

1-1 ASEPとZRP

交通流の最も簡単なモデルとしてASEP（非対称単純排除過程）が挙げられる。これは並べられたサイトを離散的な道路として、その上を或る一定の確率で、離散的な単位時間に一つだけ先のサイトに粒子が一方方向に進んでいくモデルである。尚、特別に、単位時間に遷移が起こるとき、ホップする先のサイトに元々粒子がいる場合には一意的に粒子はホップしないとする。サイトは排除体積効果の条件を考慮しており、1サイト1粒子しか配位出来ないとしている。

次に解析的な都合によりZRP（ゼロレンジプロセス）モデルを考える。これは並べられたサイト上に原則幾らでも粒子が配位することが出来、尚且つ遷移確率はサイトごとに異なるサイト上の粒子数に依存したもので、一度に複数個の粒子がホップすることを許している。

今、このZRPモデルにおいて、周期境界条件下でLサイト、N粒子の系を考え、遷移確率をサイトに寄らない一定値として一度に一つの粒子しかホップしないとすると、ASEPと同値となる。ASEPのサイト数と粒子数に対応させると、LサイトN粒子のZRPは、(L+N)サイト、L粒子のASEPとなることが分かる。つまり、ZRPのサイトはASEPにおける粒子であり、ZRPの粒子数はASEPにおける粒子が進行方向に対して持っている粒子間サイト数である。

1-2 定常状態におけるASEPの分配関数

具体的にモデルの解析を進めるために、遷移の前後の状態が起こる確率が等しくみなせる定常状態を考えることにする。このとき周期境界条件下のLサイト、N粒子のZRP（L+Nサイト、L粒子のASEP）が或る配置 \vec{n} を実現させる確率

$P(\vec{n})$ は、

$$P(\vec{n}) = \frac{1}{Z_{L,N}} \prod_{i=1}^L f(n_i) \cdots \cdots \quad (1-2-a)$$

とマスター方程式の定常解で表される。 $Z_{L,N}$ は分配関数、 n_i はサイト1上の粒子数、 $f(n_i)$ はシングルサイトウェイトである。尚、 $|\vec{n}| = N$ である。

次に1サイトに注目して、1サイト相関関数を定義する。任意のサイト一つを選択するのでここではサイト上粒子数に下付きの文字を省略し、1サイト上で粒子数 n となる確率 $p(n)$ は、

$$p(n) = \sum_{\vec{n}' \in \Omega_{L-1}} P(\vec{n}') \cdots \cdots \quad (1-2-b)$$

となる。ここで $|\vec{n}'| = N - n$ であり、 Ω_{L-1} は、(L-1)サイト上に(N-n)粒子が配位するすべての場合である。

(1-2-a)、(1-2-b)から、

$$p(n) = \frac{f(n)}{Z_{L,N}} Z_{L-1,N-n} \cdots (1-2-c)$$

となる。ここで、分配関数について、

$$Z_{L,N} = \sum_{\vec{n} \in \Omega_L} \prod_{l=1}^L f(n) \cdots (1-2-d)$$

を用いている。

更に(1-2-c)の左辺に対して、全確率の和より、分配関数がシングルサイトウェイトを用いて、

$$Z_{L,N} = \sum_{n=0}^N f(n) Z_{L-1,N-n} \cdots (1-2-e)$$

と表される。

次に分配関数とシングルサイトウェイトに対して母関数法を用いる。ξを形式的な元として、

$$\widehat{f}(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} f(n) \xi^n \cdots (1-2-f)$$

$$\widehat{Z}_L(\xi) = \sum_{N=0}^{\infty} Z_{L,N} \xi^N \cdots (1-2-g)$$

(1-2-f)、(1-2-g)より、

$$\widehat{Z}_L(\xi) = (\widehat{f}(\xi))^L \cdots (1-2-h)$$

となる。ここでシングルサイトウェイトの具体的な形が、

$$f(n) = \frac{f(1)^n}{f(0)^{n-1}} (1-p) \quad (n \geq 2) \quad \cdots (1-2-i)$$

(Pはホップ確率)であることから、

$$\widehat{Z}_L(\xi) = f(n)^L \left(\frac{f(0)+f(1)p\xi}{f(0)-f(1)(1-p)\xi} \right)^L \cdots (1-2-j)$$

となる。途中、二重和の和の交換、無限等比級数の公式を用いている。ここから分配関数は、

$$Z_{L,N} = f(0)^{L-N} f(1)^N (1-p)^{N-1} L \times {}_2F_1 \left[\begin{matrix} 1-L, 1-N \\ 2 \end{matrix}; \frac{1}{1-p} \right] \cdots (1-2-k)$$

となる。

${}_2F_1$ はガウスの超幾何関数で、

$${}_2F_1 \left[\begin{matrix} \alpha, \beta \\ \gamma \end{matrix}; z \right] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha)_n (\beta)_n}{(\gamma)_n} \frac{z^n}{n!}$$

である。(a)_nはポツホハンマーシンボル、

$$(a)_n = a(a+1)(a+2) \cdots (a+n-1)$$

である。式変形に際して、これらの公式、

$${}_2F_1 \left[\begin{matrix} \alpha+1, \beta+1 \\ \gamma+1 \end{matrix}; z \right] = \frac{\gamma}{\alpha z} \left\{ {}_2F_1 \left[\begin{matrix} \alpha, \beta+1 \\ \gamma \end{matrix}; z \right] - {}_2F_1 \left[\begin{matrix} \alpha, \beta \\ \gamma \end{matrix}; z \right] \right\} \cdots (I)$$

と、

$$(\mathbf{a} + \mathbf{1})_n - (\mathbf{a})_n = \frac{\mathbf{n}}{\mathbf{a}} (\mathbf{a})_n$$

を用いている。

1-3 ASEPの平均速度

ZRPモデルの任意の1サイトに着目することにより、ASEPでの任意の1粒子に対して平均速度を求めることが出来る。

1点平均速度を、1サイト相関関数とホップ確率を用いて、

$$V_{L,N} = \sum_{\mathbf{n}=1}^N \mathbf{p}(\mathbf{n}) \mathbf{p} \quad \dots\dots (1-3-a)$$

と定義する。和の範囲が $\mathbf{n} = 1$ からなのは、ZRPモデルでの粒子がASEPでの粒子間距離であるため、ASEPにおいての、一つ先のサイトに粒子がいる場合は一意的に粒子が今いるサイトに留まる、というルールに従っている。

(1-3-a)に前節で求めた式を代入することにより、

$$V_{L,N} = \frac{\mathbf{p}-1}{L} \frac{{}_2F_1\left[\begin{matrix} L, N, 1 \\ 1, 1-p \end{matrix}; z\right]}{{}_2F_1\left[\begin{matrix} 1+L, 1+N, 1 \\ 2, 1-p \end{matrix}; z\right]} \dots\dots (1-3-b)$$

となる。式変形に際して、ガウスの超幾何関数に対して、クンマー変換、

$${}_2F_1\left[\begin{matrix} \alpha, \beta \\ \gamma \end{matrix}; z\right] = (1-z)^{\gamma-\alpha-\beta} {}_2F_1\left[\begin{matrix} \gamma-\alpha, \gamma-\beta \\ \gamma \end{matrix}; z\right] \dots\dots (II)$$

と、(I)を用いている。

2-1 2サイト相関関数と二点平均速度

前章でZRPの1サイトに着目して、そのサイト上に \mathbf{n} 個の粒子が配位する確率をシングルサイトウェイトで表したのと同様に、新たに2つのサイトに注目して2サイト相関関数を定義する。

着目するサイトをサイト1、サイト \mathbf{r} とし、そのサイトに配位している粒子数をそれぞれ \mathbf{n}_1 、 \mathbf{n}_r とする。このとき2サイト相関関数を、

$$\mathbf{p}(\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_r) = \sum_{\bar{\mathbf{n}}'' \in \Omega_{L-2}} \mathbf{P}(\bar{\mathbf{n}}) \dots\dots (2-1-a)$$

と定義する。(但し、 $\mathbf{r} \neq 1, 2, L$) ここで、

$$\bar{\mathbf{n}}'' = \{\mathbf{n}_2, \mathbf{n}_3, \dots, \mathbf{n}_{r-1}, \mathbf{n}_{r+1}, \dots, \mathbf{n}_L\} \text{ であり、}$$

$$|\bar{\mathbf{n}}''| = N - \mathbf{n}_1 - \mathbf{n}_r \text{ である。}$$

(2-1-a)にマスター方程式の定常解を用いて、

$$p(\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_r) = \frac{1}{Z_{L,N}} \sum_{\overline{\mathbf{n}}'' \in \Omega_{L-2}} \prod_{l=1}^L f(\mathbf{n}_l)$$

……(2-1-b)

であり、

$$p(\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_r) = \frac{f(\mathbf{n}_1)f(\mathbf{n}_r)}{Z_{L,N}} \sum_{\overline{\mathbf{n}}'' \in \Omega_{L-2}} \prod_{l=2}^{r-1} f(\mathbf{n}_l) \prod_{l=r+1}^L f(\mathbf{n}_l)$$

……(2-1-c)

である。ここで、和を詳しく書くと、

$p(\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_r)$

$$= \frac{f(\mathbf{n}_1)f(\mathbf{n}_r)}{Z_{L,N}} \sum_{\mathbf{n}_2}^{N-n_1-n_r} \cdots \sum_{\mathbf{n}_{r-1}}^{N-n_1-n_r} \sum_{\mathbf{n}_{r+1}}^{N-n_1-n_r} \cdots \sum_{\mathbf{n}_L}^{N-n_1-n_r} \delta_{|\overline{\mathbf{n}}''|, N-n_1-n_r} \prod_{l=2}^{r-1} f(\mathbf{n}_l) \prod_{l=r+1}^L f(\mathbf{n}_l)$$

であるので、ここで、サイト2からサイト $(r-1)$ までに配位している粒子の総数を M とし、和の部分で、

$$\begin{aligned} & \sum_{\mathbf{n}_2}^{N-n_1-n_r} \cdots \sum_{\mathbf{n}_{r-1}}^{N-n_1-n_r} \sum_{\mathbf{n}_{r+1}}^{N-n_1-n_r} \cdots \sum_{\mathbf{n}_L}^{N-n_1-n_r} \delta_{|\overline{\mathbf{n}}''|, N-n_1-n_r} \\ &= \sum_{M=0}^{N-n_1-n_r} \left(\sum_{\overline{\mathbf{n}}''_{\alpha} \in \Omega_{r-2}} \sum_{\overline{\mathbf{n}}''_{\beta} \in \Omega_{L-r}} \right) \end{aligned}$$

ここで、

$$\overline{\mathbf{n}}''_{\alpha} = \{\mathbf{n}_2, \dots, \mathbf{n}_{r-1}\}, \quad |\overline{\mathbf{n}}''_{\alpha}| = M$$

$$\overline{\mathbf{n}}''_{\beta} = \{\mathbf{n}_{r+1}, \dots, \mathbf{n}_L\}, \quad |\overline{\mathbf{n}}''_{\beta}| = N - n_1 - n_r - M$$

$$\begin{aligned} \sum_{\overline{\mathbf{n}}''_{\alpha} \in \Omega_{r-2}} &= \sum_{\mathbf{n}_2}^M \cdots \sum_{\mathbf{n}_L}^M \delta_{|\overline{\mathbf{n}}''_{\alpha}|, M} \\ \sum_{\overline{\mathbf{n}}''_{\beta} \in \Omega_{L-r}} &= \sum_{\mathbf{n}_{r+1}}^{N-n_1-n_r-M} \cdots \sum_{\mathbf{n}_L}^{N-n_1-n_r-M} \delta_{|\overline{\mathbf{n}}''_{\beta}|, N-n_1-n_r-M} \end{aligned}$$

である。

従って、

$$p(\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_r) = \frac{f(\mathbf{n}_1)f(\mathbf{n}_r)}{Z_{L,N}} \sum_{M=0}^{N-n_1-n_r} \left\{ \sum_{\overline{\mathbf{n}}''_{\alpha} \in \Omega_{r-2}} \prod_{l=2}^{r-1} f(\mathbf{n}_l) \sum_{\overline{\mathbf{n}}''_{\beta} \in \Omega_{L-r}} \prod_{l=r+1}^L f(\mathbf{n}_l) \right\}$$

……(2-1-d)

(2-1-d) と (1-2-d) から、

$$p(\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_r) = \frac{f(\mathbf{n}_1)f(\mathbf{n}_r)}{Z_{L,N}} \sum_{M=0}^{N-n_1-n_r} Z_{r-2,M} Z_{L-r,N-n_1-n_r-M}$$

……(2-1-e)

となる。

2-2 2サイト相関関数と1サイト相関関数

後の解析の為に、2サイト相関関数の2変数のどちらか一方の総和が1サイト相関関数に等しいことを示す。

$$\sum_{\mathbf{n}_r=0}^{N-n_1} p(\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_r) = \frac{f(\mathbf{n}_1)}{Z_{L,N}} \sum_{\mathbf{n}_r=0}^{N-n_1} \sum_{M=0}^{N-n_1-n_r} f(\mathbf{n}_r) Z_{r-2,M} Z_{L-r,N-n_1-n_r-M}$$

ここで、二重和に対して和の交換をして、

$$= \frac{f(\mathbf{n}_1)}{Z_{L,N}} \sum_{M=0}^{N-n_1} Z_{r-2,M} \sum_{\mathbf{n}_r}^{N-n_1-M} f(\mathbf{n}_r) Z_{L-r,N-n_1-n_r-M}$$

……(2-2-a)

上式と(1-2-e)から、

$$= \frac{f(\mathbf{n}_1)}{Z_{L,N}} \sum_{M=0}^{N-n_1} Z_{r-2,M} Z_{L-r+1,N-n_1-M}$$

ここで、(1-2-d)より、

$$= \frac{f(\mathbf{n}_1)}{Z_{L,N}} \sum_{M=0}^{N-n_1} \sum_{\bar{\mathbf{n}}_\alpha \in \Omega_{r-2}} \prod_{l=1}^{r-2} f(\mathbf{n}_l) \sum_{\bar{\mathbf{n}}_\beta \in \Omega_{L-r+1}} \prod_{l=r-1}^{L-1} f(\mathbf{n}_l)$$

ただし、

$$\bar{\mathbf{n}}_\alpha = \{\mathbf{n}_1, \dots, \mathbf{n}_{r-2}\}, \quad |\bar{\mathbf{n}}_\alpha| = M$$

$$\bar{\mathbf{n}}_\beta = \{\mathbf{n}_{r-1}, \dots, \mathbf{n}_{L-1}\}, \quad |\bar{\mathbf{n}}_\beta| = N - n_1 - M$$

である。ここで、(2-2-a)式の右辺がサイト総数(L-1)、粒子総数(N-n)の計なったことがわかる。ここでサイト1からサイト(r-2)までの粒子数Mについての和を展開すると、

$$\sum_{\mathbf{n}_r}^{N-n_1} p(\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_r) = \frac{f(\mathbf{n}_1)}{Z_{L,N}} \sum_{\bar{\mathbf{n}}_\beta \in \Omega_{L-1}} \prod_{l=1}^{L-1} f(\mathbf{n}_l)$$

……(2-2-b)

従って、

$$\begin{aligned} p(\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_r) &= \frac{f(\mathbf{n}_1)}{Z_{L,N}} Z_{L-1, N-n_1} \\ &= p(\mathbf{n}_1) \end{aligned}$$

となる。(証明終わり)

2-3 二点平均速度

任意の2粒子の速度平均を求めるには、1点の場合と同様の考察から、遷移確率と2サイト相関関数で定義できる。

$$\langle V_1 V_r \rangle = \sum_{n_1=1}^N \sum_{n_r=1}^{N-n_1} p(\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_r) p^2$$

……(2-3-a)

ここで、前節の結果から、

$$\begin{aligned} p(\mathbf{n}_1) &= \sum_{n_r=0}^{N-n_1} p(\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_r) \\ &= \sum_{n_r=1}^{N-n_1} p(\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_r) + p(\mathbf{n}_1, \mathbf{0}) \end{aligned}$$

従って、

$$\sum_{n_r=1}^{N-n_1} p(\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_r) = p(\mathbf{n}_1) - p(\mathbf{n}_1, \mathbf{0})$$

……(2-3-b)

これを(2-3-a)に用いて、

$$\langle V_1 V_r \rangle = p \left\{ V_{L,N} - \sum_{n_1=1}^N p(\mathbf{n}_1, \mathbf{0}) p \right\}$$

……(2-3-c)

となる。更に右辺第二項に(2-1-e)を代入し、これまでの計算から、

$$\begin{aligned} \langle V_1 V_r \rangle &= \frac{p-1}{L} \frac{p {}_2F_1 \left[\begin{matrix} L, N \\ 1 \end{matrix}; \frac{1}{1-p} \right] - p(L-1) {}_2F_1 \left[\begin{matrix} L-1, 1+N \\ 2 \end{matrix}; \frac{1}{1-p} \right] - (L-2)(1-p) {}_2F_1 \left[\begin{matrix} L-2, 1+N \\ 2 \end{matrix}; \frac{1}{1-p} \right]}{{}_2F_1 \left[\begin{matrix} 1+L, 1+N \\ 2 \end{matrix}; \frac{1}{1-p} \right]} \end{aligned}$$

……(2-3-d)

となる。式変形にクンマー変換(II)と2-2章で行った、分配関数の定義を用いた和の展開や、逆に和をつくりだす操作を行った。

3-1 ASEP平均速度の一般化

任意のk個(K={1,L})のASEP粒子の平均速度は次のように表される。

$$\begin{aligned} \bar{V}_k &\equiv \mathbf{E}[V_1 V_2 \dots V_k] \\ &= \sum_{n_1=1}^N \sum_{n_2=1}^{N-n_1} \dots \sum_{n_k=1}^{N-n_1-n_2-\dots-n_{k-1}} \dots \sum_{n_L=1}^{N-n_1-n_2-\dots-n_{L-1}} \mathbf{p}^k \mathbf{P}(\vec{n}) \end{aligned}$$

ここで、この離散型スティルチェス積分に対して、(1-2-d)、(1-2-e)を用いると、

$$\bar{V}_k = \frac{\mathbf{p}^k \sum_{m=0}^k \binom{k}{m} (-1)^m \mathbf{f}(0)^m \mathbf{Z}_{L-m,N}}{\mathbf{Z}_{L,N}}$$

…… (3-1-a)

ここで、 $N \neq 0$ のとき、(1-2-k)より、

$$\bar{V}_k = \mathbf{p}^k \frac{\sum_{m=0}^k \frac{(-k)_m}{(1)_m} (L-m) {}_2F_1 \left[\begin{matrix} 1-L+m, 1-N \\ 2 \end{matrix}; \frac{1}{1-p} \right]}{L {}_2F_1 \left[\begin{matrix} 1-L, 1-N \\ 2 \end{matrix}; \frac{1}{1-p} \right]}$$

…… (3-1-b)

と表される。確かに、 $K=1$ のとき(1-3-b)と一致し、 $k=2$ のとき(2-3-d)と一致する。(2-3-d)式は着目するASEPの2個の粒子のあいだに $M+r$ の間隔を置いていたが、(3-1-b)より、速度平均の取り方には粒子間距離が無関係であることが分かる。

3-2 ASEPの速度共分散

$N \neq 0$ のとき、(3-1-b)より、速度共分散は、

$$\text{Cov}[V_1 V_2] = \mathbf{p}^2 \left\{ \frac{\mathbf{f}(0)^2 \mathbf{Z}_{L-2,N}}{\mathbf{Z}_{L,N}} - \left(\frac{\mathbf{f}(0) \mathbf{Z}_{L-1,N}}{\mathbf{Z}_{L,N}} \right)^2 \right\}$$

となる。(1-2-k)より、これは、

Cov[V₁V₂]

$$= p^2 \left\{ \frac{(\mathbf{L} - 2)2\mathbf{F}1 \left[\begin{matrix} 3 - \mathbf{L}, 1 - \mathbf{N} \\ 2 \end{matrix}; \frac{1}{1-p} \right]}{\mathbf{L}2\mathbf{F}1 \left[\begin{matrix} 1 - \mathbf{L}, 1 - \mathbf{N} \\ 2 \end{matrix}; \frac{1}{1-p} \right]} - \left(\frac{(\mathbf{L} - 1)2\mathbf{F}1 \left[\begin{matrix} 2 - \mathbf{L}, 1 - \mathbf{N} \\ 2 \end{matrix}; \frac{1}{1-p} \right]}{\mathbf{L}2\mathbf{F}1 \left[\begin{matrix} 1 - \mathbf{L}, 1 - \mathbf{N} \\ 2 \end{matrix}; \frac{1}{1-p} \right]} \right)^2 \right\}$$

..... (3 - 2 - a)

4 - 1 考察、今後の課題

以上の結果より、ASEPの速度共分散は、平均速度同様にガウスの超幾何関数の分数で表されることが分かった。更にはそのかたちから、有限系においては、共分散の値が0にならないことが予想される。今後の課題としては、有限系においてより簡潔な共分散の表記を試みると共に、系の極限を取るための最適な表記とガウスの超幾何関数の極限計算の方法を考えていく必要がある。そして、ガウスの超幾何関数の3個のパラメータになっているASEPの系の大きさと粒子数を表すL、N、更にはそれらの値の和、L+Nを密度一定の下で無限にもって言った場合、共分散の値がどのようになるかを考えていきたい。