

ランダム環境場にある 1 次元粒子流れのモデル — 閾値分布に対する統計力学的研究 —

鳴海 孝之

関西学院大学 理工学研究科

概要

ランダムな位置エネルギーで特徴付けられる 1 次元格子場を動く粒子に関するモデルを理論的に研究した。各粒子は位置エネルギーを有し、粒子の存在が環境場を変化させる。粒子の移動規則として、移動に際して系の全エネルギーが増加する場合は動かないとしている。サイトに 1 つしか粒子が入らない場合、境界の位置エネルギーに関わらず、極めて特殊な場合でしか定常的な流れは生じない。一方、サイトに複数の粒子が入ることのできる場合、境界の位置エネルギーを大きく設定すれば定常的な流れが生じる。定常的な流れが生じるかのエネルギー閾値について、その分布は時間依存する Ornstein-Uhlenbeck 過程の Fokker-Planck 方程式で記述できる。これにより、閾値の分布は平均値と分散がサイト数に依存する正規分布であることが示される。

A model of one-dimensional particle flow in random environment — statistical-mechanical study for threshold distribution —

Takayuki Narumi

Graduate School of Science and Technology, Kwansai Gakuin University

Abstract

We theoretically studied a one-dimensional model for particle flow in an environment of random potential. A particle has potential itself, and the environment depends on the existence of the particles. The particle moves only if the total energy decreases associated with the movement. In case of infinite particle potential, any steady flow does not occur except for an extremely unusual case. In contrast, when a site can contain multiple particles, steady flow occurs at a large boundary potential. The threshold distribution of the boundary potential satisfies the Fokker-Planck equation of a time-dependent Ornstein-Uhlenbeck process. The distribution is thus a normal one, where both mean and variance depend on the number of sites.

1 緒言

非平衡開放系では、各種エネルギー流が引き起こす自己組織化により定常的なパターンが創発する。パターンが安定するにはエネルギーの連続的な注入と散逸が本質だ。1 次元の交通流を、片方の境界から流入しもう一方の境界から流入する現象と考えれば、交通流は非平衡開放系の定常問題である。

交通流を考える際に、非対称単純排他過程 (Asymmetrical Simple Exclusion Process, ASEP) [1,2] がよく扱われる。ASEP は簡単な 1 次元格子モデルであり、厳密解が得られる [3-5] こともあって、広く研究されている。ASEP では 1 次元格子上の粒子移動を考えるのだが、ある粒子が隣のサイトに移動する際に行き先のサイトに別の粒子がいる場合には、排除体積効果により移動が起こらないとしている。

ASEP では排他効果を通じて他の粒子と相互作用している。しかし、他の粒子とだけではなく、環境場との相互作用を考慮しなければならない場合もあるだろう。例として分子モーターの集団を考えると、分子モーター自身が電場や温度場といった周辺環境を変化し得る。その結果、ある1つの分子モーターは、分子モーター集団が生成したランダムな環境場を感じて運動することになる。こういったことは分子モーターに限らず起こりうるだろう。

以上を踏まえて、位置エネルギーにランダムさを有する環境場で1次元的に運動する粒子のモデルを研究する。このモデルでは移動方向がそのランダムさに依存する。依存の仕方として、移動により系のエネルギーが増加するような状況では粒子は移動しないとしている。さらに、粒子の存在自体が環境場を変化させることとする。このことは、微小回路における電荷輸送の研究 [6] に着想を得ている。回路基板表面の凹凸に起因するランダムな電場が環境場のランダムさ、電場中の電荷が粒子であり、粒子(電荷)の存在が環境場(電場)を変化させる。この状況では、粒子の存在で環境場の極小が変化するため、一様な環境場の場合に比べて粒子が境界から境界まで動く可能性は増える。

2 モデル

いま考える問題は、隣り合うサイト間を移動する粒子の1次元運動である。系内のサイト数は N ($N \geq 1$) とし、サイトに1から N の数字を順番に対応させる。粒子は、移動が可能なおとぎには、単位時間あたり1サイト移動する。粒子移動の規則に非対称性を含めることで自己駆動系とすることもできるが、现阶段では粒子起因の非対称性は含めていない。よって、サイト i にいる粒子の移動先の候補は $i+1$ か $i-1$ のいずれかである。

境界はサイト0とサイト $N+1$ であり、座標軸の自然な向きと対応させて、サイト0を左境界、サイト $N+1$ を右境界と呼ぶ。左境界には無限個の粒子が存在する。サイト1が空いているとき、単位時間あたり確率 α ($0 < \alpha \leq 1$) で1つの粒子がサイト1へ流入するものとする。一方、右境界は無限個の粒子を受け取ることができ、右境界に達した粒子が系に再び戻ることはない。

環境の情報は、サイト i の位置エネルギー E_i により特徴付けられているものとする。右境界での位置エネルギーを0とし、左境界の位置エネルギー E_c

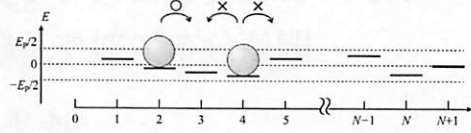


図1: 位置エネルギー分布図。各サイトでの実線が ξ_i を表している。また、粒子の直径が位置エネルギー E_p に対応している。いま、サイト2とサイト4に粒子があるとす。 $E_2 > E_3$ なので、サイト2にある粒子はサイト3に移動することができる。一方、 $E_3 > E_4$ か $E_4 < E_5$ なので、サイト4にある粒子はそこから動くことができない。

を制御パラメータとする。粒子が有する位置エネルギーを E_p とし、全ての粒子で同一とする。また、排除効果を調べたいので E_p は正とする。なお、排除過程は E_p が無限大であることに対応する。

サイト i からサイト $i \pm 1$ への粒子の移動に際し、粒子が位置エネルギー差を感じたときにどのように振舞うかは様々な状況が想定できる。ここでは、今いるサイトよりも移動先のサイトの位置エネルギーが小さいときのみ移動するとする。これは、系全体のエネルギーを最小にするように粒子が動くことに対応する。これにより、隣りあうサイトでの位置エネルギーの大小関係のみで移動方向が決まる。

系内に粒子が全くない状況でも、各サイトは位置エネルギーのランダムさ $E_i = \xi_i$ ($i = 1, \dots, N$) をもつ(図1)。それらは、 $|\xi_i| < E_p/2$ の範囲の一様分布に従うランダムな数とする。考える移動規則の元では、 $\{\xi_i\}$ の大小関係が重要となる。例えば、 $N = 3$ として $(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = (-0.5E_p, 0.3E_p, -0.8E_p)$ と $(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = (0.8E_p, 0.9E_p, 0.7E_p)$ という分布があるとす。これらはどちらも $\xi_2 > \xi_1 > \xi_3$ なので、粒子移動に関してこれらは等価である。よって、 $\{\xi_i\}$ の値自体は意味を持たないので、分布形状は一様でなくとも一般性を失わない。

系内に粒子が存在せず、 $E_c < \xi_1$ である状態を最初に用意する。その後、 E_c を ξ_1 より大きな値に設定した時刻を $t = 0$ とし、粒子の流入を開始する。

3 定常的流れが生じるかの閾値

$t = 0$ でサイト1に流入する粒子は、 $E_i > E_{i+1}$ である限り粒子は単位時間ごとに右へと移動する。しかし、 $E_i < E_{i+1}$ となるサイト i (n_i とする) で粒子は動かなくなる。2番目に流入する粒子の振舞は、 E_p が無限か有限かで異なる。

3.1 E_p が無限大の場合

粒子が有する位置エネルギー E_p が無限大であるとき、2番目以降に流入する粒子はサイト n_1 より右に行くことができない。よって、1番目の粒子が停止しないとき ($\xi_1 > \xi_2 > \dots > \xi_N > 0$) を除けば、左境界から右境界への粒子の定常的な流れは起こらない。しかし、任意の $\{\xi_i\}$ を考えるときにこのような環境場となる確率は $1/(N+1)!$ なので、 N が大きいときには極めて特殊な状況でしか定常的な流れが生じない。

3.2 E_p が有限の場合

粒子の持つ位置エネルギー E_p が有限のとき、1つのサイトには複数の粒子が入りうる。これにより、 E_c の大きさによって左境界から右境界への流れが生じるか否かが決まり、そこには位置エネルギーの閾値 E_{th} が存在することになる。

1番目の粒子がサイト n_1 で静止している状況では、2番目の粒子についてもやはり $E_i > E_{i+1}$ である限り右方向に移動する。しかし、 $|\xi_i| < E_p/2$ なので、この粒子はサイト $n_1 - 1$ で必ず止まることになる。これがサイト 1 に粒子が止まるまで続く。結果的に、サイト 1 とサイト n_1 の間にある全てのサイトで位置エネルギーが E_p だけ増加することになる (図 2a)。よって、サイト 1 に新たな粒子が流入するには、左境界の位置エネルギー E_c を E_p だけ大きくする必要が生じる。 E_c を大きくすることで流入した次の粒子は、サイト n_1 からサイト $n_1 + 1$ への移動が可能になる (図 2b)。この粒子は $E_i > E_{i+1}$ である限り右に動き、 $E_i < E_{i+1}$ となるととどまり止まる。粒子が静止したサイトをサイト n_2 とすれば、粒子の流入によりサイト 1 とサイト n_2 の間にある全てのサイトで位置エネルギーが E_p だけ増加する。このことを繰り返すことにより、左境界の位置エネルギー E_c を大きくすれば、任意の $\{\xi_i\}$ の分布に対し、左境界から右境界への流れが定常的に生じることが分かる。これは、 E_p が無限大のときに左境界から右境界への流れが極めて低い確率でしか生じなかったことと対照的だ。

粒子が存在しないときの位置エネルギー分布に依存して閾値が決まることが分かったので、次に閾値分布の形状を定める。 $E_i < E_{i+1}$ であるようなサイト i に粒子が到着するたび、位置エネルギー差を乗り越えるために E_c の値を E_p だけ大きくしなければ新たな粒子が流入しない。そこで、定常的な流れが

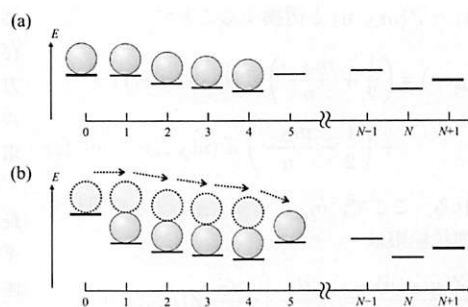


図 2: (a) 最初の粒子が $n_1 = 4$ で止まり、その左側で次々と粒子が止まっている様子。このままの E_c では粒子の定常的な流れは生じない。(b) E_c を E_p だけ大きくすることで次の粒子が流入する。その粒子は動かなくなった粒子の位置エネルギーを利用し、最初の粒子が動かなくなったサイト n_1 の右へと移動することができるようになる。

生じるかの閾値 E_{th} は $E_1 + mE_p$ と書ける。 m は、粒子が存在しないときに系内で左のサイトよりも右のサイトの位置エネルギーが大きい箇所数を表す。以上より、 m がどのような分布を持つかわかれば、閾値の分布も分かる。

m の分布を統計力学的手法で調べよう。ランダムな位置エネルギーを有する n 個 ($n \geq 1$) のサイトを 1 次元的に横方向に並べるとき、 m 箇所 ($0 \leq m < n$) で左より右の位置エネルギーが大きい並び方となる確率を $Y(m, n)$ で表すことにする。なお、ここで n は、系内のサイト数と右境界を考慮した $n = N + 1$ として後ほど対応付ける。サイト数が n 個の場合の確立は $n - 1$ 個の場合の確率により表すことができるので、確率分布 $Y(m, n)$ に関する漸化式を次の表式で得る [7] :

$$Y(m, n) = \frac{m+1}{n} Y(m, n-1) + \left(1 - \frac{m}{n}\right) Y(m-1, n-1). \quad (1)$$

$n = 1$ のときは位置エネルギーの比較ができないので、0 箇所 で左より右の位置エネルギーが大きいとみなして $Y(0, 1) = 1$ とする。また、 $0 \leq m < n$ を満たさない m については $Y(m, n) = 0$ とする。

漸化式 (1) を用いれば $Y(m, n)$ の具体的な値を順次求めることができる。 n を固定し m を変数とすると、確率分布は $m_c(n) = (n-1)/2$ で対称である。そこで、 $m_\Delta = m - m_c(n)$ と変数変換し、

$Y(m, n) = Z(m_{\Delta}, n)$ と置換することで

$$Z(m_{\Delta}, n) = \left(\frac{1}{2} + \frac{m_{\Delta+}}{n}\right) Z(m_{\Delta+}, n-1) + \left(\frac{1}{2} - \frac{m_{\Delta-}}{n}\right) Z(m_{\Delta-}, n-1) \quad (2)$$

が得られる。ここで、 $m_{\Delta\pm} = m_{\Delta} \pm 1/2$ と略記している。連続極限は

$$\frac{\partial Z(m_{\Delta}, n)}{\partial n} = \frac{\partial}{\partial m_{\Delta}} \left[\frac{m_{\Delta}}{n+1} Z(m_{\Delta}, n) \right] + \frac{1}{8} \frac{\partial^2 Z(m_{\Delta}, n)}{\partial m_{\Delta}^2} \quad (3)$$

となり、時間依存する Ornstein-Uhlenbeck 過程 [8] における Fokker-Planck 方程式に対応する。

式 (3) から、 $Z(m_{\Delta}, n)$ は m_{Δ} に関して平均が 0 の正規分布であり、分散は $(n-1)/12$ であることが分かる [7]。よって、 E_1 の平均が 0 であることを踏まえると、閾値 E_c についての平均値は $Y(m, N+1)$ の平均値 $N/2$ と一致し、閾値の分布形状は分散が $N/12$ である正規分布である。

4 結言

粒子が存在することで環境が影響を受け、粒子の流れの性質が変わるのではないかという問題意識のもと、ランダムな環境場で運動する粒子に関するモデルを研究した。粒子はそれ自身が位置エネルギーを有し、粒子の存在が環境場に影響するというモデルである。ある 1 つの粒子に着目すると、粒子が存在しないときの環境の位置エネルギーと他の粒子の位置エネルギーはもはや区別できず、周囲の粒子が変化させた環境を運動していると考えられる。

各サイトに 1 つしか粒子が存在できないとき、つまり粒子の有する位置エネルギーが無限大のときは、ほぼ無視できる確率でしか現れない位置エネルギー分布を除けば、定常的な流れが生じないことが分かった。一方、粒子の有する位置エネルギーが有限のときには、制御パラメータである左境界の位置エネルギーを大きくすれば有限の閾値が存在し、制御パラメータを閾値以上に設定することで長時間極限での定常流れが生じる。その閾値分布を求める問題は、 $Y(m, n)$ —つまり、ランダムな位置エネルギーを有する n 個のサイトを横方向に並べるときに m 箇所まで左より右の位置エネルギーが大きくなるような並び方となる確率分布—を求める問題に帰着する。 $Y(m, n)$ についての漸化式を導出し、 $Y(m, n)$ と等

価な分布 $Z(m_{\Delta}, n)$ について調べることで、時間依存する Ornstein-Uhlenbeck 過程の Fokker-Planck 方程式に従うことを示した。これにより、閾値エネルギーの分布形状が正規分布であることを定量的に求めることができた。

ここでは粒子が存在しない状態から観測を開始し、長時間極限で定常的な流れが生じるかの位置エネルギー閾値分布のみを調べた。つまり、定常の流れ自体の特性については研究していない。今後は、境界からの粒子流入条件と流れの性質との関係などを研究する必要があるだろう。また、現在のモデルでは環境場の位置エネルギーの大小関係に従って粒子が動くのみであり、非平衡の要素が境界からの流入と流出に限られている。そこで、ここで研究したモデルを基礎として、粒子の運動エネルギーや移動方向の非対称性といった運動規則をモデルに組み込むことで、より一般的な非平衡系を再現できるモデルとして発展させることを計画している。

参考文献

- [1] C. T. MacDonald, J. H. Gibbs, and A. C. Pipkin, *Biopolymers* **6**, 1 (1968).
- [2] F. Spitzer, *Adv. Math.* **5**, 246 (1970).
- [3] B. Derrida, M. R. Evans, V. Hakim, and V. Pasquier, *J. Phys. A: Math. Gen.* **26**, 1493 (1993).
- [4] T. Sasamoto, *J. Phys. A: Math. Gen.* **32**, 7109 (1999).
- [5] M. Uchiyama, T. Sasamoto, and M. Wadati, *J. Phys. A: Math. Gen.* **37**, 4985 (2004).
- [6] A. A. Middleton and N. S. Wingreen, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 3198 (1993).
- [7] T. Narumi, M. Suzuki, Y. Hidaka, T. Asai, and S. Kai, *Phys. Rev. E* **84**, 051137 (2011).
- [8] C. Gardiner, *Stochastic Methods: A Handbook for the Natural and Social Sciences* (Springer, 2009).