様　式　Ｃ－１９、Ｆ－１９－１、Ｚ－１９　（共通）

科研費
KAKENHI

科学研究費助成事業　　研究成果報告書

平成 ２９ 年　 ６ 月 ２０ 日現在

機関番号：１２６０１
研究種目：挑戦的萌芽研究
研究期間：2014～2016
課題番号：２６６１００３３

研究課題名（和文）非平衡系ダイナミクスの可解モデルによる研究

研究課題名（英文）Research on exactly solvable models for systems with nonequilibrium dynamics

研究代表者
金井　政宏（KANAI, Masahiro）

東京大学・大学院数理科学研究科・特任研究員（上席）

研究者番号：４０５１５８２１

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費）　　1,100,000円

研究成果の概要（和文）：　本研究課題では、マスター方程式により時間発展規則を導入した非平衡統計力学系を考察し、特に非平衡定常状態が厳密に求められる系を構成することを目的としている。
　平衡統計力学系がエネルギーや粒子などの流れが止まった定常状態にあるのに対して、非平衡統計力学系とはエネルギーや粒子の流れが安定して存在するようなシステムである。例えば、交通流系では車が進行方向へ向かっておよそ一定の平均速度で運行している。渋滞が発生した場合でも、今度は渋滞の最後尾が上流へ向かってやはり一定の速さで伝搬していく。
　我々は、交通流に代表される、純粋な物理系とは異なったシステムに現れる特徴的な現象（渋滞）の研究を行っている。

研究成果の概要（英文）：We study exactly solvable models for systems with nonequilibrium dynamics introduced via the master equation. In equilibrium systems, there exists no flow of energy nor particles. By contrast, in nonequilibrium systems we find energy flow and/or particle flow which exists steadily. Now we have particular interest in traffic jam occurring in ordinary traffic flow systems.

研究分野：数理物理学

キーワード：交通流　非平衡系　マスター方程式

１．研究開始当初の背景

統計力学は，アメリカの理論物理学者ギブスが 1902 年に出版した『統計力学の基礎原理』により創始された．この著書の中でギブスは，力学の基礎的な法則にしたがう粒子が多数集ったときに熱力学に従う体系と同じ性質を示すことを明らかにした．（ただし，ギブスは真っ向から原子や分子の集まりを扱わずに，単に力学法則にしたがう体系を扱っている．）この方法論によって，等重率などの少数の仮定の下に，マクロな状態に対して温度などの熱力学的変数が自然に定義され，それらの間に熱力学と同等の法則が見い出される．

一方，温度や体積などが一様でない系については，状態が時間の経過とともに変化することになる．これを非平衡状態というが，たとえ，非平衡系であっても，粒子の流れが定常的である系は存在する．このような状態を非平衡定常状態と呼ぶが，交通流に現れる渋滞はまさにこの状態にある．

非平衡系に確率を導入して取り扱う方法がある．すなわち，系の可能な状態をすべて集めた空間に確率測度を導入し，その分布の時間発展により系のダイナミクスを定義する方法である．このとき，運動を表す方程式はマスター方程式と呼ばれ，状態間の遷移確率によりモデルが決定される．

マスター方程式は確率論でいうチャップマン・コルモゴロフの方程式に相当するもので，系の時間発展を確率過程として扱うものである．

マスター方程式は一般に，厳密に解くことが難しく，クラマース・モヤルの展開などの近似的解析方法によって取り扱われてきた．本研究では，このようなマスター方程式を解くために，逆に，超幾何関数を解とするようなマスター方程式に類似した形の微分方程式を探索する．そして，このような微分方程式の中でも物理的な要請を満たす場合を分類して可解なマスター方程式のリストを作成することを最初の大きな目標とする．

これまで，非平衡統計力学系に対する厳密なアプローチは数多く存在したが，特殊関数論に基づいたこのようなアプローチは過去になく，また斬新でもあり，数学と物理の学際的な研究としての魅力にあふれるものであると信ずる．

２．研究の目的

本研究では，非平衡統計力学に対してマスター方程式により時間発展を導入し，その厳密解を考察する．系が平衡状態にあるときはミクロな状態間の遷移確率が釣り合う『詳細つり合い』が実現するが，非平衡状態ではこれが破れ，確率の流れが生じる．

マスター方程式は確率の流れについての連続の方程式であって，ミクロな状態間の遷移確率を与えることにより定まる．一般に，マスター方程式の定常解は非平衡であり，このとき粒子やエネルギーのマクロな定常流が生じる．

本研究では，超幾何関数により厳密解が与えられるマスター方程式を構成し，非平衡系に現れる流れの現象の研究に数学的アプローチで寄与することを目的とする．

３．研究の方法

超幾何関数の中でも比較的扱いやすいと思われるLauricellaの超幾何関数 F_D について，この関数を解とするマスター方程式の構成には既に成功している[M. Kanai, RIMS Kokyuroku Bessatsu B41 (2013) pp.173-180]．従って，この方程式について分配関数の計算さらには物理量の期待値の計算例を作れば，その後の一般化への足がかりとなる．

ただ，一般超幾何関数は多変数関数であり，また隣接関係式は抽象的に与えられているだけであるため，実際にこれらの微差分方程式をまとめてマスター方程式にまで持っていくことは容易でない．また，グレブナー基底の計算についても，一般論にあるアルゴリズム通りに計算することは難しく，何らかの補助的な研究が必要であると思われる．

４．研究成果

(1)平成26年度:現在までに,唯一Lauricellaの超幾何関数 についてはこの関数を解とするマスター方程式の構成に成功しているが，分配関数そして物理量の平均値の計算については未だ完成していない．

そこで，26 年度は Lauricella の超幾何関数についてこれらの計算の完成を目標とし，Lauricella の超幾何関数の隣接関係式から得られたマスター方程式を考察した．

この系は，遷移確率が簡単な式であるため物理的にもイメージし易い．すなわち，単位時間ごとに一つのサイトがランダムに選ばれて粒子数に比例した相対確率で隣のサイトに一つの粒子が移動していくようなダイナミクスである．粒子が多いサイトほど粒子を放出する確率が高いので，高低差のある界面が平坦化していく様子をモデル化している．

少なくとも，数値計算によって与えられた初期状態からどのようにして定常状態に緩和していくかを可視化することは可能である．マスター方程式の解が Lauricella の超幾何関数 で与えられるわけであるが，このまま規格化されていないために相対確率となっている．この規格化，すなわち分配関数を求めることが，平衡統計力学と同様に非平衡統計力学においても基本的かつ本質的な課題となる．

最初に知りたい物理量である粒子の平均流量については，分配関数の対数微分がそのまま対応すると予想される．得られた物理量自体も超幾何関数により表示されるので，このままでは系の性質を読み取ることは簡単ではない．そこで，この表式で熱力学極限を

取って密度などマクロな量を使った表示にする必要があるが，この計算も一朝一夕にはいかないと予想された．

そこで，非平衡系のモデルとして知られるMisanthrope 過程により解析する方法を提案した．ASEP は境界の影響によって相転移を起こすという点で通常の平衡系とは全く異なるのであるが，一方で，周期境界条件の下でも定常な粒子流を持つことが知られている．

私は今回，両端を持つ場合と周期境界の場合の ASEP を同時に実現するような系を，Misanthrope 過程を改変することによって構成することに成功した．この結果，まったく一様な系であって自発的に対称性が破れて，あるサイトに粒子が集中するという凝縮現象をシミュレーションと理論計算の両方で確認することができた．

(2)平成 27 年度：一般超幾何関数について，Lauricella の超幾何関数の場合と同様の計算を進める．26 年度の研究が成功すれば，一般の場合の計算についても大分見通しが良くなると思われる．現時点で想定される最初の困難は，超幾何関数の多数の独立変数を上手に簡約して一つの時間変数にまとめるところである．

マスター方程式の形にまとめられたとして，遷移確率を表す係数 の示すダイナミクスが，非物理的であったりあまりに特殊な系をモデル化しているようでは研究の対象とはならない．一般超幾何関数について得られた数学的な結果を物理的に意味のある条件によって分類することが必要であろう．こうして超幾何関数による可解なモデルの構成と分類が完成する予定であった．

これに対して，可積分系の方程式であるmKdV 方程式と，交通流の基本的なモデルである時間遅れを持つ最適速度モデルの対応を軸に，渋滞現象に対応する衝撃波の厳密解を構成した．さらに，この方程式を離散化・超離散化し，同時に，対応する厳密解も構成した．

(3)平成 28 年度：27 年度までに超幾何関数による可解モデルが構成されたとして，今度は具体的に与えられたモデルが可解なモデルであるかを判定する方法が必要となる．（変数変換によってマスター方程式の見た目は変わってしまうからである．）

すなわち，系のダイナミクスを表す遷移確率が与えられたときに，これが可解なマスター方程式を構成するかどうかの判定法をこの年度で研究する．

この問題を解決する一つの可能性として，微分作用素環のグレブナー基底の計算が考えられる．すなわち，与えられたマスター方程式を表す作用素が，超幾何関数の隣接関係式を与える作用素の成すイデアルに含まれていれば，そのマスター方程式は可解と判定される．

グレブナー基底に関する計算は，アルゴリズムに従って有限ステップで終了する事になってはいるが，微分作用素環について具体的に実行することは，超幾何関数のような性質の良いものであっても相当の困難を要する．この困難の度合いが大きい場合には比較的単純な Lauricella の超幾何関数の場合に立ち戻り，具体的な計算の経験を積んでから解決の道を探ることになると思われた．

これに対して，我々は超幾何関数の中でもガウス，クンマーなどの１変数関数に次いで有名な Lauricella の超幾何関数を解に持つマスター方程式を構成することに成功した．Lauricella超過関数は２つの独立変数を持つ関数であるが，ここに確率過程の時間変数が現れる．

一方で，系の状態は関数のパラメータに現れることになった．今回得られたマスター方程式では，系の時間発展のルールが非常に単純で粒子が一方項へ一定の移動割合で流れていくというものであった．このマスター方程式の初期値問題の解は未だ得られておらず，今後の発展に期待するところである．

５．主な発表論文等

（研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線）

〔雑誌論文〕（計　４件）

① Masahiro Kanai, Realization of the Open-Boundary Totally Asymmetric Simple Exclusion Process on a Ring, Journal of Statistical Physics, Vol.157, 2014, pp.282-294.

② 松家敬介，金井政宏，時間遅れを持つ交通流モデルの離散化及び超離散化，第 20 回交通流のシミュレーションシンポジウム論文集，20 巻，2014，pp.55-58.

③ 松家敬介，金井政宏，時間遅れを持つ交通流モデルの離散化とその解について，研究集会報告(26AO-S2)非線形波動研究の現状--課題と展望を探る--，26 巻，2015，pp.80-86.

④ 金井政宏，交通流モデルによる歩行者の引き込み現象の解析，研究集会報告(26AO-S2) 非線形波動研究の現状--課題と展望を探る--，26 巻，2015，pp.87-93.

〔学会発表〕（計　４件）

① Mashairo Kanai, A Criterion for the Persistence of Cell Movement, The 14th Korea-Japan Joint Symposium on Vascular Biology, 2016年12月8-10日，長崎ブリックホール.

② 松家敬介，金井政宏，時間遅れを持つ交通流モデルの離散化及び超離散化，　第

20回交通流のシミュレーションシンポジウム，2014年12月5日，名古屋大学.

③ 松家敬介，<u>金井政宏</u>，時間遅れを持つ交通流モデルの離散化とその解について，九州大学応用力学研究所共同利用研究集会「非線形波動研究の現状--課題と展望を探る--」，2015年11月1日，九州大学応用力学研究所

④ <u>金井政宏</u>，交通流モデルによる歩行者の引き込み現象の解析，九州大学応用力学研究所共同利用研究集会「非線形波動研究の現状--課題と展望を探る--」，2015年11月1日，九州大学応用力学研究所

６．研究組織

(1)研究代表者

金井　政宏（KANAI，Masahiro）

東京大学・大学院数理科学研究科・特任研究員（上席）

研究者番号：40515821