.

$$S_{t_i t_f}[\vec{x}(t)] = \frac{1}{4} \int_{t_i}^{t_f} \left\| \dot{\vec{x}}(t) - \vec{b}(\vec{x}(t)) \right\|_{Q^{-1}(\vec{x}(t))}^2 dt.$$

ただし行列  $Q^{-1}$  は摂動項の行列  $Q(\vec{x}) = g(\vec{x})g^T(\vec{x})$  の逆行列であり, 適当な行列  $A(\vec{\phi})$  としたとき  $\|\vec{v}\|_{A(\vec{\phi})}^2$  は  $\|\vec{v}\|_{A(\vec{\phi})}^2 := \vec{v}^T A(\vec{\phi}) \vec{v}$  と定義される. この作用汎関数は, 確率微分方程式 (4) から摂動を除いた決定方程式の解軌道において 0 になる.

Freidlin と Wentzell の先行研究により  $t_i, \vec{x}_i$  が  $t_f, \vec{x}_f$  に遷移する確率を  $\vec{x}(t_i) = \vec{x}_i, \vec{x}(t_f) = \vec{x}_f$  をみたとする絶対連続な軌道によって

$$P(\vec{x}_i, t_i; \vec{x}_f, t_f) \asymp \frac{1}{Z_A} \int \mathcal{D}[\vec{x}(\cdot)] \exp \left[ -\frac{\mathcal{A}[\vec{x}(\cdot)]}{\varepsilon} \right],$$

と表すことができる. ただし  $Z_A$  は正規化係数で, 指数因子  $\exp \left[ -\frac{\mathcal{A}[\vec{x}(\cdot)]}{\varepsilon} \right]$  は小さな  $\varepsilon$  について経路の空間における確率である. これを用いると, ある点  $\vec{x}_0$  から出発した確率過程が  $\vec{x}$  に到達するときの quasi-potential (準ポテンシャル) を次のように定義することができる.

$$F_{\vec{x}_0}(\vec{x}) = \min_{\{\hat{x}(\cdot) | \hat{x}(-\infty) = \vec{x}_0, \hat{x}(0) = \vec{x}\}} S[\hat{x}(\cdot)]. \quad (6)$$

<sup>\*1</sup> 連続な軌道は摂動なしの力学系の軌道とは異なることに注意する.

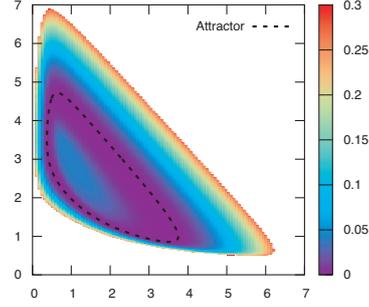


図 2: Brusselator 振動子の quasi-potential. アトラクタ (Attractor) を基準として値を計算した. 白い領域は数値計算の手法の限界で値を求められなかった領域である.

ここでも絶対連続な軌道を  $\hat{x}(\cdot)$  としている. また絶対連続な軌道がなければ  $F_{\vec{x}_0}(\vec{x}) = \infty$  となるように定義する.

$F_{\vec{x}_0}$  を準ポテンシャルと呼ぶ理由は, 勾配系  $\vec{b}(\vec{x}) = -\nabla U(\vec{x})$  と表すことができる場合,  $F_{\vec{x}_0}(\vec{x}) = U(\vec{x}) - U(\vec{x}_0)$  と実際のポテンシャルと一致する. 準と呼んでいる理由は, SDE(4) の摂動項についている係数  $\sqrt{2\varepsilon}g(\vec{x}(t))$  によって大きさが変化するためである. 実際に  $\sqrt{2\varepsilon} \rightarrow \sqrt{\varepsilon}$  とすると  $F_{\vec{x}_0}(\vec{x}) = 2(U(\vec{x}) - U(\vec{x}_0))$  という結果が得られるためであり, 絶対的な量より  $F_{\vec{x}_0}$  の地形に意味があることを表している.

MFT のレビュー論文 [2] にあるように quasi-potential を使うことで力学的な速い運動と準静的な操作や非線形効果によって起こる遅い変化を分離することができる. 実際に Brusselator 振動子  $\dot{x} = 1 + x^2y - 4x, \dot{y} = 3x - x^2y$  を考えたとき, 数値的に求められた (6) の  $F$  は, 図 2 で与えられる. この結果から, Brusselator 振動子において速い運動である振動的な振る舞いは図 2 における色が同一の領域で起こっており, アトラクタから離れていくような準静的な操作にかかる物理的な仕事の大きさが quasi-potential の色の違いで表されている.

## 5 連続 OV の場合の結果と考察

一般的にアトラクタを基準として quasi-potential を求めることが多い. しかしここでは図 1 に対応し

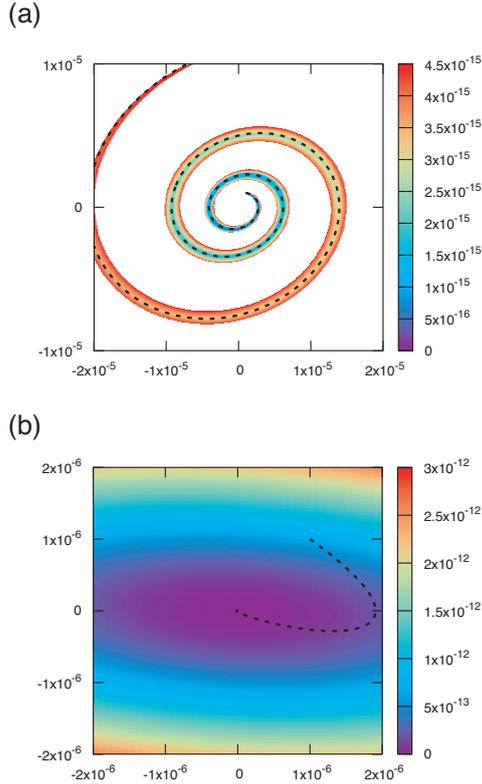


図 3: (a) 図 1 のパラメーター  $a, b$  に対応する quasi-potential. 破線は摂動なしの軌道であり図 1(a) と同じものである. (b) 図 1(b) のパラメーターに対応する quasi-potential. 破線は摂動なしの軌道であり図 1(b) と同じものである.

て, 不安定平衡点近傍の点  $u_0 = v_0 = 1 \times 10^{-6}$  を基準とした quasi-potential の値と安定平衡点  $u_0 = v_0 = 0$  を基準とした値を求めた. 数値的に値を求める方法はいくつかあることが知られているが, 本論文では Ordered Line Integral Methods[6] を用いる.

図 3(a) が不安定平衡点の近傍  $u_0 = v_0 = 1 \times 10^{-6}$  を基準として計算した結果である. 摂動なしの軌道上では値が 0 となっているはずであり, 基準点かららせん状に離れていくにつれて値が大きくなっていくように見えることは計算手法由来の誤差であると考えられる.

図 3(b) が安定平衡点  $u_0 = v_0 = 0$  を基準とする計算結果である. このとき原点を中心として楕円状に値が増大していっていることが確認できる.

本論文では連続 OV モデルの安定・不安定平衡

点周りでの力学系の軌道の振る舞いを数値計算し, MFT において言及される quasi-potential の数値解析も行った. 結果として不安定平衡点周りにおける数値解析では, 解析手法に由来する誤差の蓄積と, 絶対連続な経路が見つからないことによる計算結果の発散が見られた. 他方で安定平衡点周りにおける計算では, 連続な quasi-potential の地形を得ることができた.

現段階では数値計算から新規な結果が得られてはいないものの, OV モデルの共存領域における安定なクラスタ解 (リミットサイクル解) と安定な一樣流解を可視化できる可能性がある. そのため, 連続 OV モデル (3) の次数を上げて quasi-potential を議論することを考えている. さらに, 無限次元にも適用できる方法 [7] を参考にして, 一般的な非対称散逸系について MFT の適用可能性を調べたい.

## 参考文献

- [1] Y. Sugiyama, Dynamics of Asymmetric Dissipative Systems, Springer Series in Synergetics, Singapore, Imprint: Springer, first ed. edition, 2023, DOI: <http://dx.doi.org/10.1007/978-981-99-1870-6>.
- [2] L. Bertini, A. D. Sole, D. Gabrielli, G. Jona-Lasinio, and C. Landim, Macroscopic fluctuation theory, Reviews of Modern Physics, 87, 2 593–636, 2015, DOI: <http://dx.doi.org/10.1103/revmodphys.87.593>.
- [3] M. Bando, K. Hasebe, A. Nakayama, A. Shibata, and Y. Sugiyama, Dynamical model of traffic congestion and numerical simulation, Physical Review E, 51, 2 1035 – 1042, 02, 1995, DOI: <http://dx.doi.org/10.1103/physreve.51.1035>.
- [4] Y. Nomura, S. Saito, R. Ishiwata, and Y. Sugiyama, Hopf bifurcation analysis for a dissipative system with asymmetric interaction: Analytical explanation of a specific property of highway traffic, Physical Review E, 93, 1 012215:1–12, 01, 2016, DOI: <http://dx.doi.org/10.1103/physreve.93.012215>.
- [5] M. I. Freidlin and A. D. Wentzell, Random Perturbations of Dynamical Systems, Grundlehren der mathematischen Wissenschaften, 2012, DOI: <http://dx.doi.org/10.1007/978-3-642-25847-3>.
- [6] D. Dahiya and M. Cameron, Ordered Line Integral Methods for Computing the Quasi-Potential, Journal of Scientific Computing, 75, 3 1351–1384, 2018, DOI: <http://dx.doi.org/10.1007/s10915-017-0590-9>.
- [7] F. Bouchet, K. Gawędzki, and C. Nardini, Perturbative Calculation of Quasi-Potential in Non-equilibrium Diffusions: A Mean-Field Example, Journal of Statistical Physics, 163, 5 1157–1210, April, 2016, DOI: <http://dx.doi.org/10.1007/s10955-016-1503-2>.