

自己駆動粒子系の集団運動と渋滞学

Collective dynamics of self-driven particles and Jammology

東京大学・院工・航空宇宙 西成 活裕 (Katsuhiko Nishinari)
Department of Aeronautics and Astronautics
Faculty of Engineering, University of Tokyo

1 はじめに

近年、経済学などの社会科学の分野に理科系的手法が取り入れられ、特に複雑系科学と結びついて大いに発展してきている。ここでは、そのような社会科学の分野の一部として考えられてきた車や人などの集団運動を考えてみよう。人が行動する原理は物理学の法則のような単純なもので記述されるわけではない。石ころと違って人には意思があり、自分自身の判断で動けるため慣性の法則や作用=反作用の法則を満たさない。このような意思を持った粒子を従来のニュートン粒子と区別して「自己駆動粒子」(self-driven particle) という [1, 2]。そして自己駆動粒子の集団は、従来のニュートンの運動方程式を満たす多体系とは異なった様々な興味深い現象を示す。このような研究はここ十数年足らずの新しい分野であり、日本やドイツのグループを中心に活発に研究が行なわれている。

自己駆動粒子は運動の三法則を全て満たさないために、その精密な定式化は現在のところ極めて難しいと言える。特に粒子間の相互作用が心理的な要因に由来するものが多いため、その定量化は困難である。従って、現象論的な記述により対象の行動を単純にモデル化して、その振る舞いを定性的に理解する方法が主な研究の方法であり、これまで様々な自己駆動粒子系のモデルが提案されてきた。まず実験や観測から対象とする粒子群の行動の特徴をなるべく詳細に捉え、その集団内での行動決定に重要な要因をいくつか抽出する。そしてお互いの相互作用の力をなるべく現実を反映するように、かつシンプルに捉える。そしてそのような相互作用力が決まれば、次にその力で動く集団の多体問題を考えることになる。しかし運動の法則が無いために、力が決まってもその力を受けてどのように動くのかを次に指定しなければならない。これもまた現象の観測から運動法則を仮定して行くほかはない。

いったんモデルが出来上がれば、今度はそれを解析して実験データの再現を試みる。良いモデルとは、実験と良く合う結果を出すことができ、かつ理論的にも取り扱いやすいものである。実験を再現できるのはもちろんであるが、そのモデルがあまりにも複雑であれば現象の真の理解にはなかなか結びつかない。やはり現象を捉えたミニマムモデルこそがまずは目指すべきところであろうと考えられる。シンプルでかつ広範囲のモデルに応用できるものの一つに ASEP (非対称単純排除過程) があげられる。これは排除体積効果を持つ粒子系の最も単純な運動を表すモデルであり、かつ厳密に解ける可解確率過程である。

本論文ではまず、この ASEP を特別な場合として含む車のモデルを述べる。そしてこれはこれは従来から知られている車の最適速度モデルの確率過程版に対応したのになっていることが示される。次にこのモデルの応用で、踏み切りでの交通の一時停止問題について考える。最後に、

ASEPに粒子の出入りを考慮したラングミュアダイナミクスや加水分解を入れることにより、分子モーターのモデルを作成する。そしてこのモデルは実験データをよく再現できることも示される。

2 車の確率最適速度モデル

車のモデルはこれまで様々なものが提案されているが、その中でも特に現実の交通流の持つ不安定性を説明することに成功しているものとして、最適速度 (OV) モデル [3] があげられる。OV モデルにおいては、各車は運動方程式

$$\frac{d^2}{dt^2}x_i(t) = a \left[V(\Delta x_i(t)) - \frac{d}{dt}x_i(t) \right], \quad \Delta x_i(t) = x_{i+1}(t) - x_i(t) \quad (1)$$

に従う。ここで、 $x_i(t)$ は時刻 t での i 番目の車の位置、 V は車間距離 $\Delta x_i(t)$ の関数で最適速度 (OV) 関数と呼ばれる。これは決定論的モデルであるが、このモデルを離散化して確率セルオートマトンによる新しい交通流モデルを考えたい。

2.1 SOV モデル [4]

まず、道路を一次元の周期格子とみなし、サイト数を L とする。各サイトには最大で一台の車が入るものとする。各車は、衝突と追越が禁止されていて、そして各ステップ毎に一斉に動く。時刻 t における各車 $i = 1, 2, \dots, N$ の位置を x_i^t とする。ここで、 i 番目の車の前方を $i+1$ 番目の車が走っているものとする。 $w_i^t(m)$ を、各車 $i = 1, 2, \dots, N$ が時刻 t に $m = 0, 1, 2, \dots, M$ サイト進む確率として、これを intention と呼ぶことにする。このとき規格化条件により

$$\sum_{m=0}^M w_i^t(m) = 1 \quad (2)$$

である。 $w_i^t \equiv \{w_i^t(m)\}_{m=0}^M$ 、 $x^t \equiv \{x_i^t\}_{i=1}^N$ と書くことにして、intention の時間発展を次の形に定める。

$$w_i^{t+1}(m) = f(w_i^t; x^t; m). \quad (3)$$

ただし、 f は、 $w_i^t(0), w_i^t(1), w_i^t(2), \dots, w_i^t(M)$ および $x_1^t, x_2^t, x_3^t, \dots, x_N^t$, m の関数であって、系を特徴付けるものである。そして、各車は以下の手順に従って時間発展する。

1. 時刻 t における、車の配置 x^t と intention w_i^t から (3) に従って次の時刻における intention w_i^{t+1} を計算する。
2. 進むサイト数 V_i^{t+1} を確率分布 w_i^{t+1} に従って与える。すなわち、各時刻 t について、 $V_i^t = m \in \{0, 1, 2, \dots, M\}$ となる確率が $w_i^t(m)$ である。
3. 各車は前の車に衝突しないように進む。式で書けば以下のようなになる。

$$x_i^{t+1} = x_i^t + \min(\Delta x_i^t, V_i^{t+1}). \quad (4)$$

ただし,

$$\Delta x_i^t := x_{i+1}^t - x_i^t - 1 \quad (5)$$

であり, これは各車の車間距離を表している。

上述のモデルで特に最大速度を $M = 1$ とする. そして,

$$v_i^t := w_i^t(1) \quad (6)$$

とすれば, (2) から $w_i^t(0) = 1 - v_i^t$ である. 我々は v_i^t の時間発展として以下の式を考える:

$$v_i^{t+1} = (1 - a)v_i^t + aV(\Delta x_i^t). \quad (7)$$

ここで, V は車間距離 Δx_i^t の関数であり, a は $0 \leq a \leq 1$ を満たす実数のパラメータである. これに対応する (3) は

$$\begin{cases} w_i^{t+1}(1) = (1 - a)w_i^t(1) + aV(\Delta x_i^t) \\ w_i^{t+1}(0) = 1 - w_i^{t+1}(1) \end{cases} \quad (8)$$

である. 式 (7) は, 第一項が現在 (時刻 t) の intention であり, 第二項は現在の状況 (車間距離 Δx_i^t) を次の intention に取り入れる役割を果たしている.

一方, 車の座標 x_i^t の時間発展は,

$$x_i^{t+1} = \begin{cases} x_i^t + 1 & \text{確率 } v_i^{t+1} \\ x_i^t & \text{確率 } 1 - v_i^{t+1} \end{cases} \quad (9)$$

である. そして, 直前のサイトを車が占有していない場合に期待値の意味で

$$\langle x_i^{t+1} \rangle = \langle x_i^t \rangle + v_i^{t+1} \quad (10)$$

である. ただし $\langle A \rangle$ は A の期待値を表し, 式 (10) は $w_i^t(1) = v_i^t$ が最大速度 $M = 1$ の場合に車の速度に対応していることを示している.

以降, この $M = 1$ の場合に限って我々のモデルの性質を明らかにしていく. この場合, 上述のように, 我々が導入した intention という概念は車の速度に置き換えられるが, さらに既存のモデルとの対応が見られる. OV モデル (1) を離散化することによって得られる離散 OV モデル [5]

$$x_i^{t+1} = x_i^t + v_i^{t+1} \Delta t \quad (11)$$

$$v_i^{t+1} = (1 - a\Delta t)v_i^t + (a\Delta t)V(\Delta x_i^t) \quad (12)$$

と (7) および (10) を比較すると, 形式的な類似が見られる. よって, 我々は (7) により与えられる新しい確率モデルを確率最適速度 (SOV) モデルと呼び, これに合わせて関数 V を最適速度 (OV) 関数と呼ぶことにする.

式 (10) と (11) の関係は, (10) が成立する条件 (すなわち直前のサイトに車がない) が満たされている間は (10) は (11) の確率拡張になっている. しかし, そうでない場合は強制的に前進が禁止され同じサイトに留まることになり, (11) と相容れない. これは, OV モデルは衝突を回避する仕組みを備えていないことによる.

2.2 SOV モデルに含まれる可解な確率モデル

SOV モデル (7) は一つの内部パラメータ a を持っているが、 $a = 0$ および $a = 1$ の場合によく知られた可解なモデルに帰着される。まず、 $a = 0$ の場合、(7) から

$$v_i^{t+1} = v_i^t = \dots = v_i^0 \quad (13)$$

であるから、すべての i に対して $v_i^0 = p$ ($0 < p < 1$) とすれば、SOV モデルは確率 p を持つ ASEP に帰着される。(特に $p = 1$ の場合はルール 184 セルオートマトンである。) ASEP では、密度を ρ 、流量を $Q(\rho)$ とすると

$$Q(\rho) = \frac{1}{2} \left[1 - \sqrt{1 - 4p\rho(1 - \rho)} \right] \quad (14)$$

となることが知られている。これを表す図は基本図と呼ばれ、集団の振る舞いを特徴づける重要な図である。次に $a = 1$ の場合、(7) は

$$v_i^{t+1} = V(\Delta x_i^t) \quad (15)$$

となり、次の intention は現在の車間距離 Δx_i^t のみから決まる。この場合、 i 番目の箱に Δx_i^t 個の玉が入った箱と玉の系と考えれば、これはゼロレンジ・プロセス (ZRP)[6] と呼ばれる確率過程と同等である。

2.3 確率最適速度モデルの基本図

OV 関数を

$$V(x) = \frac{\tanh(x - c) + \tanh c}{1 + \tanh c}, \quad c = \frac{3}{2} \quad (16)$$

として SOV モデルの基本図を考察する。特に a が小さいときが車のモデルとして重要な意味を持つので、 $a \sim 0$ の場合を詳しく見てゆこう。SOV モデルは $a = 0$ で ASEP に帰着されるにも拘らず、 $a \sim 0$ では SOV モデルの基本図と ASEP のそれとは全く異なった形になることが分かる。それを Fig.1 に示した。Fig.1 に時刻 $t = 1000$ (×) および $t = 5000$ (●) での基本図を示してある。基本図に不連続点が出現していることが分かる。これは現実のデータに近いものであり、また確率モデルでこのように同一の密度に対して複数の異なる安定状態が存在する現象はあまりこれまで報告例がない。これはある程度の時間安定な準安定状態が存在することを意味している。

3 応用例：踏み切り問題について

次にこのモデルの応用として、都市交通における踏切の問題について考察してみよう。鉄道踏切りにおいて、日本は遮断機が開いているときでも一時停止しなくてはならない (道路交通法 33 条)。この一時停止による市街交通への悪影響を理論的に調べるためにシミュレーションを行ない、一時停止とノンストップでその交通流量の差を調べる。

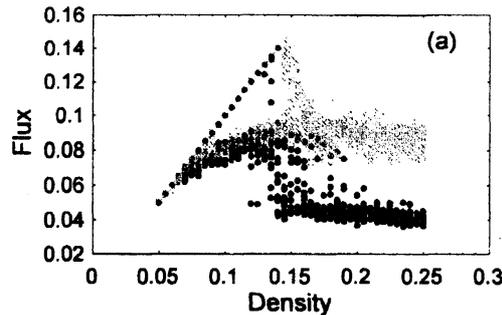


図 1: The expanded fundamental diagram around the discontinuous region with $a = 0.01$ at $t = 1000$ (gray crosses), $t = 5000$ (black circles) starting from two typical states; the uniform state with equal spacing of vehicles and $p(\equiv v_i^0) = 1$, and the random state with random spacing and $p = 1$. We observe three distinct branches, which we call the free-flow, congested, and jam branch.

標準的な状況を想定して計算機シミュレーションをおこなった。計算区間は踏切りを含む前後約 100m の長さの道であり、走る車の台数をいろいろと変えて流量の変化を調べた。車は前の車を見ながら車間距離に応じた自然な走行をし、踏切りの停止線で必ず完全に停止し、その後ゆっくり動き出すとする。また踏切内に車がいる場合は進まないとし、遮断機による用い込みがないような走行ルールを与えた。

図はシミュレーションの時空図であり、真ん中のセルが踏み切り停止線であり、踏み切りは 3 セル分を占めている。モデルの各パラメータは以下の通りである。まず $a = 0.1$ とし、OV 関数 (16) では $c = 1$ であり、また 1 セルは都市交通での平均車間距離 6 m、自由走行の平均速度は時速 30 km とし、時間 1 ステップは 0.72 秒である。この区間は約 100m なので、全部で 16 セルとした。そして、一時停止の際には、SOV モデルにおいて intension に相当する速度をゼロにするルールを採用した。

シミュレーションでは全く同じ条件から出発して (a) は必ず一時停止する場合で、(b) はノンストップでの走行である。車の台数はちょうど交通容量を超えて渋滞になったぐらいに設定した。図より、一時停止する (a) の場合、停止線を先頭に渋滞が形成されているのが分かるが、(b) の場合は渋滞長はゼロである。

次にこの停止によりどれだけ交通流量が減少するかを求めたのが下図の流量密度図である。縦軸にこの区間の交通流量をとり、横軸にこの区間の車の密度を割合で表示した。赤が一時停止したときで、黒がノンストップの場合である。これより、交通容量（交通流量の最大値）はノンストップにすれば密度が 20 % 付近のあたりで約 2 倍に拡大していることがわかる。

このように一時停止をしないことにより、最大 2 倍の流量増加が見込まれることになる。これによる経済効果の試算は年間 2000 億円であり、また原油消費量は 51 万キロリットル削減につながると言われている。ただし、安全性は十分検討しなくてはならない。これまでの踏切事故を調査した結果、踏み切り手前で一時停止をしたために、踏切内でエンストして線路内に用い込まれた事故が少なからず存在する。このような事故は減ることが予想されるが、踏み切り前方が渋

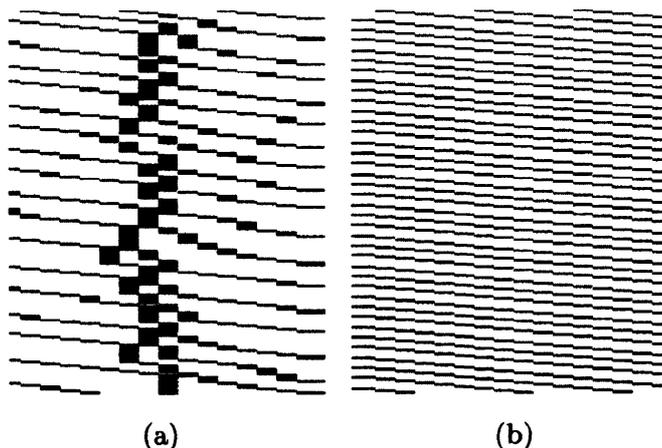


図 2: Spatio-temporal figures of (a)stop case (b)non-stop case before entering the rail crossing. We see traffic jam at the stopping line in the case (a).

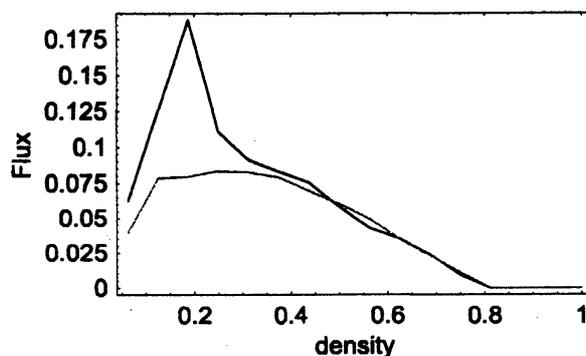


図 3: Fundamental diagram of this section. The gray curve is the stop case, while the black curve corresponds to the non-stop case.

滞している場合、注意しないと踏み切り内に立ち往生する車が増加してしまう危険性がある。これは青信号で交差点に入って、前方が渋滞していたために交差点内に取り残されるのと同じケースである。これを防ぐには、やはり運転手の注意だけでなく、何らかの標識による徹底、教習所におけるトレーニングなどの総合的な取り組みや協力が必要であろう。

4 分子モーターの渋滞

最後に生体内での交通とその渋滞として、分子モーター「キネシン」の振る舞いについてモデル化してみよう。生体内でのミトコンドリアや小胞などの輸送は分子モーターにより能動的に行なわれている。それは微小管と呼ばれる道の上をキネシンやダイニンが加水分解のエネルギーで自ら方向性を持って動くものである [7]。また、分子モーターの不調により輸送が滞ると、それが様々な病気を引き起こすことも明らかになってきた。したがって分子モーターの挙動を理解することは大変重要であり、これまで主に 1 分子がどのように前進するかの実験的研究が行なわれてき



図 4: A biochemical cycle of a single KIF1A motor. They are divided into two mechanical states as shown by the broken lines.

た [8, 9]。分子モーターでもキネシンが近年良く調べられているが、人体のキネシンは 40 種類以上あり、その生化学的メカニズムも様々に異なり、すべてが解明されているわけではない。特に多分子が微小管上を動く際の集団現象には様々な未解決問題がある。今回は、比較的新しい単頭キネシンである KIF1A に焦点を当ててそのモデルを作成し、実験との比較や集団現象を考察する。

最近キネシンのモデルとして、A S E P (非対称単純排除過程) にラングミュアー運動を取り入れただけの単純なモデルが提案された [10, 11]。しかしこれは単純化しすぎたために現実の生物の動きと比べられるものではない。特に加水分解を全く考慮しておらず、実験との比較なども不可能である。分子モーターは酵素であり、その運動は生化学的サイクルによって決まっている。そこで、加水分解を考慮したモデルを近年筆者らは提案した [12]。そして、モデルにあるパラメーターを全て実験より曖昧なく見積もることができることを示した。また、キネシンの渋滞の様子を実験とシミュレーションにより調べた。

4.1 単頭キネシン KIF1A のモデル

微小管はプロトフィラメントの束からなり、その 1 本のプロトフィラメントは α - β チュブリンといわれる単位タンパクが格子状に重合して出来ている。そしてキネシンはその上をマイナス端からプラス端の極性の方向に能動的に動いてゆく。まず、1 本のプロトフィラメントを L サイトの 1 次元格子でモデル化する。その 1 格子はチュブリン 1 つ分に相当し、その長さは 8 nm である。キネシンは加水分解サイクルの間に生化学的に 4 つの状態をとる。それはキネシン単独状態 (K)、ATP 結合状態 (KT)、加水分解後の ADP とリン酸が結合した状態 (KDP)、そしてリン酸を放出した ADP 結合状態 (KD) である (図 4)。ここで、キネシンのメカニカルな状態に注目すると、K と KT 状態は微小管に固定されており、全く動かないが、KD の状態では微小管上をブラウン運動できる。したがって、メカニカルな視点からはキネシンは微小管上で固定状態 (これを状態 1 とする) か、ブラウン運動状態 (これを状態 2 とする) の 2 つの状態に区別される。そして、キネシンは状態 1 から状態 2 への遷移、つまりリン酸を放出する際にその反作用で微小管から離れやすくなるという性質があるということである [9]。この微小管からの離脱はこのとき以外には起こりにくい。そして逆に微小管への付着はサイトが空いていればいつでも可能である。したがって、以上からキネシンの運動は 3 状態確率 CA モデルによってモデル化するのが妥当であろう。それは、あるサイトに何もいない (0)、状態 1 のキネシン (1)、状態 2 のキネシン (2) である。

時間はランダム更新とし、時間発展ルールについては、各素過程の遷移レートを以下のように

与える。

$$\text{付着: } 0 \rightarrow 1 \text{ with } \omega_a dt \quad (17)$$

$$\text{離脱: } 1 \rightarrow 0 \text{ with } \omega_d dt \quad (18)$$

$$\text{加水分解: } 1 \rightarrow 2 \text{ with } \omega_h dt \quad (19)$$

$$\text{ラチェット: } \begin{cases} 2 \rightarrow 1 \text{ with } \omega_s dt \\ 20 \rightarrow 01 \text{ with } \omega_f dt \end{cases} \quad (20)$$

$$\text{ブラウン運動: } \begin{cases} 20 \rightarrow 02 \text{ with } \omega_b dt \\ 02 \rightarrow 20 \text{ with } \omega_b dt \end{cases} \quad (21)$$

微小管の両端はたんぱく質の構造がバルク部分と異なっていることが知られており、その離脱確率などはバルクのものとは異なる。したがってバルクの付着率 ω_a の代わりに左端で α 、右端で δ とする。同様にバルク離脱率 ω_d の代わりに左端で γ_1 、右端で β_1 とする。そして、ブラウン運動レート ω_b についても、左端では γ_2 、右端では β_2 とおく。ここで添え字 1, 2 はその状態のキネシンを意味しており、離脱は状態 1 のみ、ブラウン運動は状態 2 のみで起こる。また付着後は必ず状態 1 になっているので添え字は省略する。ここで、重要なことは ω_f と ω_s の比がブラウンラチェットから決まる、ということである。レート ω_f で前進し、 ω_s がラチェット機構が働かずにその場にとどまる割合を表している [12]。

4.2 パラメーターの決定とシミュレーション、および実験

このモデルに含まれるパラメーターはすべてこれまでの実験結果から見積もることができる。これはこのモデルの大きな特徴であり、曖昧な fitting parameters は無いため、実験と直接結果を比較することが出来る。まず、ラチェットの実験結果より $\omega_f/\omega_s \approx 3/8$ が分かっており、さらに 1 分子実験での ADP リリースレートから $\omega_s + \omega_f \approx 0.2 \text{ ms}^{-1}$ がいえる。そこでまず $\omega_s \approx 0.145 \text{ ms}^{-1}$ and $\omega_f \approx 0.055 \text{ ms}^{-1}$ とレートを見積もる事ができる。また離脱レートは $\omega_d \approx 0.0001 \text{ ms}^{-1}$ となり、これはキネシン濃度によらない。また付着率は、キネシン濃度を C モルをすると、 $\omega_a = 10^7 C/\text{M}\cdot\text{s}$ と表すことができる。典型的な生体内でのキネシン濃度 C は 10 から 1000 nM であるため、 ω_a の許容範囲は $0.0001 \text{ ms}^{-1} \leq \omega_a \leq 0.01 \text{ ms}^{-1}$ と見積もれる。また、ミカエリス=メンテンの酵素反応式より、ATP 濃度を T とすると $\omega_h^{-1} \approx (4 + 0.9/T)\text{ms}$ となる。したがって、 ω_h の範囲も $0 \leq \omega_h \leq 0.25 \text{ ms}^{-1}$ となる。最後に ω_b^{-1} であるが、これも実験より $\omega_b \approx 1.125 \text{ ms}^{-1}$ となる。

つぎにシミュレーション結果であるが、これは境界のレート変化による相図を調べるのが ASEP の場合一般的であるが、今回の系ではこのレートは実験的にもコントロールできるものではない。コントロール可能なものは $\omega_a - \omega_h$ であるため、これを 2 次的に変化させて図を描いたものが (図 5) である。これより、ある条件では固定されたドメインウォールを観測することができ、その位置は ATP 濃度とキネシン濃度に依存することが分かる。ASEP の場合、ドメインウォールはランダムウォークすることが示されるが、この場合には一定の位置にとどまる場所が興味深い。またこの結果は実験により確かめられ、確かにある条件でドメインウォールが微小管上に見えることが確認できた [12]。

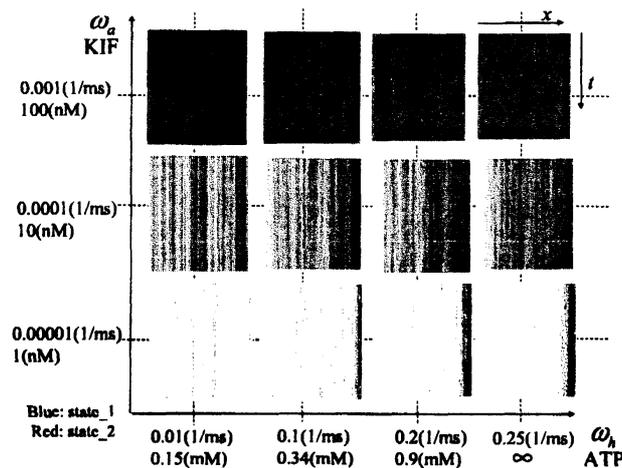


图 5: Diagram of the model in the $\omega_h - \omega_a$ plane, with the corresponding values for ATP and KIF1A concentrations given in brackets. These quantities are controllable in experiment. The boundary rates are $\alpha = \omega_a, \beta_{1,2} = \omega_d, \gamma_{1,2} = \delta = 0$. We see the formation of the immobile shock, whose position depends on both ATP and KIF1A concentrations.

参考文献

- [1] D. Helbing, Rev. Mod. Phys. 73(2001), 1067-1141.
- [2] D. Chowdhury, L. Santen and A. Schadschneider, Phys. Rep. 329(2000), 199-329.
- [3] M. Bando, K. Hasebe, K. Nakanishi, A. Nakayama, A. Shibata and Y. Sugiyama, J. Phys. I France 5(1995), 1389-1399.
- [4] M. Kanai, K. Nishinari and T. Tokihiro, Phys. Rev. E vol.72 (2005) p.035102(R).
- [5] S. Yukawa and M. Kikuchi, J. Phys. Soc. Jpn. 64(1995), 35-38.
- [6] F. Spitzer, Interaction of markov processes, Adv. Math. 5(1970), 246-290.
- [7] M. Schliwa (ed.), *Molecular Motors*, (Wiley-VCH, 2002).
- [8] Y. Okada and N. Hirokawa, Science **283**, 1152 (1999).
- [9] R. Nitta, M. Kikkawa, Y. Okada, and N. Hirokawa, Science **305**, 678 (2004).
- [10] A. Parmeggiani, T. Franosch, and E. Frey, Phys. Rev. Lett. **90**, 086601 (2003).
- [11] R. Lipowsky, S. Klumpp, and T. M. Nieuwenhuizen, Phys. Rev. Lett. **87**, 108101 (2001).
- [12] K. Nishinari, Y. Okada, A. Schadschneider and D. Chowdhury, Phys. Rev. Lett. **95**, 118101 (2005).