2012年度 修士論文

円周上の自己駆動粒子模型と バクテリア集団の円運動観察

Self-driven particle models on a circle and observations of circular motions of bacteria

中央大学大学院 理工学研究科博士前期課程 物理専攻 山田 泰之

概 要

生物や車は,それぞれ本能やドライバーの意思によって自発的に運動する.この ような自発的に運動をする粒子の事を自己駆動粒子という.自発的に運動を行うた め,粒子の運動は慣性の法則に従わず,単純な等速運動にはならない.本論文では, 相互作用する自己駆動粒子系について調べた二つの研究結果を報告する.第一部で 取り上げる内容は,Totally Asymmetric Simple-Exclusion Process (TASEP)の速 度相関についての研究である.TASEPは排他効果を与えた自己駆動粒子が1次元格 子上を決められた一方向に一定確率で運動する模型である,そのためTASEP は交 通流のシンプルな確率模型として知られている.本研究では粒子の速度の統計的な 性質を明らかにするため,速度相関関数を定義し,速度相関の特徴づけを行うため に速度共分散を計算した.

第二部で取り上げる内容は,バクテリアの移動方向を揃えた集団運動の観察実験 である.バクテリアは繁殖に適した環境を求めて自発的に運動する.そのため,道 路交通とはスケールが大きく異なるが,バクテリア集団の移動方向を揃えた運動も TASEPのような排他効果を持った自己駆動粒子の流れである.本研究では観測的に 知られている枯草菌,*Bacillus subtilis*(*B. subtilis*)の移動方向を揃えた集団運動 を定量的に示す事を目的とし,実験系を作成し,観察動画を流体解析ソフトを用い て解析してバクテリア集団の平均的な流れの測定を行った.

目 次

第I部 Proce	円周上の離散時間 Totally Asymmetric Smple-Exclusion ss の速度相関 1		
第1章 1.1 1.2	はじめに 2 モデルの定義と定式化 2 ZRP へのマッピング 3		
第2章 2.1 2.2 2.3	先行研究の結果のまとめ6TASEP の定常状態6分配関数の超幾何関数表示7平均速度10		
第3章 3.1 3.2	TASEPの速度相関 12 速度相関関数 12 3.1.1 平均速度 速度共分散 15		
第4章 4.1 4.2 4.3	速度の漸近的な独立性 17 Riccati の微分方程式		
第 II 部 バクテリアの円運動観察実験 22			
第5章 5.1	はじめに23試料バクテリア , B. subtilis について		
第6章 6.1 6.2 6.3	実験方法 26 実験全体の流れ 26 寒天培地作成方法 26 円形プール作成方法 27		
第 7章 7.1	B. subtilis の集団運動の観察30観察結果307.1.1菌密度が低い場合の集団運動の様子 ($\rho = 0.36$)30		

7.1.230 7.1.3高密度の円形プール内での観察結果 ($\rho = 0.72$) 32第8章 集団運動の解析方法 33 33 8.1.1 33 8.1.2 34第9章 速度測定結果 $\mathbf{35}$ 3536 渋滞が発生した場合の速度分布図 (*ρ* = 0.5) 9.1.236 36

第I部

円周上の離散時間 Totally Asymmetric Smple-Exclusion Processの速度相関

第1章 はじめに

Totally Asymmetric Smple-Exclusion Process (TASEP)とは,1次元格子上を粒 子が決められた一方向へ一定の確率で進む非平衡な流れの確率模型である.粒子に は排他効果を与えており,同じサイトに2つ以上の粒子が存在することは出来ない. また,1回の更新で粒子は最大一つ先のサイトまでしか移動できないため,追い越 しも禁止されている.このため,粒子を車と見なすと,TASEPは交通流の最もシン プルな模型と見なすことができる.本論文では,時間が離散的で,1次元格子に周 期境界条件を課した場合のTASEPを取り扱う(図1.1).また,粒子の遷移に関して は,1ステップの間に全ての粒子に対して更新を行うパラレルアップデートルール を適用する.以後,同条件下のTASEPを円周上の離散時間TASEPと呼ぶことにす る.



図 1.1: TASEP の図. 粒子は時計周りに進行する. 1 つ先のサイトが他の粒子で占められている場合は遷移出来ない.

1.1 モデルの定義と定式化

始めに表記法について説明する.本論文では正の整数を $N = \{1, 2, 3, ...\}$ とし, $N_0 = \{0\} \cup N = \{0, 1, 2, ...\}$ とする.集合 B に含まれる全ての要素の数を|B|と 書き, $B \subset C$ のとき,集合Cの中のBの補集合を $C \setminus B$ と表わすことにする.以上の定義より, $|C \setminus B| = |C| - |B|$ である.

システムサイズ $K \in \mathbb{N}$ の 1 次元格子を $\Lambda = \{1, 2, \dots, K\}$ とする.1 次元格子上 のサイト $i \in \Lambda$ に粒子がいる場合を $\eta(i) = 1$ とし,粒子がいない場合を $\eta(i) = 0$ と する.このとき,時刻 $t \in \mathbb{N}_0$ での粒子配置 $\eta_t = \{\eta_t(i)\}_{i \in \Lambda} \in \{0, 1\}^{\Lambda}$ において,隣 接サイトペアのうち1つ先のサイトが空サイトのペアを要素とする集合を,

$$A_t = \{(i, i+1) : 1 \le i \le K, \dots, \eta_t(i) = 1, \eta_t(i+1) = 0$$
を満たす \} (1.1)

1つ先のサイトに粒子がいないため,隣接ペア A_t のサイトi上の粒子はサイトi+1へ遷移可能である.ここで,粒子のホップ確率をpとし,隣接ペア $(i,i+1) \in A_t$ それぞれに対して独立に確率pで遷移を起こすか否か決定する.遷移を起こすペアを要素とする集合 $\widehat{A_t} \subset A_t$ とすると, A_t から $\widehat{A_t}$ を選ぶ確率は $p^{|\widehat{A_t}|}(1-p)^{|A_t|-|\widehat{A_t}|}$ となる. $(i,i+1) \in \widehat{A_t}$ を満たすサイトi上の粒子だけが1つ先のサイトi+1へ遷移することができるため,時刻t+1での粒子配置 $\eta_{t+1} = \{\eta_{t+1}(i)\}_{i\in\Lambda}$ は次で与えられる.

$$\eta_{t+1}(i) = \begin{cases} \eta_t(i) - 1, & \text{if } (i, i+1) \in \widehat{A_t}, \\ \eta_t(i) + 1, & \text{if } (i-1, i) \in \widehat{A_t}, \\ \eta_t(i), & \text{otherwise.} \end{cases}$$
(1.2)

隣接ペア A_t の定義から, $(i,i+1) \in \widehat{A_t}$ ならば $(i-1,i) \notin \widehat{A_t}$ である.以上の更新手続きをパラレルアップデートという.



図 1.2: 隣接ペア.システムサイズ K = 14, 粒子数 N = 6. 粒子は左から右へ移動 する. 図では,時刻 t で粒子が遷移可能な隣接ペア A_t のうち,確率 p で遷移した粒 子を赤色で示した.

1.2 ZRPへのマッピング

ここでは,ある特別な場合として TASEP を含む,Zero-Range Process (ZRP)を 導入する.TASEP と同様に,ZRP は1次元格子上を粒子が進行方向1つ先のサイ トへ移動する確率模型である (図 1.3). ZRP は粒子に排他効果を与えておらず, 一般に遷移確率は各サイト上の粒子数の関数であり, 1つのサイトから複数個の粒子が遷移可能である. TASEP と等価な場合の ZRP では, 遷移確率は TASEP と同様に一定値となり, 一つのサイトから一度に遷移する粒子の数も最大一つに制限される.

TASEP を ZRP に写像するためには, この二つのモデルの粒子とサイトそれぞれに ついて以下の対応付けを行えばよい[1, 2].

- TASEP 粒子を ZRP のサイトと見なす.
- TASEP 粒子が進行方向に対して持つ空きサイト数を ZRP の各サイト上の粒子数と見なす.

図 1.1 の粒子 p1 は図 1.3 のサイト p1 に対応している (TASEP の粒子 p1 が一つ先のサイトへ進むと, ZRP のサイト p1 からサイト p6 へと粒子が移動する).また, TASEP において,一つ先のサイトが他の粒子で占められている場合は,ZRP において,対応するサイト上の粒子数がゼロの場合を表わす(図 1.3 のサイト p2, p5).つまり, TASEP の排他効果は, ZRP において,粒子がいないサイトからは粒子が出ていかない、ということに対応する.以上のことを,改めて式を用いて説明する.



図 1.3: ZRP の図. 粒子は右から左へ進行する.

TASEP の粒子数を $L \ge 0$, $1 \le L \le K \ge \sigma$. TASEP の粒子配置 $\eta \in \{0, 1\}^{\Lambda}$ に対して, $i_1 = \{1 \le i \le K : \eta(i) = 1\} \ge 0$,

$$i_{j+1} = \min\{i_j < i \le K : \eta(i) = 1\}, \quad 1 \le j \le L - 1,$$
(1.3)

を定義する.*i_j*は*j*番目の粒子が配置しているサイト番号を表わす.したがって,粒子*j*が進行方向最も近い粒子*j*+1との間に持っている空きサイト数は

$$n(j) = i_{j+1} - i_j - 1, \quad 1 \le j \le L.$$
(1.4)

(1.3) と (1.4) により,粒子配置 $\eta = \{\eta(i)\}_{i=1}^{K}$ から空サイトの配置 $\mathbf{n} = \{n(j)\}_{j=1}^{L}$ はただ一つに決まる.しかし, i_1 の定義より, \mathbf{n} から η への写像において1番目の粒子の配置 i_j の情報が失われるため, \mathbf{n} は η をただ一つに決めることはできないが, \mathbf{n} ま系に周期境界条件を課しているため,1番目の粒子の位置は η を決定する上で重要な情報ではない.

以上の写像により,時刻 t での TASEP 粒子配置 $\eta(\eta_t, t \in \mathbf{N}_0)$ から確率過程 $\mathbf{n} = \{n_t(j)\}_{j=1}^L, t \in \mathbf{N}_0$ が得られた.この確率過程は,ホップ確率を一定値 p とし,一度 に遷移出来る粒子の数を最大一つに制限した場合の ZRP である.

ZRP の最も著しい特徴は,定常状態の分布関数が積の形で与えられることである [1,2].金井,西成,時弘[3]は上述のZRPとの対応を用いることで,円周上の離散 時間 TASEP の定常状態において分配関数を計算し,それがガウスの超幾何関数で 与えられることを示した.また,金井らは,TASEP の平均速度を計算し,その熱力 学的極限について調べた.

我々は,円周上の離散時間 TASEP の速度相関について研究を行い,任意の数の 粒子の速度の積の期待値として速度相関関数を計算した.その結果,円周上の離散 時間 TASEP の定常状態の速度相関は,着目する粒子の配置のしかたに依らず,着 目する粒子の個数にのみ依存するという結果を得た.また,速度共分散の計算を行 い,熱力学的極限において粒子速度は漸近的に独立な確率変数となるという結果を 得た.

本修士論文第一部は以下のような構成になっている.まず第2章では,金井,西成, 時弘の先行研究[3]の結果についてまとめる.第3章,第4章ではYamada-Katori[4] の結果を説明する.第3章では,3.1節で速度相関関数の定義を行い,一般式の導 出を行う.また,速度相関関数の特別な場合として平均速度が得られることを示す. そして,3.2節で速度共分散の計算結果を示す.第4章では,金井らによる平均速度 の熱力学的極限の計算方法を説明し,本研究の結果である熱力学的極限における粒 子速度の漸近的な独立性について説明する.

第2章 先行研究の結果のまとめ

この章では,金井,西成,時弘による円周上の離散時間 TASEP についての先行 研究 [3] の結果を説明する.

2.1 TASEP の定常状態

ZRP のサイト数を L, 粒子数を N とする (これは L + N サイト, L 粒子の TASEP に対応する). このとき ZRP の粒子配置を以下のように定義する.

$$\Omega_{L,N} = \left\{ \mathbf{n} = \{n(j)\}_{j=1}^{L} \in \{0, 1, \dots, N\}^{L} : \sum_{j=1}^{L} n(j) = N \right\},$$
(2.1)

ここで,nはZRPの粒子配置,n(j)はサイトj上の粒子数を表わす.ZRPの分布関数はマスター方程式の定常解として以下のように積の形で与えられる[2],

$$\mathbf{P}_{L,N}(\mathbf{n}) = \frac{1}{Z_{L,N}} \prod_{j=1}^{L} f(n(j)), \quad \mathbf{n} = \{n(j)\}_{j=1}^{L} \in \Omega_{L,N},$$
(2.2)

ここで, f(n(j)) はサイトウェイト関数,

$$f(n) = \frac{f(1)^n}{f(0)^{n-1}} (1-p)^{n-1} \quad n \ge 1 ,$$
(2.3)

である . f(0) , f(1) は任意性があり , 金井らはこれらを f(0) = 1-p , f(1) = (1-p)/p とした . 本論文では単純に f(0) = f(1) = 1 とする . $Z_{L,N}$ は分配関数で , (2.2) より 以下のように与えられる (結果の導出は次節を参照) .

$$Z_{L,N} \equiv \sum_{\mathbf{n}\in\Omega_{L,N}} \prod_{j=1}^{L} f(n(j))$$

= $(1-p)^{N-1} LF\left(1-L,1-N;2;\frac{1}{1-p}\right)$
= $\frac{(-p)^{L+N}L}{(1-p)^{L+1}} F\left(L+1,N+1;2;\frac{1}{1-p}\right).$ (2.4)

ここで $F(\cdot)$ はガウスの超幾何関数

$$F(\alpha,\beta;\gamma;z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha)_n (\beta)_n}{(\gamma)_n} \frac{z^n}{n!},$$
(2.5)

a(n) はポッホハンマー記号, a(n) = a(a+1)(a+2) ··· (a+n-1) である. また (2.4) 式の右辺 2 行目から 3 行目の式変形ではクンマー変換

$$F(\alpha,\beta;\gamma;z) = (1-z)^{\gamma-\alpha-\beta}F(\gamma-\alpha,\gamma-\beta;\gamma;z)$$
(2.6)

を用いた.

2.2 分配関数の超幾何関数表示

(2.2)の両辺に対して, ZRPのサイト1に着目し, それ以外の *L*-1サイト上の粒子配置について和をとることにより1サイト相関関数を定義する.

$$\sum_{\mathbf{n}' \in \Omega_{L-1,N-n_1}} \mathbf{P}(\mathbf{n}) = \frac{1}{Z_{L,N}} \sum_{\mathbf{n}' \in \Omega_{L-1,N-n_1}} \prod_{\ell=1}^{L} f(n_\ell)$$
(2.7)

ここで, n' はサイト番号 1 以外の L - 1 個のサイト上の粒子配置を表わす.1 サイト相関関数を $p(n_1)$ とすると, (2.2) の右辺は分配関数の定義式 (2.4) 1 行目の式より

$$p(n) = \frac{f(n)}{Z_{L,N}} Z_{L-1,N-n}.$$
(2.8)

ここで,いまどのサイトに着目しても1サイト相関関数は同様に成り立つので,着目するサイト1上の粒子数 n₁をサイト番号の添え字を除いて n と書いた.この1サイト相関関数の両辺に対して n の和をとると,分配関数 Z_{L,N} について以下の式が得られる.

$$Z_{L,N} = \sum_{n=0}^{N} f(n) Z_{L-1,N-n}, \qquad L \ge 2.$$
(2.9)

また,L = 1のときは,1つのサイト上にN粒子全てが配置するので,

$$Z_{1,N} = f(N) (2.10)$$

である.

次に,分配関数 $Z_{L,N}$ とサイトウェイト関数 f(n) に対して母関数を定義する.分配 関数の母関数を $\widehat{Z_L}(\xi)$,サイトウェイト関数の母関数を $\widehat{f}(\xi)$ とするとそれぞれ,

$$\widehat{Z_L}(\xi) = \sum_{N=0}^{\infty} Z_{L,N} \xi^N, \qquad (2.11)$$

$$\widehat{f}(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} f(n)\xi^n, \qquad (2.12)$$

となる.(2.11)に(2.9)を代入すると,母関数 $\widehat{Z_L}(\xi)$ の漸化式が得られる.

$$\widehat{Z}_{L}(\xi) = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{N} f(n) Z_{L-1,N-n} \xi^{N}
= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{N-n=0}^{\infty} f(n) Z_{L-1,N-n} \xi^{N}
= \sum_{n=0}^{\infty} f(n) \xi^{n} \sum_{N'=0}^{\infty} Z_{L-1,N'} \xi^{N'}
= \widehat{f}(\xi) \widehat{Z_{L-1}}(\xi) .$$
(2.13)

1行目から2行目で和の交換を行い、2行目から3行目にかけて変数変換 (N - n = N') を行った.

同様に , (2.10) より $\widehat{Z_1}(\xi) = \widehat{f}(\xi)$ が得られるので , 漸化式 (2.13) の解は

$$\widehat{Z_L}(\xi) = \left(\widehat{f}(\xi)\right)^L \,. \tag{2.14}$$

一方, (2.12) にサイトウェイト関数 f(n) を代入すると

$$\widehat{f}(\xi) = f(0) + f(1)\xi + \sum_{n=2}^{\infty} \frac{f(1)^n}{f(0)^{n-1}} (1-p)^{n-1} \xi^n
= f(0) + f(1)\xi + \frac{f(1)^2(1-p)\xi^2}{f(0)} \left(1 - \frac{f(1)}{f(0)} (1-p)\xi\right)^{-1}
= \frac{f(0) (f(0) + f(1)p\xi)}{f(0) - f(1)(1-p)\xi}.$$
(2.15)

(2.15) を (2.14) に代入すると,以下のように計算できる.

$$\begin{aligned} \widehat{Z_L}(\xi) &= f(0)^L \left(\frac{f(0) + f(1)p\xi}{f(0) - f(1)(1 - p)\xi} \right)^L \\ &= f(0)^L \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-L)_j}{(1)_j} \left(\frac{-f(1)\xi/f(0)}{1 - f(1)(1 - p)\xi/f(0)} \right)^j \\ &= f(0)^L \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{i=0}^{\infty} \frac{(-L)_j(j)_i}{(1)_j(1)_i} (-1)^j (1 - p)^i \left(\frac{f(1)}{f(0)} \right)^{i+j} \xi^{i+j} \\ &= f(0)^L \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{N-j=0}^{\infty} \frac{(-L)_j(j)_{N-j}}{(1)_j(1)_{N-j}} (-1)^j (1 - p)^{N-j} \left(\frac{f(1)}{f(0)} \right)^N \xi^N. \end{aligned}$$

3 行目から 4 行目にかけては i + j = N と引数の置き換えを行った.ここで,ポッホハンマー記号の関係式,

$$(a)_{\ell-m} = \frac{a(a+1)\cdots(a+\ell-1)}{(a+\ell-m)(a+\ell-m+1)\cdots(a+\ell-1)} \\ = \frac{(-1)^m(a)_\ell}{(1-a-\ell)_m}$$
(2.16)

を用いると、

$$\widehat{Z_L}(\xi) = \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{N=j}^{\infty} f(0)^{L-N} f(1)^N \frac{(-L)_j (-N)_j}{(1)_j} \frac{(-1)^j (j)_N}{(1)_N (1-j-N)_j} (1-p)^{N-j} \xi^N.$$

更に,和の順序を交換すると,

$$\widehat{Z_L}(\xi) = \sum_{N=0}^{\infty} f(0)^{L-N} f(1)^N (1-p)^N \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-L)_j (-N)_j}{(1)_j} \frac{(-1)^j (j)_N}{(1)_N (1-j-N)_j} \left(\frac{1}{1-p}\right)^j \xi^N,$$
(2.17)

ここで,ポッホパンマー記号の定義 $(-N)_{\ell} = (-N)(-N+1)\cdots(-N+\ell-1)$ より, $\ell = N+1$ 以上で (2.17)の N に関する和の各項がゼロとなるので,無限級数の形で 書いた.

ここで,次のポッホハンマー記号の公式,

$$(1 - j - N)_{j} = (-1)^{j} (N)_{j},$$

$$(j)_{N} = \frac{(j + N - 1)!}{(j - 1)!}$$

$$= \frac{(N - 1)!}{(j - 1)!} \frac{(N + j - 1)!}{(N - 1)!}$$

$$= \frac{j}{N} \frac{(1)_{N} (N)_{j}}{(1)_{j}}$$

より,

$$\frac{(-1)^j(j)_N}{(1-j-N)_j(1)_N} = \frac{j}{N} \frac{1}{(1)_j}.$$

これを (2.17) の右辺に用いると,

$$\widehat{Z}_{L}(\xi) = \sum_{N=0}^{\infty} f(0)^{L-N} f(1)^{N} (1-p)^{N} \left\{ \sum_{j=0}^{\infty} \frac{j}{N} \frac{(-L)_{j}(-N)_{j}}{(1)_{j}(1)_{j}} \left(\frac{1}{1-p}\right)^{j} \right\} \xi^{N} \quad (2.18)$$

さらにポッホハンマーの公式 $(a+1)_n - (a)_n = n(a)_n/a$ より,以下のようにガウスの超幾何関数を用いて書き直すことができる.

$$\sum_{j=0}^{\infty} \frac{j}{N} \frac{(-L)_j (-N)_j}{(1)_j (1)_j} \left(\frac{1}{1-p}\right)^j = -\sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-L)_j (-N)_j}{(1)_j (1)_j} \left\{ (1-N)_j - (N)_j \right\} \left(\frac{1}{1-p}\right)^j \\ = -F(-L, 1-N; 1; 1/(1-p)) \\ +F(-L, -N; 1; 1/(1-p)).$$
(2.19)

この右辺に対して次のガウスの超幾何関数に対する漸化式を用いる [5].

$$\alpha z F(\alpha + 1, \beta + 1; \gamma + 1; z) = \gamma \Big\{ F(\alpha, \beta + 1; \gamma; z) - F(\alpha, \beta; \gamma; z) \Big\}$$
(2.20)

その結果,

$$\widehat{Z_L}(\xi) = \sum_{N=0}^{\infty} \left\{ f(0)^{L-N} f(1)^N (1-p)^{N-1} LF(1-L,1-N;2;1/(1-p)) \right\} \xi^N \quad (2.21)$$

となり, (2.11) と比較して (2.4) が得られる.

2.3 平均速度

TASEP 粒子の平均速度は,分布関数(2.2)とホップ確率 p を用いて,期待値の定 義から次のように定義される.

$$\mathbf{E}_{L,N}[V_j] = p \mathbf{E}_{L,N}[\mathbf{1}(n(j) \ge 1)]$$

= $p \sum_{\mathbf{n} \in \Omega_{L,N}} \mathbf{1}(n(j) \ge 1) \mathbf{P}_{L,N}(\mathbf{n}),$ (2.22)

ここで $\mathbf{E}_{L,N}[V_j]$ は TASEP の j 番目の粒子速度の期待値を表わす.また $\mathbf{1}(\omega)$ は指示 関数で,事象 ω が起これば 1 を,それ以外は 0 を与える関数である.(2.22) に分布 関数の定義式 (2.2) を用いると,TASEP 粒子の平均速度は次のように分配関数の比 の形で与えられる.

$$\mathbf{E}_{L,N}[V] = \frac{\sum_{n=0}^{N-1} (-1)^{N+1-n} Z_{L,n}}{Z_{L,N}} \\ = \frac{p}{L} \frac{F(1-L,1-N;1;1/(1-p))}{F(1-L,1-N;2;1/(1-p))} \\ = -\frac{1-p}{L} \frac{F(L,N;1;1/(1-p))}{F(L+1,N+1;2;1/(1-p))}.$$
(2.23)

右辺3行目は分配関数を超幾何関数表示にした.ここで, TASEP のシステムサイズ は空きサイト数 N と粒子の配置しているサイト数 L の和より $K \equiv L + N$ であるこ とから, TASEP の粒子密度は次式で与えられる.

$$\rho = \frac{L}{L+N} = \frac{L}{K}.$$
(2.24)

TASEP 粒子の平均流量 $J_{L,N}$ は平均速度 (2.23) と粒子密度 ρ との積で定義される.

$$J_{L,N} = \rho \mathbf{E}_{L,N}[V]. \tag{2.25}$$

図 2.1 は基本図と呼ばれる密度対流量のグラフである.さらに,密度 $\rho = L/(L+N)$ 一定の下, $K \rightarrow \infty$ の極限として,金井らは TASEP の平均速度の熱力学的極限を 与えた [3].

$$\lim_{\substack{L \to \infty, N \to \infty; \\ \rho = \text{const.}}} \mathbf{E}_{L,N}[V] = \frac{1 - \sqrt{1 - 4p\rho(1 - \rho)}}{2\rho}, \quad 0 \le \rho, p \le 1.$$
(2.26)



図 2.1: 基本図.実線は, K = 20, p = 0.2 とし, 密度 ρ に対して流量 $J_{L,N}$ をプロットした.破線は、熱力学的極限 (2.26) で, p = 0.2 としたときの流量をプロットした.両者は良く一致している.特に $\rho \simeq 0$, $\rho \simeq 1.0$ では両者の差はとても小さい.

第3章 TASEPの速度相関

この章では TASEP 粒子の速度相関について扱う.

3.1 速度相関関数

平均速度の定義式(2.23)を拡張して, $k(1 \le k \le L)$ 粒子の速度の積の期待値として,k粒子速度相関関数を定義する[4].着目する粒子を $1 \le j_1 < j_2 < \cdots < j_k \le L$ と順番付けし, j_ℓ 番目の粒子の速度を V_{j_ℓ} とする.このときk粒子速度相関関数を次のように定義する.

$$F_{L,N}(\{V_{j_{\ell}}\}_{\ell=1}^{k}) = \mathbf{E}_{L,N}\left[\prod_{\ell=1}^{k} V_{j_{\ell}}\right]$$
$$= p^{k} \sum_{\mathbf{n} \in \Omega_{L,N}} \prod_{\ell=1}^{k} \mathbf{1}(n(j_{\ell}) \ge 1) \mathbf{P}_{L,N}(\mathbf{n}).$$
(3.1)

ここで,分布関数がサイトウェイト関数の積で与えられているため,(2.2)を用いて 次式のように書き換えられる.

$$F_{L,N}(\{V_{j_{\ell}}\}_{\ell=1}^{k})$$

$$= \frac{p^{k}}{Z_{L,N}} \sum_{n(1)=0}^{N} \sum_{n(2)=0}^{N} \cdots \sum_{n(L)=0}^{N} \prod_{\ell=1}^{k} \mathbf{1}(n(j_{\ell}) \ge 1) \prod_{j=1}^{L} f(n(j)) \mathbf{1}\left(\sum_{j=1}^{L} n(j) = N\right)$$

$$= \frac{p^{k}}{Z_{L,N}} \prod_{j\in\mathbf{I}_{L}\setminus\mathbf{J}_{k}} \sum_{n(j)=0}^{N} f(n(j)) \prod_{\ell\in\mathbf{J}_{k}} \sum_{n(\ell)=1}^{N} f(n(\ell)) \mathbf{1}\left(\sum_{i=1}^{L} n(i) = N\right)$$

$$= \frac{p^{k}}{Z_{L,N}} \prod_{j\in\mathbf{I}_{L}\setminus\mathbf{J}_{k}} \sum_{n(j)=0}^{N} f(n(j)) \prod_{\ell\in\mathbf{J}_{k}} \left(\sum_{n(\ell)=0}^{N} f(n(\ell)) - f(0)\right) \mathbf{1}\left(\sum_{i=1}^{L} n(i) = N\right),$$
(3.2)

 $I_L = \{1, 2, ..., L\}$ は *L* 個の粒子の番号からなる集合 . $J_k = \{j_1, j_2, ..., j_k\}$ は着目す る *k* 個の粒子の粒子番号からなる集合である . 右辺 2 行目 , 3 行目の引数 *j* の積は *L* 個の粒子のうち着目する粒子 *k* 個を除いて出来る集合の要素に渡る積を意味する . 次に (3.2) の 3 行目の式に対して , 以下のように二項展開を行う .

$$\prod_{\ell \in \mathbf{J}_k} \left(\sum_{n(\ell)=0}^N f(n(\ell)) - f(0) \right) = \sum_{\mathbf{K} \subset \mathbf{J}_k} (-f(0))^{|\mathbf{J}_k \setminus \mathbf{K}|} \prod_{\ell \in \mathbf{K}} \sum_{n(\ell)=0}^N f(n(\ell)) .$$
(3.3)

ここで,右辺の先頭の和は集合 J_k の部分集合 K すべてに渡ってとる. $|J_k \setminus K|$ は J_k の中の K の補集合の要素の数である.また $I_L = (I_L \setminus J_k) \cup K \cup (J_k \setminus K)$ であり, $i \in J_k \setminus K$ より n(i) = 0 であるため,サイトウェイト関数 f(0)は積の形にまとめる ことができる.したがって,(3.2)の指示関数の引数部分について,

$$\sum_{i=1}^L n(i) = \sum_{i \in (\mathbf{I}_L ackslash \mathbf{J}_k) \cup \mathbf{K}} n(i)$$
 ,

と書き換えられる.さらにサイトウェイト関数の定義 (2.3) より f(0) = 1 を代入すると, 速度相関関数 (3.2) は

$$F_{L,N}(\{V_{j_{\ell}}\}_{\ell=1}^{k})$$

$$= \frac{p^{k}}{Z_{L,N}} \sum_{\mathbf{K}\in\mathbf{J}_{k}} (-1)^{|\mathbf{J}_{k}\setminus\mathbf{K}|} \prod_{j\in\mathbf{I}_{L}\setminus\mathbf{J}_{k}} \sum_{n(j)=0}^{N} f(n(j)) \prod_{\ell\in\mathbf{K}} \sum_{n(\ell)=0}^{N} f(n(\ell)) \mathbf{1} \left(\sum_{i\in(\mathbf{I}_{L}\setminus\mathbf{J}_{k})\cup\mathbf{K}} n(i)=N\right)$$

$$= \frac{p^{k}}{Z_{L,N}} \sum_{\mathbf{K}\in\mathbf{J}_{k}} (-1)^{|\mathbf{J}_{k}\setminus\mathbf{K}|} \prod_{i\in(\mathbf{I}_{L}\setminus\mathbf{J}_{k})\cup\mathbf{K}} \sum_{n(i)=0}^{N} f(n(i)) \mathbf{1} \left(\sum_{i\in(\mathbf{I}_{L}\setminus\mathbf{J}_{k})\cup\mathbf{K}} n(i)=N\right).$$
(3.4)

 $|\mathbf{J}_k| = k$ より, $|\mathbf{J}_k \setminus \mathbf{K}| = s(0 \le s \le k)$ とすると, $|\mathbf{K}| = k - s$ であり, $|(\mathbf{I}_L \setminus \mathbf{J}_k) \cup \mathbf{K}| = |\mathbf{I}_L \setminus \mathbf{J}_k| + |\mathbf{K}| = (L - k) + (k - s) = L - s$. したがって, 以下のように計算できる.

$$\prod_{i \in (\mathbf{I}_L \setminus \mathbf{J}_k) \cup \mathbf{K}} \sum_{n(i)=0}^N f(n(i)) \mathbf{1} \left(\sum_{i \in (\mathbf{I}_L \setminus \mathbf{J}_k) \cup \mathbf{K}} n(i) = N \right) = \prod_{p=1}^{L-s} \sum_{n(p)=0}^N f(n(p)) \mathbf{1} \left(\sum_{p=1}^{L-s} n(p) = N \right)$$
$$= \sum_{\mathbf{n} \in \Omega_{L-s,N}} \prod_{p=1}^{L-s} f(n(p))$$
$$= Z_{L-s,N}.$$

集合 J_k から区別できる s 個の部分集合 K をとりだす組み合わせは $\binom{k}{s}$, $0 \le s \le k$ であるから, (3.4) は $\{p^k/Z_{L,N}\} \sum_{s=0}^k (-1)^s \binom{k}{s} Z_{L-s,N}$ となる.この結果は, TASEP 速度相関は粒子配置 J_k = $\{j_1, j_2, \cdots, j_k\}$ には依らず,着目する粒子数 k にのみ依存 することを示している.この特別な性質は ZRP の定常状態の分布関数が (2.2) のように積の形で与えられており,サイトウェイト関数 f(n) が (2.3) のようにシステム サイズ L と粒子数 N に依存しないためである.結果を次のように公式としてまと める.

$$F_{L,N}(k) \equiv F_{L,N}(\{V_{j_{\ell}}\}_{\ell=1}^{k})$$

$$= \frac{p^{k}}{Z_{L,N}} \sum_{s=0}^{k} (-1)^{s} {k \choose s} Z_{L-s,N}$$

$$= \frac{p^{k}}{LF(1-L,1-N;2;1/(1-p))}$$

$$\times \sum_{s=0}^{k} (-1)^{s} (L-s) {k \choose s} F\left(1-L+s,1-N;2;\frac{1}{1-p}\right)$$

$$= \frac{p^{k}}{LF(L+1,N+1;2;1/(1-p))}$$

$$\times \sum_{s=0}^{k} (L-s) {k \choose s} \left(\frac{1-p}{p}\right)^{s} F\left(L-s+1,N+1;2;\frac{1}{1-p}\right).$$
(3.5)

2 行目から 3 行目の式変形にはクンマー変換 (2.6) を用いた.この結果は $k \ge 2$ で, $F_{L,N}(k) \ne (F_{L,N}(1))^k$ ということを主張している.つまり,有限系では粒子速度は 相関を持っている.

3.1.1 平均速度

速度相関関数 (3.5) に k = 1 を代入する.

$$\mathbf{E}_{L,N}[V] = F_{L,N}(1) = \frac{p}{Z_{L,N}}(Z_{L,N} - Z_{L-1,N})$$

= $p \frac{LF(1-L, 1-N; 2; 1/(1-p)) - (L-1)F(2-L, 1-N; 2; 1/(1-p))}{LF(1-L, 1-N; 2; 1/(1-p))}$
= $\frac{LpF(L+1, N+1; 2; 1/(1-p)) + (L-1)(1-p)F(L, N+1; 2; 1/(1-p))}{LF(L+1, N+1; 2; 1/(1-p))}.$
(3.6)

ここでは, (3.6)の4行目の式が, 平均速度(3.6)と等しいことを示す.まず初めに, (3.6)の分子を以下のように書き換える.

$$-(1-p)\left[LF\left(L+1,N+1;2;\frac{1}{1-p}\right) - \frac{L}{1-p}F\left(L+1,N+1;2;\frac{1}{1-p}\right) - (L-1)F\left(L,N+1;2;\frac{1}{1-p}\right)\right].$$
(3.7)

ここで,ガウスの超幾何関数の漸化式(2.20)を(3.7)の第2項目に用いると,(3.7)は,

$$-(1-p)\left[LF\left(L+1,N+1;2;\frac{1}{1-p}\right) - F\left(L,N+1;1;\frac{1}{1-p}\right) + F\left(L,N;1;\frac{1}{1-p}\right) - (L-1)F\left(L,N+1;2;\frac{1}{1-p}\right)\right].$$
 (3.8)

さらに,以下のガウスの超幾何関数の漸化式[5]

$$(\gamma - \alpha - 1)F(\alpha, \beta; \gamma; z) + \alpha F(\alpha + 1, \beta; \gamma; z) = (\gamma - 1)F(\alpha, \beta; \gamma - 1; z)$$

を(3.8)の第1項と4項に用いると、これらの和は

$$LF\left(L+1, N+1; 2; \frac{1}{1-p}\right) - (L-1)F\left(L, N+1; 2; \frac{1}{1-p}\right) = F\left(L, N+1; 1; \frac{1}{1-p}\right),$$

となり,(3.8)の第2項目と打ち消し合う.よって(2.20)の第2項目だけが残るため, (3.6)の4行目の表式と(2.23)は等しいことが示せた.

3.2 速度共分散

ここでは, TASEP 粒子の速度相関を特徴付けるため, 2.1 節の速度相関関数を用 いて速度共分散を計算した結果を示す.着目する2つの粒子の速度をそれぞれ // , // とすると,速度共分散 Cov_{L,N}[V,V'] は定義より

$$\operatorname{Cov}_{L,N}[V,V'] = \mathbf{E}_{L,N}[VV'] - \mathbf{E}_{L,N}[V]^2 .$$
(3.9)

(3.5)より, K = 2 o とき,

$$\mathbf{E}_{L,N}[VV'] = F_{L,N}(2) = \frac{p^2}{Z_{L,N}}(Z_{L,N} - 2Z_{L-1,N} + Z_{L-2,N}).$$
(3.10)

これを用いて,速度共分散はつぎのように計算できる.

$$\operatorname{Cov}_{L,N}[V,V'] = p^2 \left\{ \frac{Z_{L-2,N}}{Z_{L,N}} - \left(\frac{Z_{L-1,N}}{Z_{L,N}}\right)^2 \right\}$$
(3.11)

ガウスの超幾何関数による分配関数の表記 (2.4)を用いると,以下のように書き換えることができる.

$$Cov_{L,N}[V,V'] = p^{2} \left\{ \frac{(L-2)F(3-L,1-N;2;1/(1-p))}{LF(1-L,1-N;2;1/(1-p))} - \left(\frac{(L-1)F(2-L,1-N;2;1/(1-p))}{LF(1-L,1-N;2;1/(1-p))}\right)^{2} \right\}$$

$$= (1-p)^{2} \left\{ \frac{(L-2)F(L-1,N+1;2;1/(1-p))}{LF(L+1,N+1;2;1/(1-p))} - \left(\frac{(L-1)F(L,N+1;2;1/(1-p))}{LF(L+1,N+1;2;1/(1-p))}\right)^{2} \right\}.$$
 (3.12)

更に,ガウスの超幾何関数の漸化式 [5]

$$\alpha(1-z)F(\alpha+1,\beta;\gamma;z) + \left[\gamma - 2\alpha + (\alpha-\beta)z\right]$$

× $F(\alpha,\beta;\gamma;z) + (\alpha-\gamma)F(\alpha-1,\beta;\gamma;z) = 0$

を (3.12) に用いる.計算の結果,以下のように書き換えることができる.

$$\operatorname{Cov}_{L,N}[V,V'] = (1-p)^2 \left[\frac{1}{1-p} - 1 + \left(1 - \frac{L-N-1}{2(L-1)} \frac{1}{1-p} \right)^2 - \left\{ Y_{L,N}(p) - \left(1 - \frac{L-N-1}{2(L-1)} \frac{1}{1-p} \right) \right\}^2 \right], \quad (3.13)$$

ここで,

•

$$Y_{L,N}(p) \equiv \frac{(L-1)F(L,N+1;2;1/(1-p))}{LF(L+1,N+1;2;1/(1-p))}.$$
(3.14)

図 3.1 は速度共分散の数値シミュレーションを行い,粒子密度に対して値をプロットした図である.理論式(3.12)とシミュレーションの一致を見ることができる.また,速度共分散は全密度に対して負の値を持っていることが分かる.つまり,粒子同士は互いの進行を妨げる働きをしている.



図 3.1: 密度対速度共分散の図:システムサイズ K = 100,ホップ確率 p = 0.5.実線は厳密解 (3.12),点は数値シミュレーションの結果をプロットしている.各密度において,総ステップ数 10^4 のうち,後半の 8×10^3 ステップのデータを用いた.また,プロットしたデータは 10^4 回ほど試行を行った平均値である.

第4章 速度の漸近的な独立性

この章では速度共分散の熱力学的極限についての結果を述べる.

4.1 Riccatiの微分方程式

はじめに,平均速度 (2.23) をホップ確率 pの関数として以下のように書くことに する.

$$v_{L,N}(p) = \mathbf{E}_{L,N}[V]. \tag{4.1}$$

金井らは TASEP の平均速度が Riccati の微分方程式の解であることを示した [3].

$$\frac{dv_{L,N}(p)}{dp} + \frac{L}{p(1-p)}v_{L,N}(p)^2 - \frac{L+N}{p(1-p)}v_{L,N}(p) + \frac{N}{1-p} = 0, \qquad (4.2)$$

この方程式から平均速度の熱力学的極限 (2.26) が得られる.その計算は 4.3 節で説 明する.

一方,本研究では, (3.14)で定義した $Y_{L,N}(p)$ が以下の形の Riccati の微分方程式の解であることを示した.

$$\frac{dY_{L,N}(p)}{dp} + \frac{L-1}{p} \frac{v_{L-1,N}(p)}{v_{L,N}(p)} Y_{L,N}(p)^{2} + \left[\frac{d}{dp} \log \frac{v_{L-1,N}(p)}{v_{L,N}(p)} + \frac{p^{2} + (2L-1)p - (L+N-1)}{p(1-p)}\right] Y_{L,N}(p) - \frac{L-1}{1-p} \frac{v_{L,N}(p)}{v_{L-1,N}(p)} = 0.$$
(4.3)

ここで,平均速度 $v_{L,N}(p)$ が満たす Riccati の微分方程式 (4.2) より, (4.3) 式右辺 3 項目の平均速度の対数微分は

$$\frac{d}{dp}\log\frac{v_{L-1,N}(p)}{v_{L,N}(p)} = \frac{dv_{L-1,N}(p)/dp}{v_{L-1,N}(p)} - \frac{dv_{L,N}(p)/dp}{v_{L,N}(p)}
= -\frac{1}{p(1-p)}\left[(L-1)v_{L-1,N}(p) - Lv_{L,N}(p) + 1 + Np\left(\frac{1}{v_{L-1,N}(p)} - \frac{1}{v_{L,N}(p)}\right)\right],$$
(4.4)

となる.次節では $Y_{L,N}(p)$ が満たす Riccati の微分方程式 (4.3)の導出について説明 する.

4.2 Riccatiの微分方程式の導出

平均速度 (2.23) より, Y_{L.N}(p) の定義式 (3.14) は以下のように書き換えられる.

$$\frac{v_{L-1,N}(p)}{v_{L,N}(p)}Y_{L,N}(p) = \frac{F(L-1,N;1,z)}{F(L,N;1,z)},$$
(4.5)

ここで, z = 1/(1-p)とした.ガウスの超幾何関数に対する微分公式 [5] より, (4.5) の右辺分子のガウスの超幾何関数は

$$\frac{d}{dz}\left[\frac{(1-z)^{L+N-1}}{z^{L-1}}F(L,N;1;z)\right] = (1-L)\frac{(1-z)^{L+N-2}}{z^L}F(L-1,N;1;z).$$

これを (4.5) に用いると, (4.5) は

$$\frac{v_{L,N}(p)}{v_{L-1,N}(p)}Y_{L,N}(p) = \frac{z(1-z)}{1-L}\frac{1}{w(z)}\frac{dw(z)}{dz},$$
(4.6)

と書き換えられる.ここで,

$$w(z) = \frac{(1-z)^{L+N-1}}{z^{L-1}} F(L,N;1;z).$$
(4.7)

いま,3つの確定特異点を a_i ,i = 1, 2, 3とし,それぞれの確定特異点における解の指数を λ_i , λ_i' とする.このとき,一般的な超幾何微分方程式は以下のように与えられる.

$$\frac{du(z)}{dz^2} + \sum_{i=1}^3 \frac{1 - \lambda_i - \lambda'_i}{z - a_i} \frac{du(z)}{dz} + \sum_{i=1}^3 \frac{\lambda_i \lambda'_i}{z - a_i} \prod_{1 \le j \le 3; j \ne i} (a_i - a_j) \frac{u(z)}{(z - a_1)(z - a_2)(z - a_3)} = 0, \quad (4.8)$$

ただし,指数 λ_i , λ'_i は Fuchsの関係式 $\sum_{i=1}^3 (\lambda_i + \lambda'_i) = 1$ を満たすとする.このとき, (4.8)の解は次のように表わされる.

$$u(z) = P \left\{ \begin{array}{ccc} a_1 & a_2 & a_3 \\ \lambda_1 & \lambda_2 & \lambda_3 & z \\ \lambda'_1 & \lambda'_2 & \lambda'_3 \end{array} \right\} .$$

$$(4.9)$$

これを Riemann の *P* 関数という [5]. その特別な場合として,ガウスの超幾何関数 (2.5) は以下のように与えられる.

$$F(\alpha,\beta;\gamma;z) = P \left\{ \begin{array}{ccc} 0 & 1 & \infty \\ 0 & 0 & \alpha & z \\ 1 - \gamma & \gamma - \alpha - \beta & \beta \end{array} \right\}.$$
 (4.10)

一般に,次のような関係式が成り立つ.

$$P\left\{\begin{array}{ccc}a_1 & a_2 & a_3\\\lambda_1 & \lambda_2 & \lambda_3 & z\\\lambda_1' & \lambda_2' & \lambda_3'\end{array}\right\} = P\left\{\begin{array}{ccc}a_2 & a_1 & a_3\\\lambda_2 & \lambda_1 & \lambda_3 & z\\\lambda_2' & \lambda_1' & \lambda_3'\end{array}\right\},\qquad(4.11)$$

$$(z-a_1)^k P \left\{ \begin{array}{ccc} a_1 & a_2 & \infty \\ \lambda_1 & \lambda_2 & \lambda_3 & z \\ \lambda'_1 & \lambda'_2 & \lambda'_3 \end{array} \right\} = P \left\{ \begin{array}{ccc} a_1 & a_2 & \infty \\ \lambda_1 + k & \lambda_2 & \lambda_3 - k & z \\ \lambda'_1 + k & \lambda'_2 & \lambda'_3 - k \end{array} \right\}.$$
(4.12)

(4.10)より, $\omega(z)$ は

$$w(z) = (-1)^{L+N-1} (z-1)^{L+N-1} z^{1-L} P \left\{ \begin{array}{cccc} 0 & 1 & \infty \\ 0 & 0 & L & z \\ 0 & 1-L-N & N \end{array} \right\}.$$

となるので, (4.11) と (4.12) を用いて,

$$w(z) = P \left\{ \begin{array}{ccc} 0 & 1 & \infty \\ 1 - L & L + N - 1 & L - N & z \\ 1 - L & 0 & 0 \end{array} \right\} .$$
(4.13)

したがって (4.8) より, $\omega(z)$ は以下の微分方程式の解であることが分かる.

$$\frac{d^2w(z)}{dz^2} - \frac{(L-N+1)z - 2L+1}{(1-z)z}\frac{dw(z)}{dz} + \frac{(L-1)^2}{(1-z)z^2}w(z) = 0.$$
(4.14)

(4.14)のdw(z)/dzに(4.6)を代入すると, $Y_{L,N}(p)$ についての一階の微分方程式が得られ,簡単な計算の後(4.3)が得られる.

4.3 熱力学的極限

次に,金井らが平均速度の熱力学的極限を計算した手法に従い,平均速度 $v_{L,N}(p)$, $v_{L-1,N}(p) \ge Y_{L,N}(p)$ に対して,システムサイズの逆数,1/K, (K = L + N)でべき 展開を行う.

$$v_{L,N}(p) = v_0 + v_1 \frac{1}{K} + v_2 \frac{1}{K^2} + \cdots,$$
 (4.15)

$$v_{L-1,N}(p) = v'_0 + v'_1 \frac{1}{K} + v'_2 \frac{1}{K^2} + \cdots,$$
 (4.16)

$$Y_{L,N}(p) = Y_0 + Y_1 \frac{1}{K} + Y_2 \frac{1}{K^2} + \cdots, \qquad (4.17)$$

ここで,展開係数 $v_i, v'_i, Y_i, i = 0, 1, 2, \cdots$ は $p \ge \rho$ の関数とする. (4.3) に (4.15) を 代入し, (4.3) に対して $L \rightarrow L - 1$ と変形した方程式に (4.16) を代入する. そして熱 力学的極限 , $\rho = const.$, $K \to \infty$ をとると , (4.15) と (4.16) の初項は以下のように 計算される [3]

$$v_0 = v'_0 = \frac{1 - \sqrt{1 - 4p\rho(1 - \rho)}}{2\rho}.$$
(4.18)

この結果が,平均速度の熱力学的極限 (2.26) である.これと同様に, (4.4) を用いて 書き換えをした 4.3) に (4.15)-(4.17) を代入し,熱力学的極限 ($\rho = const., K \to \infty$) をとると, (4.2) は Y_0 についての 2 次方程式となる.

$$\rho(1-p)Y_0^2 - (1-2p\rho)Y_0 - \rho p = 0$$

これを解くと,

$$Y_0 = \lim_{\substack{K \to \infty; \\ \rho = \text{const.}}} Y_{L,N}(p) = \frac{(1 - 2\rho p) \pm \sqrt{1 - 4\rho p (1 - \rho)}}{2\rho (1 - p)}.$$
 (4.19)

一方,速度共分散(3.13)に対しても同様の極限をとると,

$$\lim_{\substack{K \to \infty; \\ \rho = \text{const.}}} \text{Cov}_{L,N}[V, V'] = p(1-p) + \left[\frac{1-2\rho p}{2\rho}\right]^2 - \left[(1-p)Y_0 - \left(\frac{1-2\rho p}{2\rho}\right)\right]^2.$$
(4.20)

これに (4.19) を代入すると, 速度共分散の熱力学的極限は

$$\lim_{\substack{K \to \infty; \\ \rho = \text{const.}}} \text{Cov}_{L,N}[V, V'] = p(1-p) + \left[\frac{1-2\rho p}{2\rho}\right]^2 - \frac{1-4\rho p(1-\rho)}{4\rho^2}$$
$$= 0, \tag{4.21}$$

となる.したがって,熱力学的極限の下では速度共分散は漸近的にゼロになり,粒子速度は互いに独立な確率変数と見なすことができる.

図 4.1 はシステムサイズを大きくしていったときの速度共分散の値を数値シミュレーションした結果である.数値シミュレーションでは,ホップ確率p = 0.5,密度 $\rho = 0.6$ とし, $L = \rho K$, $N = (1 - \rho)K$ として, K を 100 から 150 ずつ 1000 まで増 やした結果をプロットした.また,実線はこの7点のデータを用いて,1/Kに対する速度共分散の線形フィッティングを行った結果を示している.この直線

$$\operatorname{Cov}_{L,N}[V,V'] \simeq \frac{c(p,\rho)}{K}$$
(4.22)

の傾きは $c(p=0.5,\rho=0.6)=-4\times 10^{-2}$ となった .



図 4.1: システムサイズ K の逆数に対する速度共分散のグラフ.ホップ確率 p = 0.5, 密度 $\rho = 0.6$.シミュレーションは各システムサイズで 3×10^4 ステップ行い,後半の 10^4 ステップのデータを用いた.ドットは試行 10^4 回行った平均値. $K \to \infty$ とすると,速度共分散 $Cov_{L,N}[V,V']$ がゼロに近づくことが見てとれる.

第II部

バクテリアの円運動観察実験

第5章 はじめに

第2部では,バクテリアの集団運動の観察実験の研究についてまとめる.寒天培 地上に接種した枯草菌,*Bacillus subtilis* は培地の寒天濃度と栄養濃度の値によって 5種類のコロニーパターンを示す(図5.1).寒天濃度が8.0[g/l] 以下の柔らかい培地 の場合,成長途中のコロニー内部で*B. subtilis* は活発に動き回る.特に,栄養濃度 と菌密度が共に高い場合,ディスクパターンやリングパターンでは,数匹の個体が まとまってランダムな方向へ集団運動する様子を見ることができる.群れの集団運 動の研究では,自己駆動粒子の移動方向に近接的な相互作用を与えたモデルを用い て*B. subtilis* の集団運動の特徴を再現している[7].数値シミュレーションにより, このモデルでは密度が高く移動方向のノイズが少ない場合に,粒子が一方向に揃っ て集団運動するという結果が得られている.しかし,*B. subtilis* が方向を揃えて集 団運動することを示す定量的な実験結果は得られていない.

本研究では,バクテリア集団の流れについて着目し,観測的に知られている B. subtilis の集団運動を定量的に示すことを目的に実験を行った.実験では菌の体の 厚さ程度の深さの円形プールを寒天培地上に作成し,2次元的な実験系の中で B. subtilis の運動の様子を観察した.その結果,ダイアグラムの領域 C,リングパターン領域において B. subtilis が進行方向を揃えて円運動している様子を動画撮影する ことに成功した.



図 5.1: *B. subtilis* のモルフォロジカルダイアグラム [6]. 横軸は培地の寒天濃度の逆数,縦軸は培地の栄養濃度である.これらの値によって *B. subtilis* は 5 種類のコロニーパターンを示す.

5.1 試料バクテリア, *B. subtilis* について

実験で用いた *B. subtilis* は棒状の体の周囲に幾つも鞭毛を生やした周毛性桿菌と呼ばれる菌である.運動の際にはそれら鞭毛が束になって駆動力を与えている.進行を妨げるものがない水中では,*B. subtilis* は速度約 15[μ m] で直進性の強い運動をすることが知られているが,寒天培地上では表面の凹凸の影響を受けてランダムな方向へ運動する.また,寒天培地など運動しづらい場所では,*B. subtilis* は浸出液を分泌しながらコロニーを広げる.本実験では,*B. subtilis* の運動性を高めるために,*B. subtilis* が分泌した浸出液を粉末にした C₅₃H₉₃N₇O₁₃ (和光純製薬(株))のエタノール溶液を培地に接種して実験を行った.本稿ではこの C₅₃H₉₃N₇O₁₃ のエタノール溶液をサーファクタントと呼ぶことにする.以下では本実験と特に関係する*B. subtilis* の性質について説明する.



図 5.2: B. subtilis のリングパターンのコロニー.

- リングパターンについて本実験では,寒天培地上にリングパターン(図 5.2)のバ クテリアコロニーを発生させ実験系を作成した.リングパターンは寒天濃度 7.0[g/L]から8.0[g/L],栄養濃度が2[g/L]以上の領域で発生する.リングパター ンのコロニー界面は移動と停滞を繰り返しながら形成され,この2種類の相を それぞれマイグレーションフェイズ,コンソリデションフェイズという.マ イグレーションフェイズではコロニー内で菌は活発に運動するが,コンソリデ ションフェイズでは運動性が著しく低下し,界面付近も含めコロニー全域で 菌は活動を停止する.
- 個体の形状について B. subtilis は体長約1 μmから8μmのバクテリアで,栄養条件 によって体長が変化する.寒天培地上では,栄養濃度が低い場合に点状の形態 をとり,栄養濃度が高くなるにつれて細長く成長する.また今回の実験を行っ たリングパターン領域では,コロニーの成長過程によっても体長が変化し,マ イグレーションフェイズの終了時に最も体長が大きくなる.

第2部は以下のような構成になっている.まず第6章では,本実験の手順と,実験 系の作成方法について説明を行う.第7章では,*B. subtilis*の集団運動の観察結果 を報告する.そして第8章では,流体解析ソフトを用いた動画解析の方法について 説明し,第9章で*B. subtilis*の集団運動の速度計測を行った結果について説明する.

第6章 実験方法

この章では,円運動観察を行った寒天培地の作成方法と,培地上に作成した円形 プールの作成法方法を説明する.試料バクテリアは同学科脇田研究室で培養してい るものを提供して頂いた.

6.1 実験全体の流れ

本実験は以下の手順で行う.

- 1. 実験用寒天培地を作成する.
- 2. 菌液を寒天培地上に接種し,恒温恒湿器(IG-42M:ヤマト科学(株))で約15
 時間 *B. subtilis* を培養する.
- 3. マイグレーションフェイズ終了直前に恒温恒湿器からシャーレを取りだし,培 地上に円形プールを作成する.
- 4. 円形プールにコロニー界面が接触するのを確認した後, 観察, 撮影を行う.
- 5. 撮影した動画を流体解析ソフト, Flow-PIV(ライブラリー(株))で解析し, バ クテリア集団の速度計測を行う.

6.2 寒天培地作成方法

ここではバクテリアを増殖させる栄養入り寒天培地の作成方法について説明する.

- 純水に (図 6.1)の分量で,塩化ナトリウムとリン酸水素2カリウム、B. subtilis の栄養分となる Peptone 加えて撹拌したのち,塩酸を滴下して pH = 7.1 に調 整する.出来た溶液と寒天を三角フラスコへ移し、アルミホイルで密閉する.
- 2. 寒天溶液をオートクレイブ (滅菌機) で 121 , 15 分間殺菌処理を施す.余熱が取れた後,寒天溶液をシャーレに 20mL ずつ注ぎ,室温で1時間ほど寒天が固まるのを待つ.
- 3. 寒天が固まった後,培地表面を乾燥させるために 50 で 90 分間乾燥機に入れ, 培地表面の余分な水分を蒸発させる.

 8天表面上、均等に4か所マイクロピペットで 50µL ずつサーファクタントを 接種する.サーファクタントが寒天培地に浸みこんだのを確認後,再び 50 で 30 分間乾燥機に入れ,サーファクタントの溶媒であるエタノールを蒸発さ せる.

薬品名	分量
純水	100mL
塩化ナトリウム	0.5g
リン酸水素2カリウム	0.5g
Peptone	Зg
寒天	0.85g

図 6.1: 寒天培地の材料と分量.

6.3 円形プール作成方法

ここでは,寒天培地上に実験系を作成する方法について説明を行う.本実験では, 寒天培地上にリングパターンを発生させ,コロニーの界面付近に円形プールを作成 した.また,観察中,実験系外部からの菌の流入を防ぐために,実験系の作成は菌 が活発に動いているマイグレーションフェイズの終了直前に行い,観察はコロニー 全体で菌の運動が停止するコンソリデ ションフェイズの間に行った.一度プール に流入した菌は,マイグレーションフェイズやコンソリデ ションフェイズなどの コロニーの性質とは無関係に運動をし続けた.

- マイクロピペットを用いて, 菌液を 30µL ほど寒天培地の中央に点状に接種し, 37, 湿度 90%に設定した恒温恒湿器 (IG-42M:ヤマト科学(株)) に入れて約 15時間菌を培養する.
- リングパターンのマイグレーションフェイズ終了直前に培養機からシャーレを 取り出す.コロニーと寒天培地との界面付近を狙って,薬さじで直径50µmの ガラスビーズを培地に撒く.寒天培地にガラスビーズを撒くと,ビーズの重さ により培地表面がビーズを中心にすり鉢状に窪む(図6.2).その窪みに寒天培 地から浸み出した水が溜まって円環状のプールができる(図6.3).
- 3. 加熱殺菌したシャープペンの先に粘着テープを取り付ける.シャープペンの先 を顕微鏡のレンズの先に固定し,培地表面に慎重に近づけペン先の粘着テープ

でビーズを取り除く (図 6.4). このときペンの先が培地に触れないように注意 する.以上の操作で,最大深さ約1 μ の円上のプールを作成することができる (図 6.5).



図 6.2: ガラスビーズによる培地の窪み.



図 6.3: 寒天培地上に作成した円環状プール (左右反転画像). 寒天濃度 6.0[g/L], 栄 養濃度 0.4[g/L], ビーズサイズ 50[µm]. 画面右上のコロニー先端から菌が流入して いる.



図 6.4: 寒天培地からビーズを取り除く装置.顕微鏡の対物レンズ部分に両面テープ で 0.3mm シャープペンの金具部分を固定している.ペン先には約 0.3[mm] に切った 両面テープを張っており,対物レンズを下げてペン先を培地に近づける.



図 6.5: 寒天培地上に作成した円形プール (左右反転画像). 寒天濃度 8.25[g/L], 栄養 濃度 30[g/L], プールの直径約 42[µm], 最大水深約 1[µm]. リングパターンのマイグ レーションフェイズ終了直前に菌が流入した. 菌はプールの縁に沿って円運動する.

第7章 B. subtilisの集団運動の観察

ここでは, *B. subtilis* の集団運動の観察実験の結果を説明する.観察には位相 差顕微鏡 (Nikon)を用いた.その様子の動画撮影には,ハイスピードカメラ VW-9000(KEYENCE)を用いた.また,本実験では寒天培地底面から見上げるように動 画撮影を行ったため,菌集団の運動方向については,シャーレ底面において時計回 り,反時計回りということを議論している.

7.1 観察結果

この章では,円形プール内の菌密度 $\rho = 0.36, 0.5, 0.72$ の三つの場合について,B. subtilis の集団運動の様子を観察した結果を説明する.また,菌密度 ρ は,プール内を2次元的な空間とし,プールに占める菌の面積比によって定義した.

7.1.1 菌密度が低い場合の集団運動の様子 ($\rho = 0.36$)

プール内の菌密度が低い場合,ほとんどの B. subtilis はプールの縁に沿って時計回りに円運動した(図7.1).プール中央に留まる菌は見られず,プールの縁に沿って運動する集団の内側で,ごく少数の個体が反時計回りに円運動する様子を捉えた. また,10分間の撮影中,プールの縁を沿って運動する集団が進行方向を変えることはなかった.

7.1.2 渋滞が起こる場合の観察結果 ($\rho = 0.5$)

菌密度 $\rho = 0.5$ の場合では, プールの縁に沿って時計回りに集団運動する *B. subtilis* が頻繁に渋滞を起こした (図 7.2). 渋滞が発生すると,後続の菌は以下の 2 つの運動 パターンを見せた.

- 止まっている菌を追い越し,再びプールの縁に沿って時計回りに運動する.
- 渋滞の後方で進行方向を反転させ、縁に沿って運動する集団の内側で、反時計回りの運動を始める。

反時計回りの運動は数秒間継続し,その後縁に沿った時計回りの運動をする集団と 合流して消えてしまった.観察では縁を沿って時計回りに運動する集団が頻繁に渋 滞を起こしたため,反時計回りの運動も頻繁に見られた.



図 7.1: プールの縁に沿って円運動する様子. 菌密度 $\rho = 0.36$. プールの縁から菌は 流出することなく,縁に沿って時計回りに円運動した.



図 7.2: *B. subtilis* 集団の渋滞. 菌密度 $\rho = 0.5$. 菌が培地に引っ掛かり, 矢印の箇所 で渋滞が発生している. その後方で渋滞が起こり,進行方向を逆転させた菌がプールの内側にせり出してきている様子が見てとれる.

7.1.3 高密度の円形プール内での観察結果 ($\rho = 0.72$)

プール内を埋め尽くすように菌がいる場合 (図 7.3) では,プールの縁に沿って時 計回りに運動する集団と,その内側で反時計まわりに運動する集団とが定常的に存 在し,互いに逆向きに流れる菌集団のレーンが形成されている様子を捉えた.レー ンの境界は時間経過とともに揺らいでいる様子が見て取れたが,10分間の観察の間, どちらの向きの流れも,もう一方の流れに吸収されて消えてしまうことはなかった.



図 7.3: 高密度の円形プール. 菌密度 $\rho = 0.72$. 青い円はプールの縁を示す. プールの縁では矢印で示したように時計回りの向きの集団運動が見られた. 一方, 赤い円で囲ったプール中央では,反時計回りの向きの集団運動が見られた.

第8章 集団運動の解析方法

8.1 B. subtilis の速度計測

本研究では流体解析ソフト Flow-PVI(ライブラリー(株))を用いてバクテリア集 団の流れの速度計測を行った.

8.1.1 Particle Image Velocimetry

Particle Image Velocimetry (PIV)とは,水や気体の流れをトレーサー粒子で可 視化した画像に対して粒子の位置情報を計測し,2時刻間での位置の変化から速度 と移動方向を解析する流体画像計測法である.本実験ではトレーサー粒子ではなく, *B. subtilis* そのものの輝度パターンを PIV ソフトを用いて解析し,プール画像を覆 うように置いた2次元格子の各点に対して2時刻の間の輝度パターンの位置変化か ら速度ベクトルを計算した.



図 8.1: PIV 法.本実験では,円形プールを覆うように2次元格子を置いた.そして 各格子点を中心とした,11×11 ピクセルのパターン認識領域を設定した.その認識 領域内の輝度パターンの次のシーンでの移動先を41×41 ピクセルの追跡領域内で探 し出した.右の図のように,パターンの移動先が決定すると,格子点から移動先パ ターンの重心へ速度ベクトルが引かれる.

8.1.2 輝度パターンの追跡方法

バクテリアの追跡には輝度差累積値の逐次棄却法という画像処理アルゴリズムを 用いた.以下ではその方法について説明を行う.

- 1. 輝度パターンを認識する対象領域と移動先候補領域をピクセルごとに分割する.
- 2. 対象領域の小領域(1ピクセル)と対応する候補領域の小領域との輝度差を計 算する.
- 3. 輝度差累積値を計算し、行ごとの計算結果から、対象領域との輝度差累積値の 最小値を与える移動先候補領域を決定する.また、輝度差累積値の最小値から 閾値を算出し、累積値が閾値を超えた候補領域を移動先候補から除外する.
- 4. 全ての行を計算し終える前に候補領域が一つだけしか残らなかった場合,その 候補領域を対象セルの移動先として採用する.
- 5. 全ての行を計算し終えて候補領域が複数個残った場合は,輝度差累積値の最小 値を与える候補領域を移動先として採用する.

この手続きを各時刻,すべての格子点について行い,速度ベクトルの時系列データを得た.

第9章 速度測定結果

この章では速度計測を行った結果を説明する.

9.1 バクテリア集団の円周方向の速度分布図

解析にはフレームレート 30[fps], 10 分間の動画を用いた.円形プール内でのバク テリアの集団運動を定量的に示すために,時計回りの向きを正として,円形プール 平面に対しバクテリアの周方向の速度の大きさを 3D プロットし,周方向の速度の 空間分布図を作成した.図では,時計回りの向きの速度が大きい場所は赤で,反時 計回りの向きの速度が大きい場所は青で示した.以下では,7章で観察結果を説明 した,菌密度 $\rho = 0.36$, 0.5, 0.72 の三つの場合の集団運動についてそれぞれ結果の説 明を行う.



図 9.1: 菌密度が低い場合の速度の空間分布図.密度 $\rho = 0.36$.時計回りの向きを正 とし,値が大きくなるほど赤色で示した.それに対して,反時計回りの運動は値が 大きくなるほど青色で示した.プール全域でバクテリアの集団運動の特徴を捉える ことができた.周方向の平均速度 $6.47[\mu m/s]$ 9.1.1 菌密度が低い場合の速度分布図 (ho=0.36)

観察では, 菌密度が低い場合, ほとんどのバクテリアはプールの縁を時計回りに 円運動する傾向が見てとれた.図9.1では, プールの縁で,時計回りの向きの速度が 一定の大きさの値で分布するという結果が得られ,観察の結果を数値的に捉えるこ とができた.また観察では,時計回りに運動する菌の内側で,少数の個体が反時計 回りの運動をする様子を捉えたが,速度分布図ではプールの中心から距離10[µm]ま での領域で反時計回りの向きの速度が分布しており,プール全域でバクテリアの集 団運動の特徴を捉えることができた.周方向の平均速度は6.47[µm/s]となり,プー ル全体で,時計回りに運動することを定量的に示すことができた.

9.1.2 渋滞が発生した場合の速度分布図 ($\rho = 0.5$)

観察では,菌集団の渋滞が起きると,プールの縁を沿って時計回りに集団運動する後続の菌は以下の二つの運動パターンをとった.

- 止まっている菌を追い越し,再びプールの縁に沿って時計回りに進む.
- 渋滞の後方で移動方向を反転させ、縁に沿って運動する集団の内側を反時計回りに運動する。

図 9.2 においても,プールの縁に沿って時計回りの向きの速度が一定の大きさの値 で分布しており,バクテリア集団の運動を捉えることができた.また,プール中央 付近で,渋滞によって発生した菌の反時計回りの流れを捉えることができた.周方 向の平均速度は 4.25[µm/s].

9.1.3 高密度のプールでの速度分布図 ($\rho = 0.72$)

観察では,菌がプール全体を埋め尽くすような高い菌密度の場合,プールの縁に沿って時計回りに運動する集団と,その内側を反時計回りに運動する集団とのレーン形成が見てとれた.図9.3では,プールの中心から距離約 $12[\mu m]$ の地点を境に反時計回りの速度が分布しており,プールの縁に沿って時計回りに運動をする集団と,その内側を反時計回りに運動する集団とがレーンを形成していることを示すことができた.また,周方向の平均速度は $-0.3[\mu m/s]$ となり,これまでの場合とは異なり,互いに逆向きのバクテリア集団の流れがほぼ同じ大きさの速度でレーンを形成しているという結果を得た.



図 9.2: 渋滞が発生した密度 0.5 のときの速度の空間分布図.密度 $\rho = 0.5$.周方向の平均速度 $4.25[\mu m/s]$. プール中央部分では,渋滞によって反時計回りの集団運動が起きていることが見てとれる.



図 9.3: 高密度での速度の空間分布図.密度 $\rho = 0.72$. プールを埋め尽くすように菌がいる場合,プールの縁を沿う時計回りの集団と,その内側を反時計回りに運動する集団とでレーンが形成される.周方向の平均速度- $0.3[\mu m/s]$.

謝辞

最後になりますが,大学院での研究生活,修士論文をまとめるにあたり,多くの 方に協力をして頂きました.ここに感謝の意を述べたいと思います.

指導教官である香取眞理先生には,学部の卒業研究からこれまでの3年間,研究 のアドバイスや論文の執筆,研究発表の方法などを指導して頂き,多くの事を学ば せて頂きました.また学外のセミナーや勉強会に参加する機会を多く与えて頂き, 充実した大学院生活を送ることができました.そして何より,研究に対する姿勢を 学ばせて頂きました.心より感謝申し上げます.

宗行英朗先生と脇田順一先生には,お忙しい中修士論文の副査を引き受けて頂き ました.感謝申し上げます.

また,脇田先生にはバクテリアの実験で大変お世話になりました.脇田先生がバ クテリア実験のテーマを与えて下さったことで,今回,研究結果を修士論文という 形で報告することが出来ました.お忙しい中詳しく実験の指導していただき,心よ り感謝申し上げます.

香取研究室の多田君,源馬君,高橋君には研究や学生生活のこと,就職活動のことなど,たくさん相談に乗っていただきました.感謝いたします.

最後に,大学受験浪人をしている私を大学院まで行かせてくれた父と,いつも心 配ばかりかけていたのに,黙って見守り続けてくれた母に心から感謝いたします.

参考文献

- [1] M. R. Evans, Braz. J. Phys. **30**, 42 (2000).
- [2] M. R. Evans, T. Hanney, J. Phys. A: Math. Gen. 38, R195 (2005).
- [3] M. Kanai, K. Nishinari, T. Tokihiro, J. Phys. A: Math. Gen. **39**, 9071 (2006).
- [4] Y. Yamada, M. Katori, Phys. Rev. E 84,041141 (2011)
- [5] M. Abramowitz, I. A. Stegun, Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables, (Dover, New York, 1972).
 J. Phys. A: Math. Gen. 26, L679 (1993).
- [6] M . Matsushita , F . Hiramatsu , N . Kobayashi , T . Ozawa , Y . Yamazaki and T . Matsushita , Biofilms 1, 305-317 (2004)
- [7] T. Viscek, A. Czirok, E. Ben-Jacob, I. Cohen and O. Shochet, Phys. Rev. Lett. 75 1226 (1995).