

# 1次元非対称排除過程模型のカレント分布: population dynamics によるアプローチ

日永田 泰啓

佐賀大学 CNC

## 概要

1次元上の、排他的相互作用を持つ粒子の流れ(カレント)を持つ確率模型(1次元非対称排他過程模型)を考える。この模型には確率が入っているので、カレントが分布を持つ。では、このようなカレント分布は、いったいどのような分布なのだろうか? このような素朴な疑問に答えるために、(オリジナルの模型のものから)「変形した」遷移(確率)行列を持つ模型の simulation を行い、オリジナルの模型のカレント分布を求める事を試みた。

## Current distribution of a one-dimensional asymmetric simple exclusion process model: an approach by population dynamics

Yasuhiro Hieida

Saga Univ.

## Abstract

I report calculation of current distribution of a one-dimensional asymmetric simple exclusion process(ASEP) model. A modified transition matrix of the original ASEP model is used. The calculation is Legendre transformation of the eigenvalue of the matrix with the largest real part. The eigenvalue is obtained by population dynamics. A comparison is made between exact solutions and the obtained results.

## 1 はじめに

下流方向に1レーンしか無い高速道路における交通流の(バルク部分)を非常に単純化すると、1次元上の、排他的相互作用を持つ粒子の流れ(カレント)とみなせるだろう。本研究で対象とする模型は、そのような模型の一つ、1次元非対称排他過程(Asymmetric Simple Exclusion Process, 略して ASEP)模型 [1] である。この模型は、1次元格子点上を粒子が(一般に)非対称にホップする確率模型である。ただし、同一サイトを2粒子以上が占めることはできない、という制約がある。以下、話をより具体的にするために、周期的境界条件を課し一方向にのみ動

く(“Totally Asymmetric”)離散(discrete)時間版 ASEP 模型(以下 dTASEP と略記)を考えよう。この模型においては、各(離散)時刻で一つの粒子がランダムに選ばれる。その粒子は、進もうとする方向の隣接サイトに他の粒子が居なければ、そのサイトに移動する(隣接サイトに他の粒子が居たなら、その時刻での粒子の移動はない)。このようなルールで粒子を次々と長時間(長さを  $T$  とする)動かした時、全粒子が動いた距離を  $T$  で割ったものを(単位時間あたりの)カレント( $q$ )とする。

本研究で対象とするカレント分布の具体例を示す。全サイト数が4で全粒子数が2である dTASEP において十分長い時間  $T$  の間に各  $q$  を取る確率(prob)を厳密に計算した。この計算結果が図1において

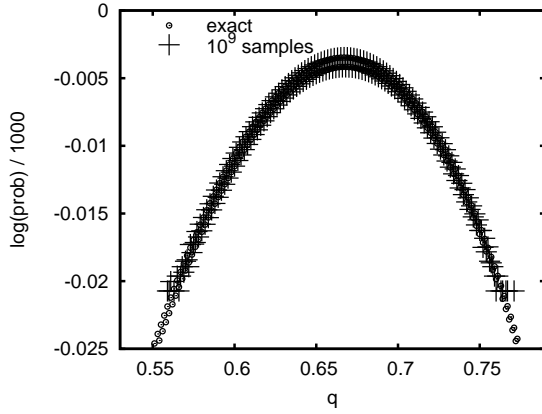


図 1: カレント分布 (サイト数 4、粒子数 2 に対するもの) の頂点付近 ( $0.55 \lesssim q \lesssim 0.80$ ) での比較。+ 印が素直なシミュレーション (サンプル数  $10^9$ ) であり、印が厳密な計算である。横軸は (単位時間あたりの) カレント ( $q$ )。

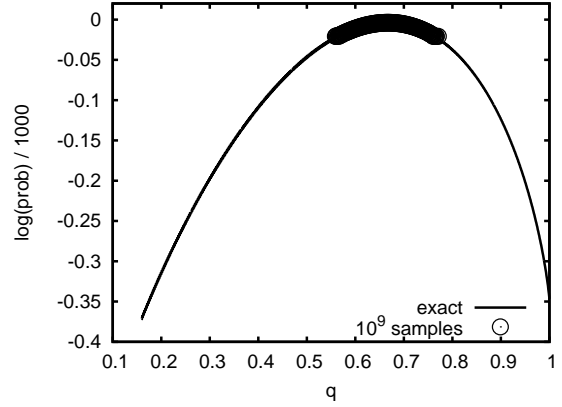


図 2: 図 1 でも使用したデータの全体。横軸は (単位時間あたりの) カレント ( $q$ )。  $0.55 < q < 0.75$  付近において実線 (厳密解) に重なっている 印は、素直なシミュレーション (サンプル数  $10^9$ ) によるデータ。

印でプロットしたものである。これが本研究で「カレント分布」と言ってるものである。図 1 で用いたのと同じ厳密な計算によるデータを、より広いカレントの領域 (横軸領域) でプロットしたものが、図 2 の実線である。この実線が表す分布には、たとえば、左右対称性は無い。では、この分布はいったいどのような性質を持つものなのだろうか？

このような疑問に答える目的でカレント分布を得ようとする時、全サイト数が大きくなれば (図 1 や図 2 に示したような) 厳密なデータを求めるのは難しくなるだろう。

だからと言って、乱数を使った素直なシミュレーションでカレント分布を推定するのも厳しいだろう。実際に乱数を使って粒子を動かして ( $T = 10^3$  とし、sample 数は  $10^9$  とした) 得たカレント分布が図 1 の + 印と、図 2 の 印である (後者は、 $0.55 < q < 0.75$  付近において実線に重なっているものである)。図 2 の 印のように、分布の頂点付近だけが、よくサンプルされる事になってしまう。そもそも、縦軸値が (たとえば)  $-0.2$  を持つような点を得るには、 $1/\exp(-0.2 \times 1000) \approx 10^{86}$  程度の莫大なサンプル数が必要である。

## 2 population dynamics

そこで本研究では、カレント分布を計算するのに population dynamics (以下では PD と略記) を用い

る [2]。dTASEP において、粒子配置 (configuration)  $C$  から  $C'$  へと遷移する確率を  $U(C'|C)$  と表す。これは遷移 (確率) 行列  $U$  の要素である。カレント分布を計算するには、まず、 $U$  を「変形」し、その変形した行列 ( $M$  と書く) の「最大」固有値 (「最大」の定義はすぐ後に書く) を求めることになる。 $M$  のノンゼロ要素の定義は

$$M(C'|C) := \begin{cases} U(C'|C) \exp(\lambda) & (C \triangleright C') \\ U(C'|C) & (C = C' \text{ の場合}) \end{cases} \quad (1)$$

である。ただし、「 $C \triangleright C'$ 」とは、 $C$  から  $C'$  への遷移が 1 回のホップで可能な事を意味する。行列  $M$  の固有値のうち、実部が最大のものが上述の「最大固有値」であり、以下では  $\exp(\mu(\lambda))$  と書くことにする。

ここまでの方法で求まるのは最大固有値である。これと図 1 や図 2 の縦軸値  $\log(\text{prob})/T$  とは、

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \log(\text{prob})/T = \min_{\lambda} [\mu(\lambda) - q\lambda] \quad (2)$$

の関係にある (右辺は、与えられた  $q$  の下での最小化)。そこで、まず最大固有値  $\exp(\mu(\lambda))$  を求め、次に式 (2) の最小化を行うことになる。今回、最小化には、文献 [3] の brent ルーチンを使った。

しかし、システムサイズが大きくなると、そもそも最大固有値  $\exp(\mu(\lambda))$  を数値的対角化 (厳密対角化) で求めるのは不可能となる。そこで確率的に求

める事を考える。そのために、2つの行列  $U'$ 、 $K$  を用意する。まず、対角行列  $K$  の定義は

$$K(C'|C) := K(C) \quad (C'|C) \quad (3)$$

である。ただし、

$$K(C) := \sum_{C'} M(C'|C) \quad (4)$$

であり、 $(C'|C)$  はクロネッカーのデルタである ( $C' = C$  の時、値 1 を取り、そうでない場合は値 0 を取る)。次に  $U'$  の方は、その (ノンゼロの) 行列要素を次のように定義する事で定める (ただし、考えているモデルでは、 $K(C) \neq 0$  とする) :

$$U'(C'|C) := M(C'|C) / K(C) \quad (5)$$

そうすると、上述の行列  $M$  を、2つの行列  $U'$ 、 $K$  の積で表すことができる :

$$M(C'|C) = U'(C'|C) K(C) \quad (6)$$

ここで、 $M$  は (一般に) 遷移確率行列ではないが、 $U'$  の方は、式 (5) の「規格化」によって、遷移確率行列になっている。ただし、この遷移確率行列  $U'$  は、もともとの遷移確率行列  $U$  とは一般に異なる。

ここまでの話で、最大固有値  $\exp(\mu(\lambda))$  とは、行列要素が  $U'(C'|C) K(C)$  である行列の最大固有値に等しい事になる (式 (6) を参照のこと)。

さて、PD の手順は次の通りである : (オリジナルのモデルのものとは異なる) 遷移確率行列  $U'$  に従って状態遷移する “walker” 集団を扱う (この一つ一つの遷移を、以下で  $U'$  process と呼ぶ)。ここでの状態とは、各 walker が (内部状態として持つ) 粒子配置である。すなわち、各 walker は、dTASEP の系一つを表す。walker 集団によって、各粒子配置を持つ walker 数の分布を表現する。各 walker は確率的に消滅 (自滅) したり、自分自身の clone を作る過程 (以下で  $K$  process と呼ぶ) によって行列  $K$  の効果を取り込む。たとえば、 $0 < K(C) \leq 1$  であるような  $\lambda$  の範囲に対しての  $K$  process とは、各 walker (内部状態を  $C$  とする) は確率  $1 - K(C)$  で消滅 (自滅) するような過程である。ただし、walker がどんどん消滅していくと、walker は絶滅して計算が続行不可能となる。そこで、一人の walker が消滅したら、この消滅前の walker 集団から一人の walker を選んでその clone を作って補充し、この walker に対して  $K$  process を実行する (この  $K$  process 以降で

も、消滅したら上記のように補充する事を、消滅しなくなるまで繰り返す)。この結果、全 walker が  $K$  process を開始する直前の walker 数と、 $K$  process を全 walker が終わった直後の walker 数とが同じ数となるようにした。

walker (初期) 集団から、上記  $K$  process と  $U'$  process によって時間発展させる事は、walker (初期) 集団が表す初期ベクトルに行列  $M$  をどんどん書いていく事に相当している。つまり、power method を確率的に実行しているイメージである。

### 3 結果

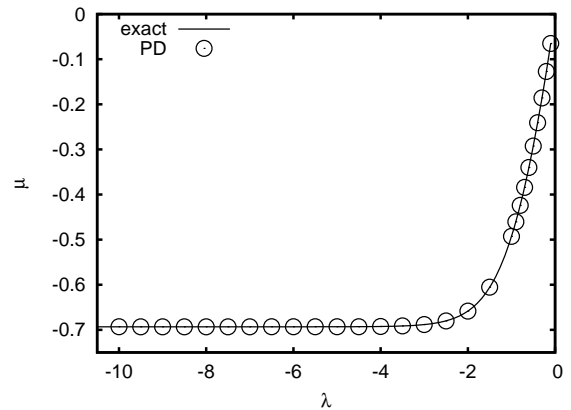


図 3: サイト数 4、粒子数 2 に対する  $\mu(\lambda)$  の比較。横軸、縦軸は、それぞれ  $\lambda$  と  $\mu$ 。実線は厳密解。印は、PD による計算値。

全サイト数が 4、全粒子数が 2 とした場合に、 $(10^3$  人の walker を使い、 $10^4$  iteration の) PD によって  $\mu(\lambda)$  を計算した結果が、図 3 の 印である。同じ図の厳密解 (実線) と良い一致を示している。

そこで、試みに、全サイト数が 4、全粒子数が 2 とした場合に、100 walker を使った PD によって固有値を求め、式 (2) の最小化を実行してみた。ただし、各 iteration は (収束判定はせずに)  $10^5$  回にて打ち切った。それが、図 4 においてプラス記号で示したものである。素朴なモンテカルロ法と違い、厳密解の (左の) 裾の方まで計算できている。なお、図では示していないが、右の裾の方まで計算する事も可能なはずである。

4 サイトより大きな系ではどうか? 図 5 は、全サイト数を 16、全粒子数を 8 とした場合の計算である。印が PD による計算、実線が厳密解である。この場合は、左の裾あたりで厳密解からズレている。

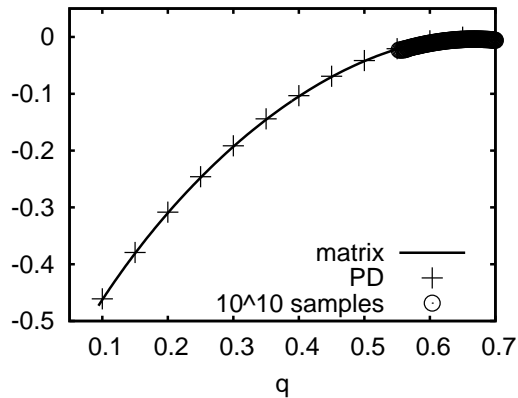


図 4: カレント分布 (サイト数 4、粒子数 2) の左部分における、素直なシミュレーション ( + 印; サンプル数は  $10^{10}$  )、厳密解 (実線)、PD (+ 印) の比較。印は、 $q > 0.55$  付近において実線 (厳密解) に重なっている。縦軸は、 $\log(\text{prob})/T$  であるが、PD と厳密解に対しては  $T \rightarrow \infty$ 、素直なシミュレーションに対しては  $T = 10^3$  である。

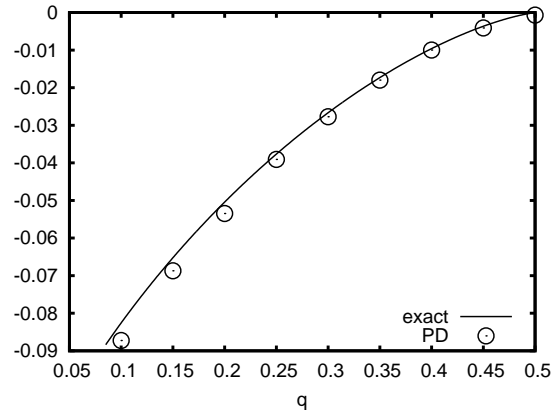


図 5: カレント分布 (サイト数 16、粒子数 8) の左部分。厳密解 (実線; Bethe ansatz による [4] もの) と PD ( o 印) の比較。縦軸は、 $\lim_{T \rightarrow \infty} \log(\text{prob})/T$  である。

## 4 課題

課題は次の通りである：

- 図 5 の左の裾での、厳密解とのズレを (可能な限り) 最小化し、(他の手段では計算不可能な) システムサイズの計算を行うこと。
- カレント分布の頂点よりも右側部分を PD で計算可能にする事。
- 粒子の流入、流出があるような境界を持つ ASEP 模型のカレント分布を求める事。
- 連続時間模型に対するカレント分布を計算する事。

上記の 2 つ目の点に関して補足する。第 2 節では、walker 数が増減する方法を説明した。walker 数が増減させない方法も考えられる。後者の方法では、第 2 節の  $K$  process を、walker に重みを持たせる事で実装する (よって、walker 数が増減させる必要が無い)。ただし、単位時間分の更新 ( $K$  process  $U'$  process) の最後に、リサンプリングを行なっている。この walker 数が増減させない方法による (予備的な) 計算結果を図 6 に示す (この方法は  $\lambda$  の正負による実装上の違いが無いので、図では  $\lambda > 0$  の領域も計算してある ;  $10^3$  人の walker を使い、 $10^5$

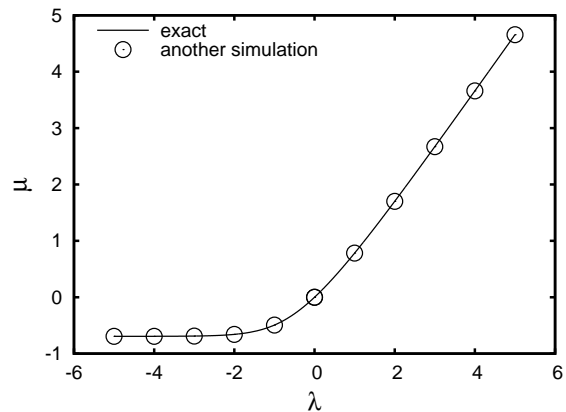


図 6: サイト数 4、粒子数 2 に対する  $\mu(\lambda)$  の比較。実線は (図 3 の) 厳密解 (を、正の  $\lambda$  の領域までプロットしたもの)。印は、第 4 節の最後に触れた「walker 数を増減させない方法」による計算値。

iteration による計算である)。この方法を用いると図 4 や図 5 に相当する図を、 $q$  の全領域について計算可能であると思われる。

## 参考文献

- [1] 笹本智弘 : 物性研究 **79**(2003)881
- [2] C. Giardinà et al.: Phys. Rev. Lett. **96** (2006)120603.
- [3] W. H. Press et al.: *Numerical Recipes in Fortran 90* (Cambridge University Press, 1996).
- [4] B. Derrida et al.: J.Stat.Phys. **94**(1999)1.