

1次元非対称単純排他過程:その数理構造と物理的意義

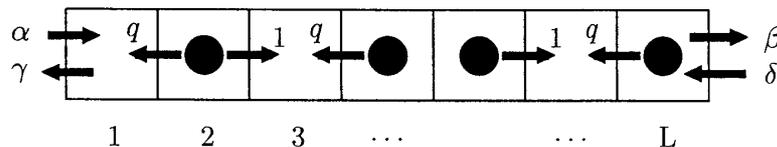
東京工業大学 理工学研究科 笹本 智弘¹

1次元非対称単純排他過程 (以下 ASEP) は, 体積排除の相互作用の下で多数の粒子が1次元格子を非対称なホッピングをするというだけの単純なモデルである. もともと mRNA 上のリボゾームの運動のモデルとして考えられたのが最初と考えられているが, その後平衡から遠く離れた非平衡統計力学の簡単なモデルとして再発見された. かなり早い時期から ASEP には厳密解が得られることが認識されていたが, q -直交多項式やランダム行列との関係のような深い数理構造が明らかにされて来たのはここ数年の事である. 一方で ASEP は, その単純さゆえに種々の応用が考えられてきた. 講演では ASEP の理解に関する現状について概観し, 今後の発展に関する展望を試みたい.

1 Introduction

1.1 モデル

長さ L の1次元格子を考え, 各格子点 (サイト) は, 粒子がいるかいないかの2状態しか無いとする. 格子上的各粒子は, 微小時間 dt の間に, 確率 $dt(qdt)$ で右隣 (左隣) のサイトへホップする. さらに左端 (右端) のサイト1 (サイト L) では, 粒子がいないときは確率 $\alpha dt(\delta dt)$ で粒子が入り, 確率 $\gamma dt(\beta dt)$ で出て行くとする. これが開放的境界条件での1次元非対称排他過程 (asymmetric simple exclusion process. 以下 ASEP.) である [1, 2, 3]. もちろん他の境界条件, 例えば周期的境界条件や無限系での ASEP を考えることも出来る.



1.2 応用

- 交通流

粒子が右方向のみにホッピングする特別な場合 ($q = \gamma = \delta = 0$) は, 交通流の簡単なモデルと見なすことが出来る.

¹E-mail: sasamoto@stat.phys.titech.ac.jp

研究会報告

- メッセンジャー RNA 上のリボゾームの運動

メッセンジャー RNA(mRNA) は, 遺伝情報を担う codon と呼ばれる単位が連なった長いひも状の分子である. リボゾームは, その mRNA の片方の端にくっつく事から始め, mRNA 上の遺伝情報を読みながら進んで行き, 逆の端まで来たら mRNA から離れる. この際 1 つの mRNA 上に複数のリボゾームがくっつく可能性はあるが, 同時に同じ遺伝情報を読むことは出来ない.

このような状況を記述するモデルとして, MacDonald らは次のようなもの考えた [4]. まず mRNA を長さ L の 1 次元格子とし, 各格子点は mRNA 上の遺伝情報に対応するとする. そしてリボゾームを粒子と考え, 今読んでいる情報に対応する 1 つの格子点にいると考える. その際 2 つの粒子が同じ格子点には来れないという制限がある事に注意する. また, 格子点 1 では割合 α で粒子が入り, 格子点 L では割合 β で粒子が出ていくとする. これは粒子が 1 方向しか進めない場合の ASEP に対応する.

- 相同性検索アルゴリズム

バイオインフォマティクスにおいては, (例えば DNA の) 2 つの sequence の類似した部分を探すことは基本的な問題である. そのような相同性を検索するアルゴリズムの特別な場合は, 離散時間の ASEP と見なせることが指摘されている [5].

2 定常状態と行列の方法

開放的境界条件での定常状態は, 境界での粒子の出入りのパラメータを変化させる事により相転移が起こる. つまり, 粒子をどんどん入れるがあまり出さないというパラメータ領域では粒子は渋滞を起こし, 高密度相と呼ばれる相に入る. 逆に粒子をあまり入れないがどんどん出す場合は粒子はかなり自由に進めるようになり, 低密度相と呼ばれる相に入る. また粒子をどんどん入れどんどん出すと最高カレント相と呼ばれる相に入る. これは, 境界パラメータの値を変えるだけで系のバルク部分の性質まで変わってしまうという事で, 非平衡系における境界の重要性を如実に表す例といえる.

さてこのモデルの定常状態は, 行列の方法と呼ばれる方法を用いると厳密解を構成することができ, 上記の相転移を厳密に記述することが可能である. $\gamma = \delta = 0$ の場合については, 既に [6] に詳しく書かれているので, ここでは全てのパラメータが入った場合の解について述べる [7].

行列の方法とは, 空のサイト ($\tau_j = 0$) に E , 粒子のいるサイト ($\tau_j = 1$) に D という行列を対応

$$\square \Leftrightarrow E \quad \blacksquare \Leftrightarrow D$$

させ、同じ空間のベクトル $\langle W|, |V\rangle$ を用意し、定常状態における確率が

$$P(\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_L) = \frac{1}{Z_L} \langle W| \prod_{j=1}^L (\tau_j D + (1 - \tau_j) E) |V\rangle \quad (1)$$

のように行列の積で書けるとする。そしてもし行列 D, E とベクトル $\langle W|, |V\rangle$ が

$$DE - qED = D + E \quad (2)$$

$$\langle W|(\alpha E - \gamma D) = \langle W| \quad (3)$$

$$(\beta D - \delta E)|V\rangle = |V\rangle \quad (4)$$

という代数関係を満たせば、(1) は実際に厳密な ASEP の定常状態になっているというものである。ここで $Z_L = \langle W|(D + E)^L|V\rangle$ は規格化定数である。行列の言葉では、カレントは

$$J = \frac{Z_{L-1}}{Z_L}, \quad (5)$$

1 点関数は

$$\langle n_j \rangle = \frac{1}{Z_L} \langle W|(D + E)^{j-1} D (D + E)^{L-j} |V\rangle \quad (6)$$

のように表される。ここで解を記述するために q -shifted factorial,

$$(a; q)_n = \prod_{k=0}^{n-1} (1 - aq^k),$$

$$(a, b, \dots, c; q)_n = (a; q)_n (b; q)_n \cdots (c; q)_n$$

を導入しておく。ただしここで $n = \infty$ も取り得るとする。

物理量の計算をするために、(2) を満たす行列とベクトルを見付けると、以下のようなものがあることが確認できる。

$$D = 1 + \begin{bmatrix} d_0^\sharp & d_0^\sharp & 0 & \cdots \\ d_0^\flat & d_1^\sharp & d_1^\sharp & \\ 0 & d_1^\flat & d_2^\sharp & \ddots \\ \vdots & & \ddots & \ddots \end{bmatrix}, \quad E = 1 + \begin{bmatrix} e_0^\sharp & e_0^\sharp & 0 & \cdots \\ e_0^\flat & e_1^\sharp & e_1^\sharp & \\ 0 & e_1^\flat & e_2^\sharp & \ddots \\ \vdots & & \ddots & \ddots \end{bmatrix}$$

$$\langle W| = h_0^{1/2} (1, 0, 0, \dots), \quad |V\rangle = h_0^{1/2} (1, 0, 0, \dots)^T$$

ただしここで

$$a = \frac{1}{2\alpha} \left[(1 - q - \alpha + \gamma) + \sqrt{(1 - q - \alpha + \gamma)^2 + 4\alpha\gamma} \right]$$

$$b = \frac{1}{2\beta} \left[(1 - q - \beta + \delta) + \sqrt{(1 - q - \beta + \delta)^2 + 4\beta\delta} \right]$$

$$c = \frac{1}{2\alpha} \left[(1 - q - \alpha + \gamma) - \sqrt{(1 - q - \alpha + \gamma)^2 + 4\alpha\gamma} \right]$$

$$d = \frac{1}{2\beta} \left[(1 - q - \beta + \delta) - \sqrt{(1 - q - \beta + \delta)^2 + 4\beta\delta} \right]$$

研究会報告

として

$$d_n^\sharp = \frac{q^{n-1}}{(1 - q^{2n-2}abcd)(1 - q^{2n}abcd)} \\ \times [bd(a+c) + (b+d)q - abcd(b+d)q^{n-1} \\ - \{bd(a+c) + abcd(b+d)\}q^n \\ - bd(a+c)q^{n+1} + abcd(a+c)bdq^{2n-1} + abcd(b+d)q^{2n}] \quad (7)$$

$$d_n^\sharp = \frac{1}{1 - q^n ac} \mathcal{A}_n, \quad e_n^\sharp = -\frac{q^n ac}{1 - q^n ac} \mathcal{A}_n \quad (8)$$

$$d_n^\flat = -\frac{q^n bd}{1 - q^n bd} \mathcal{A}_n, \quad e_n^\flat = \frac{1}{1 - q^n bd} \mathcal{A}_n \quad (9)$$

$$\mathcal{A}_n = \left[\frac{(1 - q^{n-1}abcd)(1 - q^{n+1})(1 - q^n ab)(1 - q^n ac)}{(1 - q^{2n-1}abcd)(1 - q^{2n}abcd)^2} \right. \\ \left. \frac{(1 - q^n bc)(1 - q^n bc)(1 - q^n cd)(1 - q^n ad)}{(1 - q^{2n+1}abcd)} \right]^{1/2} \quad (10)$$

$$h_0 = \frac{(abcd; q)_\infty}{(q, ab, ac, ad, bc, bd, cd; q)_\infty} \quad (11)$$

$$e_n^\natural = \frac{q^{n-1}}{(1 - q^{2n-2}abcd)(1 - q^{2n}abcd)} \\ \times [ac(b+d) + (a+c)q - abcd(a+c)q^{n-1} \\ - \{ac(b+d) + abcd(a+c)\}q^n \\ - ac(b+d)q^{n+1} + abcd(b+d)acq^{2n-1} + abcd(a+c)q^{2n}] \quad (12)$$

である。

これから $D + E$ は 3 重対角行列となるが、実はこれが Askey-Wilson 多項式の隣接 3 項間漸化式を記述する Jacobi 行列であることがわかる。すなわち、

$$P_n(x) = a^{-n} (ab, ac, ad; q)_n {}_4\phi_3 \left[\begin{matrix} q^{-n}, q^{n-1}abcd, ae^{i\theta}, ae^{-i\theta} \\ ab, ac, ad \end{matrix}; q, q \right], \quad (13)$$

$${}_r\phi_s \left[\begin{matrix} a_1, \dots, a_r \\ b_1, \dots, b_s \end{matrix}; q, z \right] = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(a_1, \dots, a_r; q)_k}{(b_1, \dots, b_s; q)_k} ((-1)^k q^{k(k-1)/2})^{1+s-r} z^k \quad (14)$$

と定義される Askey-Wilson 多項式 $P_n(x)$ を用いて

$$p_n(x) = \sqrt{\frac{h_0}{h_n}} P_n(x; a, b, c, d|q), \quad (15)$$

$$\frac{h_n}{h_0} = \frac{(1 - q^{n-1}abcd)(q, ab, ac, ad, bc, bd, cd; q)_n}{(1 - q^{2n-1}abcd)(abcd; q)_n} \quad (16)$$

で与えられる多項式をならべて作ったベクトル

$$|p(x)\rangle = (p_0(x), p_1(x), p_2(x), \dots)^T, \quad (17)$$

は、

$$(D + E)|p(x)\rangle = (2x + 2)|p(x)\rangle \quad (18)$$

を満たす, つまり行列 $D + E$ の固有ベクトルとなる事を示すことが出来る. すると例えば規格化定数 Z_L は $a, b < 1$ の時

$$Z_L = \oint_C \frac{dz}{4\pi iz} \frac{(z^2, z^{-2}; q)_\infty [(1+z)(1+z^{-1})/(1-q)]^L}{(az, a/z, bz, b/z, cz, c/z, dz, d/z; q)_\infty} \quad (19)$$

となる. ただしここで C は単位円を反時計回りに回る経路である. 同様に $a, b > 1$ となる場合に対する表式も得ることが出来る. これは鞍点法に適した形をしており, 実際に漸近形を得ることが可能である. さらに無限系のカレントの表式を得ることにより, 高密度相, 低密度相, 最高カレント相の間の相転移を厳密に記述することが可能である [7].

Askey-Wilson 多項式は, Jacobi 多項式や Hermite 多項式といった古典的な直交多項式を特別な場合として含む直交多項式の親玉的存在で, q -変型された直交多項式の理論の中で基本的な役割を果たしている [8, 9, 10].

3 時間依存の性質

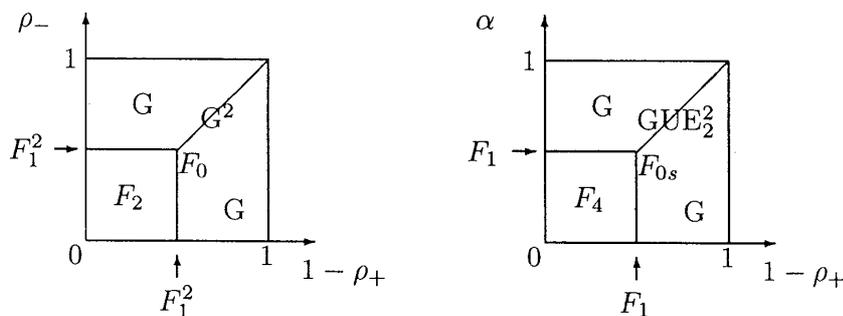
3.1 無限系のダイナミクス

前節では ASEP の定常状態が Askey-Wilson 多項式と呼ばれるもので記述されることを見た. 一方で最近, 時間に依存する性質に関する理解の進展も著しい. これは, 前節で述べた行列の方法による定常状態の理解とは全く別の流れの研究である.

粒子が一方向のみにホップする, TASEP の場合を考える. (粒子が両方向にホップする場合についてはこれまでのところ解析はない.) ここでは, 両無限系で原点より左右での密度が ρ_-, ρ_+ となっているような場合と, 半無限系で最初密度が ρ_+ となっており, 原点では割合 α で粒子の流入があるような場合を考える. そして原点を越えた粒子の個数 $N(t)$ について考える. すると粒子のカレントを J とおけば, 平均的には $N(t) \sim Jt$ となることが分かる. より正確には

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{N(t)}{t} = J \quad (20)$$

という事である. 次に問題となるのは $N(t)$ のこの平均からの揺らぎであるが, 結果は下図のようになる [11, 12].



左図: 両無限系での $N(t)$ の揺らぎ. 右図: 半無限系での $N(t)$ の揺らぎ.

研究会報告

これらの図で G とあるのは Gaussian を表す. より面白いのは $0 \leq x, y \leq 1/2$ の場合で, この領域における結果は, 以下のように 1 つの形にまとめられる.

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \mathbb{P} \left[\frac{N(t) - Jt}{Ct^{1/3}} > s \right] = F_*(s) \quad (21)$$

ただし

$$J = 1/4, \quad C = 2^{-4/3}. \quad (22)$$

F_* の $*$ は何種類かの値 ($* = 1, 2, 4, 0, 0s$) をとるが, II 型の Painlevé 方程式

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} u = 2u^3 + xu \quad (23)$$

の解で,

$$u(x) \sim \text{Ai}(x) \quad x \rightarrow \infty \quad (24)$$

という境界条件を満たすものを用いた表示が知られている. 例えば $* = 1, 2, 4$ の場合,

$$F_1(s) = \exp \left[-\frac{1}{2} \int_s^\infty (x-s)u(x)^2 dx - \frac{1}{2} \int_s^\infty u(x) dx \right], \quad (25)$$

$$F_2(s) = \exp \left[-\int_s^\infty (x-s)u(x)^2 dx \right], \quad (26)$$

$$F_4(s) = \exp \left[-\frac{1}{2} \int_s^\infty (x-s)u(x)^2 dx \right] \quad (27)$$

$$\times \left\{ \exp \left[-\frac{1}{2} \int_s^\infty u(x) dx \right] + \exp \left[\frac{1}{2} \int_s^\infty u(x) dx \right] \right\} / 2 \quad (28)$$

と書くことが出来る. $* = 0, 0s$ の場合も $u(x)$ を用いて記述出来るがここでは省略する [11, 12].

$F_*(s) (* = 1, 2, 4)$ は Gaussian ensemble とよばれるランダム行列の最大固有値のスケールされた確率分布関数としても現れる. 例えば $* = 2$ の場合は, ランダム行列は Gaussian Unitary Ensemble (GUE) と呼ばれるものが関係している. これは

$$A = \begin{bmatrix} w_{11} & u_{12} + iv_{12} & \cdots & u_{1N} + iv_{1N} \\ u_{12} - iv_{12} & w_{22} & \cdots & u_{2N} + iv_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ u_{1N} - iv_{1N} & u_{2N} - iv_{2N} & \cdots & w_{NN} \end{bmatrix} \quad (29)$$

という行列を, 各要素独立に Gaussian に従うとして, つまり

$$\prod_{j=1}^N \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-w_{jj}^2} \prod_{j < k} \frac{2}{\pi} e^{-2u_{jk}^2 - 2v_{jk}^2} \quad (30)$$

という確率分布で生成されるランダム行列である. さらに GUE については固有値を $x_1 > x_2 > \cdots > x_N$ としたときの確率密度も得ることが出来, それは

$$P_{N2}(x_1, x_2, \dots, x_N) = \frac{1}{Z_{N2}} \prod_{i < j} |x_i - x_j|^2 \prod_j e^{-x_j^2} \quad (31)$$

で与えられる。このとき、最大固有値 x_1 のスケールされた確率分布として $F_2(s)$ が現れる:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \text{Prob} \left[(x_1 - \sqrt{2N})\sqrt{2N}^{1/6} < s \right] = F_2(s).$$

$*$ = 1, 4 の場合も同様な式が成り立ち、 $*$ = 1 は Gaussian Orthogonal Ensemble (GOE), $*$ = 4 は Gaussian Symplectic Ensemble (GSE) と呼ばれる行列アンサンブルに対応している。一方、 F_0, F_{0s} は、現状ではランダム行列による解釈は知られていない。

さて ASEP の場合にこの結果はどのようにして得るかであるが、 $\rho_- = 1, \rho_+ = 0$ という特別な場合に関してはすでに [6] に解説してあるので興味のある方は参考にしてほしい。また、この問題は 1 次元多核成長模型 (PNG 模型) と呼ばれる界面成長の模型の原点での高さを考える事に等しく、その対応を用いて結果を得る事も可能である [11, 12]。1 次元 PNG 模型に関しては今村氏の報告も参考にして欲しい。

4 今後の展望

4.1 定常状態

2 節で見たように、ASEP の定常状態に関してはすでに多くの事が知られている。開放系の場合については最も一般的な場合の定常状態が Askey-Wilson 多項式によって記述されることがわかり、原理的にはどんな物理量でも計算できると考えられる。しかし、これで話が終わりと言う訳ではなく、むしろ今後はそのような仕組みを利用して、さらに物理的に興味のある事を調べて行くべきである。そのような流れの一つとして、ASEP の定常状態の密度プロファイルの揺らぎに関する研究があることを指摘しておく [13]。これによると、粒子数の揺らぎを記述する自由エネルギーが、平衡系で当然成り立っているはずの加法性を満たさない。このような結果は、今後非平衡定常状態の一般論を構築する際の一つの指針を与えてくれるであろう。

また ASEP では粒子が 1 種類しか無いが、多種類の粒子がいるような系になるとさらに興味深い現象を示す模型を行列の方法で調べることも出来る事を指摘しておく [14]。

今後是非とも目指すべき方向の 1 つは、2 次元モデルの解析である。その最初の試みとしてラダー型の系はスピン系の文脈では可積分なものも知られているので、確率過程モデルでも厳密解の見付かるものがあるのではないかと期待される。またこれは交通流の文脈では追い越し車線のある場合に相当し、そのような観点からも重要である [15]。

4.2 時間発展

現時点で研究が進展しつつあり一番ホットなのは、ASEP 時間相関に関するものである。すでにかかなりの事が分かって来ているが、今後数年でさらに理解が深まるものと期待している。以下、今後研究されるべきいくつかの問題点を挙げてみる。

まず、技術的な問題としては、 $q \neq 0$ の場合の時間発展をどのように記述するべきなのかという問題がある。第 2 節で見たように定常状態の記述においてはパラメータ q が入った場合も大変綺麗

研究会報告

に解けるので、時間発展に関しても q が入ったままで問題が解けるようになると期待されるが、今のところどのように捕えるのが良いのか分からない。もし分かれば $q \rightarrow 1$ の極限を考えることによりユニバーサリティのクロスオーバーまで記述できるようになる。

また、有限系特に開放系の時間発展に関する性質は、定常状態の境界条件依存性とバルク部分でのダイナミクスの競合を反映したものとなると考えられ、重要な問題であるが、ほとんど手を付けられていない。またその際解析に用いられる手法が行列の方法の拡張となるか、ランダム行列の方法の拡張となるか、あるいは両方を統一するような方法が見付かるのか、という方法論からの興味もある。

4.3 実験

$q = 1$ すなわち拡散が対称的なモデルについては、すでに対応する実験が存在している [16]。これは、フォトレジスト(感光性樹脂)に光を当てて1次元の格子をつくり、そこにコロイド粒子を入れるというようなものである。遠くない将来、同様な方法による ASEP に関する実験も可能になるものと期待している。

別の可能性としては、交通流としての ASEP の実験というのものもある。ごく最近、日本の交通流研究グループが普通に運転した場合の周期的交通流の実験を行い、実際に渋滞が発生することを確認した。今度は逆に運転ルールを ASEP ライクにして場合(どういうルールがいいのかハッキリとは分からないが!)、車を粒子と見て ASEP の特徴が実際に観測されるか? という事を実験で確かめてみてはどうかというのである。特に揺らぎが $t^{1/3}$ でスケーリングされるか、さらにスケーリング関数との一致はどうか? というところまで理論の結果と比較できるなら、大変興味深いと思う。

謝辞

研究会開催に際しては他の世話人や講師の方々および基研事務の方々に大変お世話になりました。皆様どうもありがとうございました。

参考文献

- [1] G. M. Schütz, 2001, Exactly Solvable Models for Many-Body Systems Far from Equilibrium, in *Phase Transitions and Critical Phenomena*, Vol. 19, C. Domb and J. Lebowitz eds. (Academic, London)
- [2] T. M. Liggett, 1985, *Interacting Particle Systems* (Springer-Verlag, New York)
- [3] T. M. Liggett, 1999, *Stochastic Interacting Systems: Contacts, Voter and Exclusion Processes* (Springer-Verlag, New York)
- [4] J. T. MacDonald, J. H. Gibbs, *Biopolymers* **6** (1968) 1.

- [5] R. Bundschuh, Phys. Rev. E **65** (2002) 031911.
- [6] 笹本 智弘, 物性研究 **79** (2003), 881.
- [7] M. Uchiyama, T. Sasamoto and M. Wadati, cond-mat/0312457.
- [8] R. A. Askey and J. A. Wilson, 1985, Mem. Am. Math. Soc. 319
- [9] G. Gasper and M. Rahman, 1990, *Basic Hypergeometric Series* (Cambridge University Press, Cambridge, MA)
- [10] R. Koekoek and R. R. Swarttouw, <http://aw.twi.tudelfu.nl/~koekoek/>
- [11] J. Baik and E. M. Rains. *J. Stat. Phys*, 100:523–541, 2000.
- [12] M. Prähofer and H. Spohn. In V. Sidoravicius, editor, *In and out of equilibrium, vol. 51 of Progress in Probability*, pages 185–204, 2002.
- [13] B. Derrida, J. L. Lebowitz, E. R. Speer, Phys. Rev. Lett. **87** (2001) 150601; J. Stat Phys. bf 107 (2002) 599–634, cond-mat/0203161;cond-mat/0205353.
- [14] G. M. Schütz, J. Phys. A **36** (2003) R339–379.
- [15] 光藤哲也, 早川尚男, 本研究会報告.
- [16] Q. -H. Wei, C. Bechinger, P. Leiderer, Science **287** (2000) 625.