

分子動力学法の人間の群集行動への適用

石黒 美佐子, 美齊津 均知

茨城大学工学部

茨城県日立市中成沢町・0294-38-5194 / ishiguro@ipc.ibaraki.ac.jp,

長い廊下状の平面を左右から押し寄せた多数の人が反対方向に歩いている状況を考える。しばらくすると秩序らしきものが生まれ、右に行くもの、左に行くもの同士が中央で判然と別れる。このような人間の群集行動を、分子動力学 (MD) の手法を用いてシミュレーションすることを試みる。MD 法では、個々の粒子 (=人間) の動きは近接粒子との位置関係からポテンシャル関数を通して決まるといふ単純な規則に基づいている。そして個々の粒子の動きから全体の組織的な振る舞いが形成される。人間行動に適合するポテンシャル関数をいくつか導入し、結果を評価する。

キーワード: 複雑系, 自己組織化, 分子動力学, コンピュータシミュレーション, 人間行動,
ローカルルール

Application of Molecular Dynamic Method to a Human Group Behavior

Misako ISHIGURO and Hitoshi MISAIZU

Faculty of Engineering, Ibaraki University

Nakanarusawa-Chou, Hitachi city, Ibaraki, -0294-38-5194 / ishiguro@ipc.ibaraki.ac.jp,

Consider the situation where many people come and go in a concourse-like lobby. After a while, the movement may become a kind of systematic appearance, where two groups who move right and left are distinctly separated around the center-line of the lobby. In this paper, we try to simulate such a group behavior of human by using the method of Molecular Dynamics: MD. In MD method, movement of each particle (=human) is determined by a simple rule depending on the position of its neighbors through "potential function". The total behavior of the system is formulated by bottom-up from the individual movement of the particles. Here the group activity is investigated by introducing the potential functions appropriate for human behavior.

Keyword: Complex systems, Self-organization, Molecular dynamics,
Computer simulation, Human behavior, Local rules

1. はじめに

分子動力学法 (Molecular Dynamics; MD) 法[1]は、多数の粒子からなる仮想的な系を考え、ポテンシャル関数によって規定された粒子間相互作用を用いて各粒子に働く力を求め、ニュートンの運動方程式により全粒子を動かし、粒子の位置と速度などの情報から種々のマクロ量を求めるものである。計算化学や材料物性のシミュレーションなど様々な研究、業務に使用されてきた。

MD法では、個々の粒子の動きは、近接粒子との位置関係から決まるという単純な規則に基づいている。また、個々の粒子の動きからボトムアップ的に全体の振る舞いが形成される。そこで、粒子を人間に置き換え、ポテンシャル関数を個々の人間の行動を反映するように選んでやれば、人間の群集行動のシミュレーションに役立つのではないかと考えた。これによって複雑系で言うところの“自己組織化”の実現も期待できる。

ここでは、長い廊下状の平面を左右から押し寄せた多数の人が反対方向に歩いている状況を考え、しばらくして秩序らしきものが生まれ、右に行くもの、左に行くもの同士が中央で判然と別れる。このような人間の群集行動をMDの技法を用いてシミュレーションすることを試みる。

従来、この種のシミュレーションでは、蜂の群知能を遺伝的アルゴリズムを使ってシミュレーションする[2]ことや、高速道路のトラフィックを格子ガスオートマトン (LGA) 法を用いてシミュレーションし渋滞解消に役立てた等報告されている[3]。遺伝的アルゴリズムやLGAに較べたMD法の利点は、個々の行動主体の動きをポテンシャル関数という形で陽に決められることである。

適合するポテンシャル関数を思考錯誤的にいくつか選んでシミュレーションを行い、計算結果を評価する。

2. MD法の概要

MD法は、粒子シミュレーションの1つの手法で、粒子間力、粒子数とその初期位置、初速度 (初期気温) などを入力パラメータで与え、ニュートンの運動方程式に従い、粒子の位置と速度を更新していくものであ

る。このとき粒子 i, j の粒子間力 F_{ij} は距離 $r_{i,j}$ の関数として

$$F_{i,j} = -\text{grad } \Phi(r) \Big|_{r=r_{ij}} \quad (1)$$

$\Phi(r)$ はポテンシャル関数で分子や原子を扱う計算化学分野では次のLennard-Jones (L-J)ポテンシャルがよく使われる。

$$\Phi(r) = \varepsilon \{ (\sigma/r)^{12} - (\sigma/r)^6 \} \quad (2)$$

ここで σ は粒子の直径、 ε はエネルギーの次元を持つ量を表す。粒子 i に対するニュートンの運動方程式

$$d^2 r_i / dt^2 (= a_i) = (\sum_j F_{i,j}) / m_i \quad (3)$$

m_i : 粒子 i の質量, a_i : 加速度

に基づき、Verlet法を用いて粒子の位置や速度を更新する:

$$\begin{aligned} r_i(t + \Delta t) &= 2r_i(t) - r_i(t - \Delta t) + a_i(t) \Delta t^2 \\ v_i(t) &= \{r_i(t + \Delta t) - r_i(t - \Delta t)\} / 2\Delta t. \end{aligned} \quad (4)$$

これらの計算の精度を保つためには、全系のエネルギーが保存される必要がある。

$$H = 1/2 \sum_i m_i v_i^2 + \sum_{i,j(i < j)} \Phi(r_{i,j}) \quad (5)$$

ここで H はハミルトニアンと呼ばれる量である。

L-Jポテンシャル関数について、計算化学等でよく使われる $m=6, n=12$ の場合と勾配がゆるやかで井戸の深い $m=2, n=6$ の場合をFig. 1に示す。これらは後の計算においても使われる。

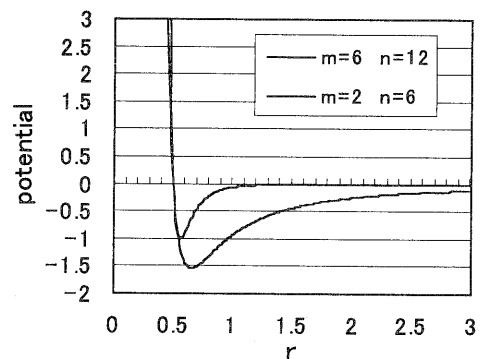


Fig. 1 L-J Potential functions

3. 人間群集行動シミュレーション

3.1 MD適用のアイデア

東京駅のコンコースのような長い廊下状の平面を左

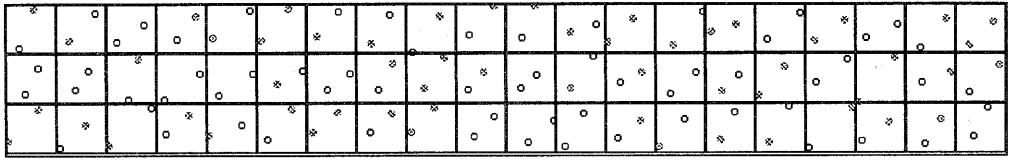


Fig.2 Initial arrangement of particles

右から押し寄せた多数の人（粒子）が反対方向に向かって歩いている状況を考える。この粒子の流れがしばらく続くと右に行く人同士が、左に行く人同士がいくつかの帯びになって動くようになりいくらか秩序らしいものが生まれる（自己組織化）[4]。このような人間の動きをシミュレーションするのにMD法を採用するアイデアは：

- (1) 個々の粒子が自律して動く、
- (2) 粒子は近隣粒子の状況に影響されて動く、
- (3) 個々の粒子の動きで集団行動が規定できる。

また、粒子間ポテンシャル特性が、次のような人間の動きを模擬するのに応用できるのではないかと考える。

性質1：近くに居る他の者の方に近づき同歩調をとる、

性質2：あまり近づくと反発する。

性質3：遠くの者には影響されない。

人間行動ということを考えれば、L-Jポテンシャルによるものに比べて、斥力（反発力）を小さくして引力（近づき力）を大きくしたい。L-Jポテンシャルにこだわらずに関数を選定しても良いが、低次元のL-Jポテンシャルも候補となる。さらに反発力には上限を設けるとすれば、1つの関数で定義するよりも合成関数として与えることも考えられる。

3.2 数学モデル

計算領域を細長い2次元配置（ 20×3 または 30×4 ）とし、初期位置として一辺が a の1つの格子の中に2個の粒子を離して配置する（Fig.2）。全ての粒子が左右どちらかに動くように x 方向に一定の外力 f_i を与える。初期配置、初速度、外力には一様乱数を用いてゆらぎを与える。シミュレーションは一定の時間刻み Δt で n_1 ステップ実行される。

左右の境界条件にはMD法で通常用いられる周期境界

条件を用いる。しかし、上下境界条件、つまり、コンコースへの粒子（=人）の出入り、には特別の境界条件を設ける。

計算領域の上端、下端から外に出た粒子はしばらく別々に粒子溜めに保存され、一定時間 n_2 タイムステップを経ると決められた場所から適当な時間間隔 n_3 ステップで1粒子ずつ出現させる。これらの粒子の位置と方向に動機付けられて、他の粒子が動くことを期待している。

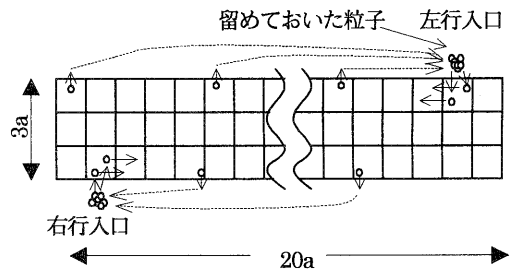


Fig.3 New boundary condition for upper and lower boundaries

4. 数値実験

ケース 1

まず、途中で入る粒子は全て右側通行で動くという簡単なモデルから開始する。計算格子 20×3 、粒子数 120、 $a = 3(m)$ 、 $\sigma = 0.5(m)$ 、 $\varepsilon = 1(J)$ 、質量 $1(kg)$ 、 $f_i = \pm 10^5 (Pa)$ 、粒子間力の上限 $200(Pa)$ 、 $\Delta t = 0.001(s)$ 、 $n_1 = 5000$ 、 $n_2 = 1000$ 、 $n_3 = 10$ とする。 $m = 6$ 、 $n = 12$ のL-Jポテンシャルが使われる。

上、下端から外に出て行く粒子は1000ステップ間溜め置かれ、その後10ステップおきに系に再入する。Fig.3で示したように上端から再入する粒子は右上の位置に出現し左へ動き、下端から再入する粒子は左下の位置に出現し右へ動くものとする。

計算結果は Fig. 4 で示される。粒子の途中での出入りは1000 ステップ当り 15-20 個であった。○印が右向き粒子、●印が左向き粒子を示す。粒子の動きを見ると2000 ステップのときは両者が混在しているが、時間が経つにつれて右方向、左方向へ行く粒子同士が近づいてくる。最終的には、ステップ3500 におけるごとく両者の分離が見られる。

しかし、自己組織化によって人間行動が決まると言う意図は必ずしも実現されていない。上端、下端から再入する粒子が右側通行を強制されているので時間が経つと再入粒子が多くなり、それらの動きが優勢となって、団子状態で左行き/右行きが分離する状況になっていると考えられる。

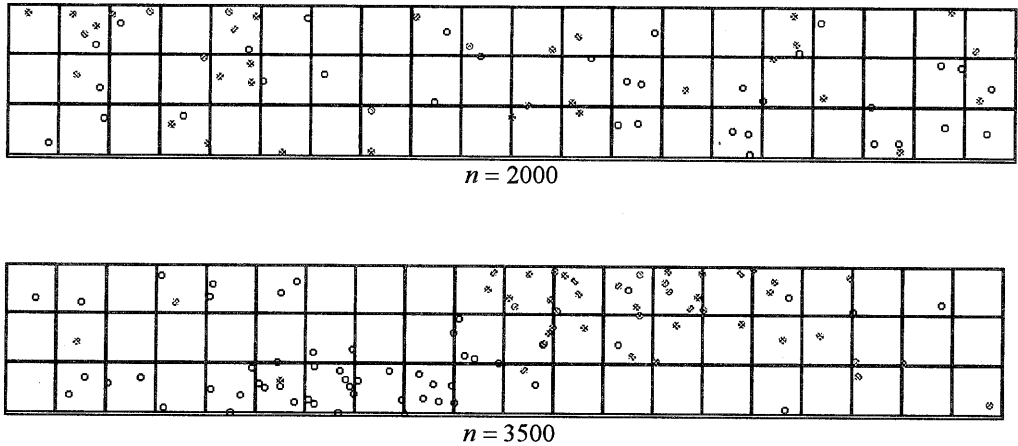


Fig. 4 Simulation results for case 1, L-J potential function is used

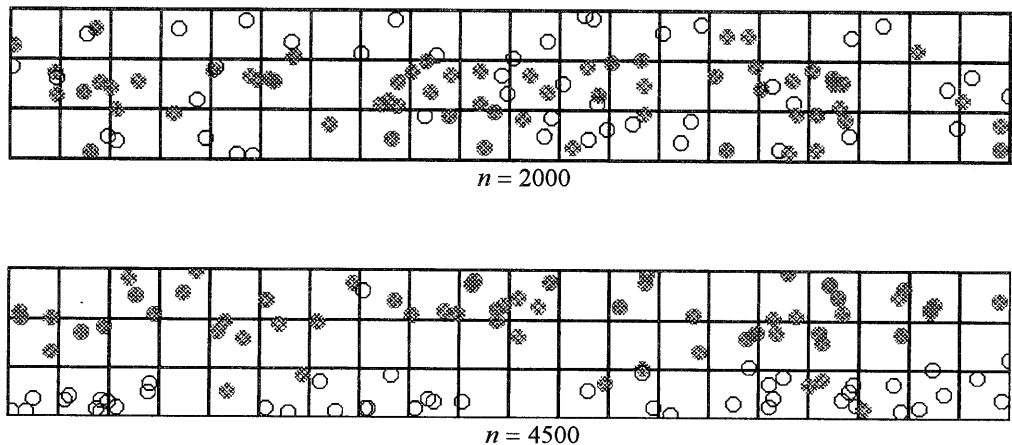


Fig. 6 Simulation results for case 2, potential function composed from three functions

このケースではハミルトニアン H は上, 下端から再入する粒子に影響されて約 0.5% の変動が見られる。

ケース 2

再入する粒子の動く方向を1方向とせず, 初速度で与えられた方向 ($\pm fi$) に戻し, 左行きと右行きが混在する状態とする。また, 3.1節で人間の動きとして挙げた「性質1: 近くに居る他の者の方に近づき同歩調をとる」を実現するために以下の仮定を追加する。
 性質 1a: 近くに居る同一方向行きの粒子は近づく。
 性質 1b: 近くに居る逆方向の粒子同士は遠ざかる。

計算条件はケース1とほぼ同じであるが, パラメータを人間動作に合わせて, 半径 $\sigma = 0.5$, $a = 1.5$, $\Delta t = 0.1(\times 6)$, ε は調整して 0.8×10^{-4} とおく。質量 $m = 60$ は無次元化しているので時間の単位は6秒である。タイムステップを $n_1 = 5000$, $n_2 = 500$, $n_3 = 10$ に変更する。

ポテンシャル関数は, Fig. 5 で示すように r_1, r_0, r_2 を接続点として次のように簡単な関数から合成する。

$0 \leq r \leq r_1$ のとき

$$\Phi_1(r) = -dr + e, \quad (6)$$

$r_1 \leq r \leq r_2$ のとき

$$\Phi_2(r) = c(r - r_0)^2, \quad (7)$$

$r \geq r_2$ のとき

$$\Phi_3(r) = -a/r + b. \quad (8)$$

ここで a, b, c, d, e は関数値と微係数の接続条件:

$$\begin{aligned} \Phi_1(r_1) &= \Phi_2(r_1), & \Phi_2(r_2) &= \Phi_3(r_2) \\ \Phi_1'(r_1) &= \Phi_2'(r_1), & \Phi_2'(r_2) &= \Phi_3'(r_2) \end{aligned} \quad (9)$$

によって決まる正の定数である。

粒子間力は $F = -d\Phi(r)/dr$ で定義されるので, $0 \leq r \leq r_0$ のときは $\Phi'(r) \leq 0$ より $F \geq 0$ となり, 性質 2: あまり近づくと離れる, を満たす。

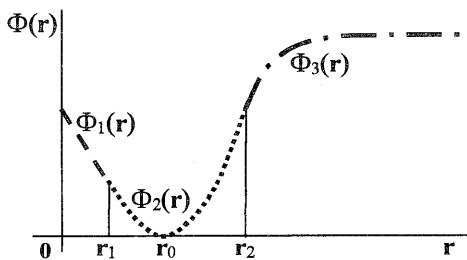


Fig. 5 Potential function composed from three functions

特に $0 \leq r \leq r_1$ のときは $\Phi'(r) = -d$ (定数) となり, 反発力に上限を設けたことと等しい。

$r_0 \leq r \leq r_2$ のときは, $\Phi'(r) \geq 0$ より $F \leq 0$ となるから, 性質 1 の一部分: 近くに居る他の者の方に近づく, を満たす。

$r_2 \leq r$ のときは $\Phi'(r)$ は徐々に 0 に近づき, $F \rightarrow 0$ となり, 性質 3: 遠くの者には影響されない, を満たす。

性質 1 を性質 1a と性質 1b に置き換え, これを実現するために, $r_0 \leq r$ のときは y 方向の力 F_y の計算

$$F_y = -d\Phi/dr \cdot dr/dy \quad (10)$$

において, 逆方向行きの粒子の間では dr/dy の符号を逆転させることにする。これによって, 逆方向の粒子同士は遠ざかるという性質が得られる。

ここでは $r_0 = 1.1\sigma$, $r_1 = 0.5\sigma$, $r_2 = 2\sigma$ とおいている。

この操作によって運動エネルギーに変化はなく, ハミルトニアン H の保存に影響を与えない。

再入する粒子の出現位置は右側通行に基づいている。すなわち, 上側から入る左行き粒子は上右の格子に, 同右行き粒子は上左の格子に出現させる。一方, 下側から入る左行き粒子は下右の格子に, 同右行き粒子は下左の格子に出現させる (Fig. 7)。

計算結果は Fig. 6 で示される。粒子の途中での出入りは 500 ステップ当り 7~15 であった。粒子の動きを見ると $n_1 = 3000$ では左右行きの粒子が混在しているが, $n_1 = 4000$ あたりから右方向, 左方向へ行く粒子が帯になって分離し始め, $n = 5000$ では, コンコースのセンターラインで上下に分離する様子が見られる。

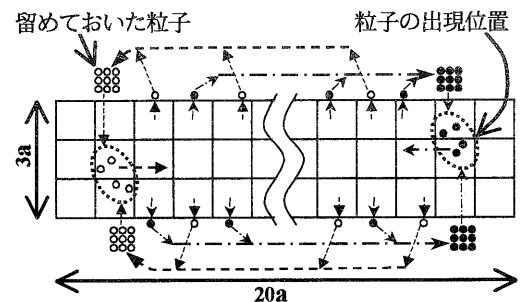


Fig. 7 Position of the re-entered particles for case 2

ケース 3

Fig. 6 による計算結果では粒子の近づきすぎが見られる。これを改善するには、近くの粒子の反発力をもう少し強めて、また引力を弱めたポテンシャル関数が望まれる。これは勾配0を中心の左側に勾配の大きい(反発力大)の井戸型ポテンシャルが本来持つ性質である。そこで、 $m=2, n=6$ の低次元のL-Jポテンシャルを用いて、2つの関数で合成する(Fig. 8)。

$0 \leq r \leq r_1$ のとき

$$\Phi_1(r) = -a/r + b, \quad (10)$$

$r \geq r_1$ のとき

$$\Phi_2(r) = \epsilon \{ (\sigma/r)^6 - (\sigma/r)^{12} \}. \quad (11)$$

計算条件はケース2とほぼ同じであるが、接続点は $r_0 = \sqrt[3]{3}\sigma$, $r_1 = \sigma$ に変更した。

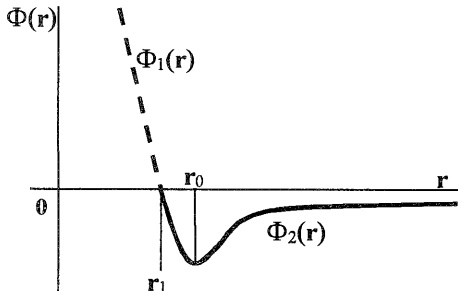


Fig. 8. Potential function composed from L-J and linear functions

計算結果は Fig. 9 に示すとおりで粒子の重なるの除去という点で多少の改善が見られる。また、粒子の途

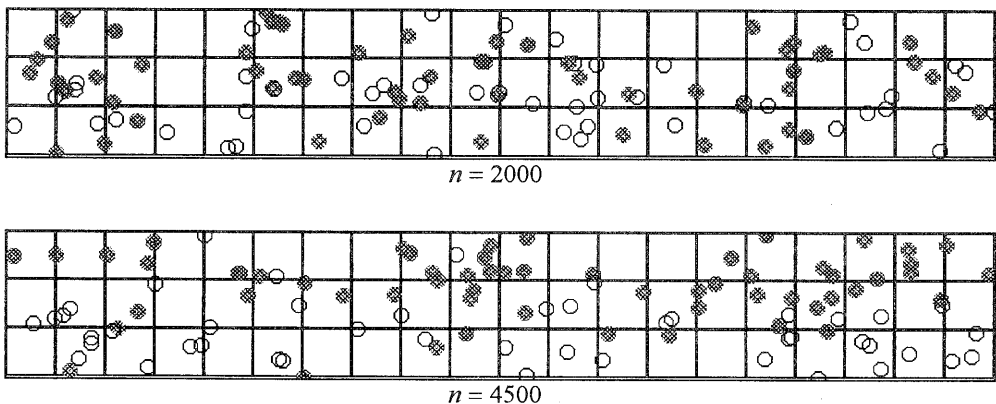


Fig.9 Simulation results for case 3, where low-order L-J potential function is used.

中での出入りは500ステップあたり平均15個で、安定して左行き粒子と右行き粒子の分離が見られる。

5. まとめ

長い廊下状の平面を左右から押し寄せた多数の人が反対方向に歩いている状況を考える。しばらくすると秩序らしきものか生まれ、右に行くもの、左に行くもの同士が中央で判然と別れる。このような人間の群集行動を、分子動力学(MD)法という比較的単純なアプローチでシミュレーションすることができた。

個々の人間(=粒子)は、近接する人間の位置に影響されて、自分の動きを決める。個々の人間の動きからボトムアップ的に全体の秩序ある行動が生まれる。それがまた、個々の人間の行動の規範となる。これらのある程度実現できた。

参考文献

- [1] 片岡洋右：分子動力学とモンテカルロ法，講談社サイエンティフィック，1995.
- [2] 中島正之監修，米澤保雄，他：複雑系の理論と応用，オーム社，1998.
- [3] 加藤，光成，築山：セルオートマトン法，森北出版，1998.
- [4] 塩沢由典：複雑系経済学入門，生産性出版，1997.