

迷路内での 2 次元 OV 粒子の集団運動の Kantorovich Metric を用いた解析

石渡龍輔¹, 衣川亮太, 杉山雄規¹

¹ 名古屋大学 情報科学研究科 複雑系科学専攻

概要

2次元 OV 粒子は、迷路空間上で準安定的に最適な経路上に巨視的なパターンを形成する。パターンの安定性を特徴付ける物理量を探すため、我々は Kantorovich metric を利用して粒子が作る巨視的なパターンの解析を行った。その結果、最適な経路を通る準安定は、Kantorovich metric の相対的な距離によって特徴付けられることが分かった。

Analysis of motion of two-dimensional Optimal Velocity particles on simple maze using Kantorovich metric

Ryosuke Ishiwata¹, Ryota Kinukawa, Yuki Sugiyama¹

¹ Department of Complex Systems Science, Graduate School of Information Science,
Nagoya University

Abstract

A flow of two-dimensional optimal velocity particles forms quasi-stable patterns including the optimal route in that maze, and that stability seems to be related to a kind of a degeneracy. For the purpose of looking for some physical quantity, we construct the geometric space of patterns using Kantorovich metric. As a result, the distributions in the quasi-stable pattern are expressed as limited areas in the metric space.

1 はじめに

生物細胞の集団や魚群や鳥の群れは、集団を構成する個体がそれぞれ自己駆動しながら多体相互作用を介して、巨視的なスケールで非平衡定常なパターン形成をする [1]。このような自己駆動粒子の多体現象は、古典統計力学の手法を直接利用することが難しい。しかしながら、巨視的なスケールでのパターンを特徴付けることは、平衡統計力学における自由エネルギーやエントロピーを定義することに対応するため、非平衡な粒子集団にパターンを特徴付ける物理量を導入することは、重要である。そこで、タンパク質における 1 分子の自由エネルギーを定義する馬場の方法 [2] に基づいて、非平衡状態にも適用

できる「相対エントロピーのような」物理量の分布に対する統計的な量を考える。我々は、粒子の運動の安定性を特徴付けるため物理量の分布間の類似度に基づいた距離を定義する Kantorovich metric を、迷路空間上での 2 次元 OV 粒子モデルに適用する [3]。

2 2 次元 OV 模型

2 次元 OV 模型の運動方程式は、

$$\ddot{\mathbf{x}}_j(t) = a \left[\left\{ \sum_k \vec{\mathbf{F}}(\vec{\mathbf{r}}_{kj}(t)) \right\} - \dot{\mathbf{x}}_j(t) \right], \quad (1)$$

$$\vec{\mathbf{F}}(\vec{\mathbf{r}}_{kj}) = f(r_{kj})(1 + \cos \theta_{kj})\vec{\mathbf{n}}_{kj}, \quad (2)$$

$$f(r_{kj}) = \alpha[\tanh \beta(r_{kj} - b) + c], \quad (3)$$

で与えられ、 \vec{x}_j は j 番目の粒子の位置を表わし、 $\vec{r}_{kj} = \vec{x}_k - \vec{x}_j$ は変位ベクトル、 $\vec{n}_{kj} = \vec{r}_{kj}/r_{kj}$ は変位の単位ベクトル、 $r_{kj} = |\vec{r}_{kj}|$ は変位、 θ_{kj} は j 番目の粒子の進行方向と k 番目の粒子の位置がなす角度である。 a は、感応度を表し、 c は斥力と引力の割合を表しており、 $c = 1.0$ で全領域が引力、 $c = -1.0$ で全領域が斥力となる [4, 5].

相互作用は近接相互作用であり、図1のような中心の粒子は、粒子の進行方向に基づいた6方向の領域から、それぞれ1つずつ近接粒子を決定し、相互作用する。また、粒子が運動する空間は、図2(a)で示した簡単な迷路状の空間とし、粒子数は115、パラメータは $a = 20.0, c = 1.0, \alpha = 0.5, \beta = 4.0, b = 1.0$ とした。

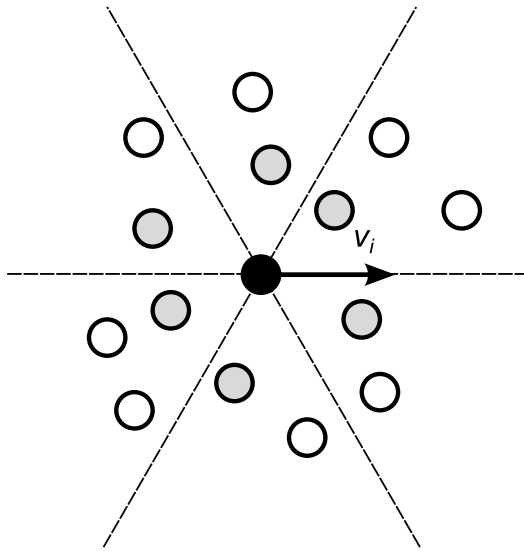


図1: v_i 方向に運動している中心の粒子と相互作用する近接粒子の例。中心の粒子は、グレーで塗りつぶされた粒子を近接粒子とし、相互作用する。

迷路状の空間中での2次元OV粒子は、周期境界同士もしくは弾性境界同士を接続するような最適な経路上で準安定的に集団運動することが知られている [8].

初期条件 (図2(b)) のように一様ランダムに粒子の位置と速度を設定した場合、2次元OV粒子集団は、左右の弾性境界壁を介した準安定的なパターン (図3(a)) と、左右の周期境界壁を介した準安定的なパターン (図3(b)) を形成する。これらの準安定的なパターンは、長時間維持されるが、多体相互作用による粒子密度の偏りなどにより、壊れる。2次元OV粒子集団は、準安定的なパターンが壊れると、一

定の時間ランダムな巨視的振る舞いを見せ、また準安定的なパターンを形成しそのパターンを長時間維持する。2次元OV粒子集団は、断続的に準安定的パターンを形成する

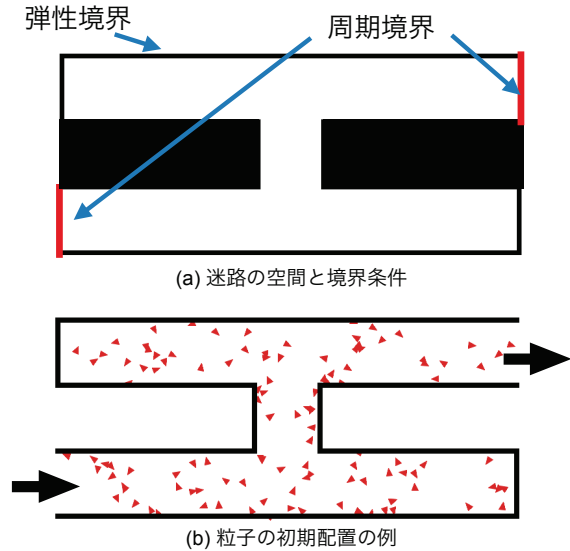


図2: (a) 迷路の空間と境界条件の模式図: 「弾性境界」と書いてある線が、弾性境界壁である。「周期境界」と書いてある赤い線は、周期境界壁であり、2つの周期境界壁が繋がっている。(b) 粒子の初期配置: 図は、2次元OV系のシミュレーションに利用した粒子の初期分布を表している。粒子は、赤い三角形で表している。黒い線は弾性境界を表しており、矢印は周期境界条件を表している。

3 Kantorovich metric

コンパクトな距離空間 (X, c) を考える¹。その距離空間上で定義される Kantorovich metric は、

$$k_r(P_1, P_2) \equiv \inf_P \int_{X \times X} c(x_1, x_2) P(dx_1, dx_2), \quad (4)$$

と与えられる。但し、 $c(x_1, x_2)$ はコンパクトな距離空間上での x_1 と x_2 の間の距離を表している。 P_1, P_2 は確率測度であり、 $P(dx_1, dx_2)$ はカップリングと呼ばれ、 $P_1(o) = \int_X dx_2 P(o, x_2)$ と $P_2(o) = \int_X dx_1 P(x_1, o)$ が成立するものとする [7]。このとき下限を与える P は、最適輸送プランなどと呼ばれる。

Kantorovich metric は、確率分布間に距離の公理を満たす「分布間距離」を与える。 (X, c) をユークリッド空間として、同じ規格化定数を持つように規格化された分布を対象とする場合、Kantorovich metric

¹ X は集合であり、 c は位相を定める測度である。

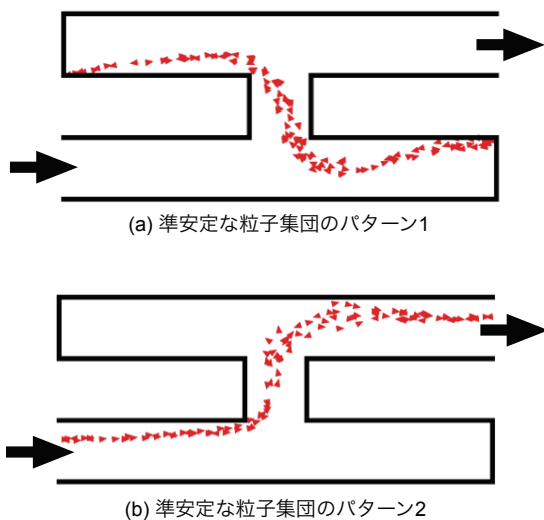


図 3: (a) 準安定パターン 1: 粒子集団が、左右の弾性境界の間に安定的なパターンを形成している際のある時刻の粒子分布。(b) 準安定パターン 2: 粒子集団が、左右の周期境界を介して安定的なパターンを形成している際のある時刻の粒子分布。

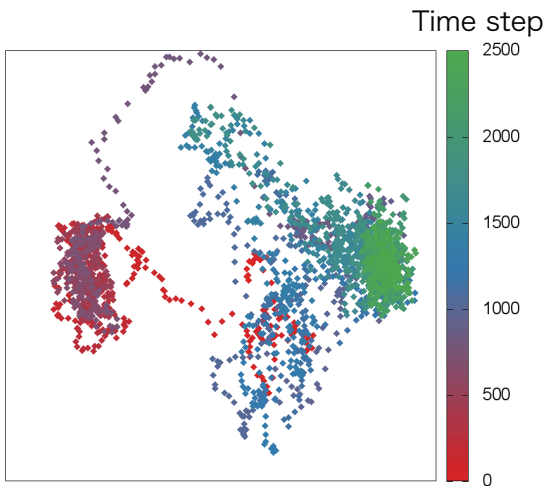


図 4: Kantorovich metric 空間内で表された各時刻の粒子の位置分布: 各時刻の粒子の位置分布が、右のカラーバーに対応した色付きの点で表されている。縦軸と横軸は、Kantorovich metric 空間内の座標に対応している。

は、分布関数の類似性を表す尺度になっている。さらに比較する確率分布が、離散確率分布であり有限の確率変数を含む場合は、オペレーションズ・リサーチにおける線形計画法により、Kantorovich 距離を計算することができる [6]。

4 大域挙動の解析

我々は、迷路内での 2 次元 OV 粒子の準安定的な振る舞いに着目し、粒子が作る大域的なパターンの安定性を評価できないかと考えた。今回の解析では、迷路の空間を離散の領域に分割し²、領域毎の粒子数を全粒子数で規格化することで規格化された分布を定義し、各時刻の粒子分布の Kantorovich 距離を計算した。

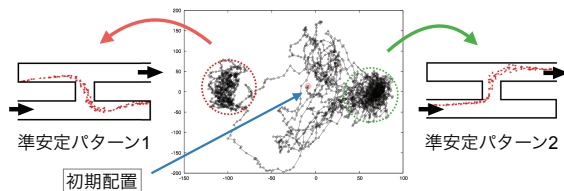
次に、得られた距離を元にパターンの類似性を表現するために、得られた距離行列を元に、各時刻での粒子の分布を多次元尺度法 (Torgerson の方法) を用いて 2 次元のユークリッド空間上で表現した (以下、この空間を「Kantorovich metric 空間」と書く)。

図 2(b) を初期状態として時間発展させた際の時系列中の各時刻の分布を点として Kantorovich metric 空間内に配置したのが図 4 である。

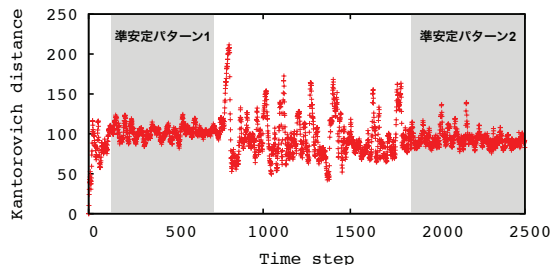
また、準安定なパターンが構成された場合、分布の時間変化を表す軌道が、Kantorovich metric 空間内の特定領域に引きつけられるような振る舞いを示す。引きつけられる Kantorovich metric 空間の領域と、実際の粒子の位置分布を対応づけて図示したのが、図 5(a) である。

また、準安定なパターンと Kantorovich 距離の関係を確認するため、図 5(b) で初期状態の粒子の位置分布と各時刻の粒子の位置分布の間の Kantorovich 距離を表した。初期状態 (図 2(b)) からの Kantorovich 距離を調べることで、準安定パターン 1,2 に含まれる全ての粒子配置は、どちらも [50, 150] の Kantorovich 距離を持つ。この結果は、Kantorovich metric 空間における初期配置と準安定パターン 1,2 の間の Kantorovich metric 空間内の距離と定性的に一致しており、Kantorovich metric 空間を用いた表現の有用性を表している。さらに、2 つの準安定パターンからの各時刻の Kantorovich 距離 (図 5(c),(d)) は、準安定パターンの安定性を距離として表現できることを示唆している。

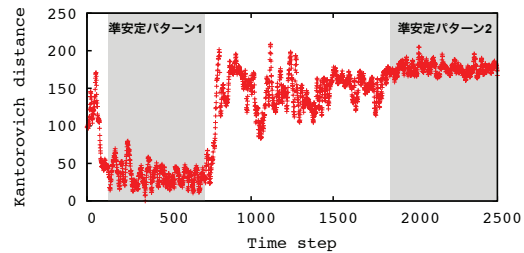
²空間の離散化は、数値計算の計算量を減らすために行っている。



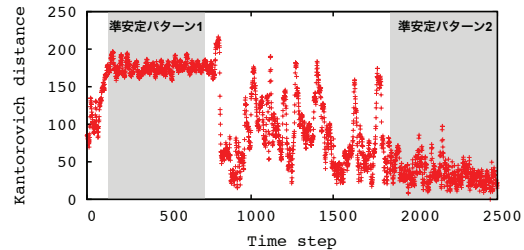
(a) Kantorovich metric空間と準安定パターンの関係



(b) 初期分布と各時刻の粒子分布との距離



(c) 準安定パターン1の位置分布から見た各時刻の粒子分布の距離



(d) 準安定パターン2の位置分布から見た各時刻の粒子分布の距離

図5: (a) Kantorovich metric 空間内での準安定パターン 1 と準安定パターン 2 の領域: 赤の点線で囲まれた領域が、準安定パターン 1 となっている領域であり、緑の点線で囲まれた領域が、準安定パターン 2 となっている領域である。(b) 初期状態の粒子分布から各時刻の粒子分布の Kantorovich 距離 (c) 準安定パターン 1 の粒子分布から各時刻の粒子分布の Kantorovich 距離 (d) 準安定パターン 2 の粒子分布から各時刻の粒子分布の Kantorovich 距離

5 まとめと考察

本研究の目指す所は、集団を特徴づける物理量を見出すことである。本研究により、Kantorovich metric と多次元尺度法を利用することで、我々が直感的に把握していた時間的に準安定なパターンをユークリッド空間上のある領域に引きつけられる軌道として表現できることが分かった。より詳細に言えば、我々は、準安定状態を表現する Kantorovich 距離を見つけたことになり、目的に述べた準安定性を特徴付ける粒子分布の特徴量の 1 つを発見した。

Kantorovich metric は、物理量の分布を対象にしているため、どのような物理量を元にすれば非平衡状態を適切に記述できるのかということは、未だ不明である。そのため、今後は Kantorovich metric を利用しながらも、位置以外の物理量の分布を通じて粒子集団の特徴付けが行えないかを調査していく。

参考文献

- [1] Tamás Vicsek and Anna Zafeiris. Collective motion. *arXiv*, Vol. 517, No. 3, pp. 71–140, August 2012.
- [2] Akinori Baba and Tamiki Komatsuzaki. *Proceedings of the National Academy of Sciences of*

the United States of America, Vol. 104, No. 49, pp. 19297–19302, December 2007.

- [3] Ryosuke Ishiwata. *Joint Annual Meeting of the Japanese Society for Mathematical Biology and the Society for Mathematical Biology*, Osaka, Japan, Aug 2014.
- [4] Akihiro Nakayama, Katsuya Hasebe, and Yuki Sugiyama. *Physical Review E*, Vol. 71, No. 3, p. 36121, March 2005.
- [5] Akihiro Nakayama, Katsuya Hasebe, and Yuki Sugiyama. *Physical Review E*, Vol. 77, p. 16105, 2008.
- [6] Rachev Svetlozar T. and Ludger Rüschemdorf. *Mass Transportation Problems, Volume I: Theory*. March 2005.
- [7] Cédric Villani. *Topics in Optimal Transportation*. American Mathematical Soc., 2003.
- [8] 衣川亮太, 大島吉雄, ポスター発表 P11, 第 15 回 創発システム・シンポジウム, 8 月, 2009 年.