

複雑な相互作用をする粒子の集団の流れ

茨城大 理

粟津暁紀 (Akinori Awazu)

§1. はじめに

「流れ」は、日常どこにでもある現象である。しかしそのような「流れるもの」のすべてが、いわゆる「流体」とは異なる、様々な「物の流れ」が存在する。最近、そのようなものの一つである、細い管の中の粉体の流れ、または類似の現象と考えられている、高速道路上での交通流の研究が盛んに進められている。

しかし「物の流れ」という視点から見ると、こういった系は、個々の要素が比較的単純な相互作用しか行わない、やや特殊で理想的な系である。実際、例えば、形、硬さに異方性のある物や、長距離力による相互作用を行う物の集団等は、各要素間に働く力が単純ではなく、流れも複雑になると考えられる。

我々は、そのような一般的な「物の流れ」が、如何なる挙動を示し得るのか、という事に興味がある。そこで今回、やや複雑な相互作用をする粒子集団のモデル作り、そこから「物の流れ」の持つ多様性、法則性を考えていく。

§2. モデル

複雑な相互作用をする、粒子集団の流れを考える第一歩として、複雑な相互作用をする粒子集団の、簡単なモデルを考える。そこで今回我々は、Rule 184+a というセルオートマトンモデルを提案する。これは、交通流、粉体流の最も簡単なモデルと見做される、セルオートマトン Rule 184 に、簡単な速度変化のルールを盛り込んだメタモデルである。以下にモデルの具体的な形を示す。

空間、時間は離散的とし、各粒子は以下の方程式に従い運動する。

$$v_{n+1}^i = F(v_n^i, v_n^{i+1}, d_n^i) \quad (1)$$

$$x_{n+1}^i = x_n^i + v_{n+1}^i \quad (2)$$

ここで、 i はある粒子の番号であり、その前方に存在する粒子の番号は $i+1$ である。 x_n^i 、 v_n^i は、時間 n における粒子 i の位置、速度であり、 d_n^i は、粒子 i と $i+1$ の間にある空白格子数である。今回は簡単のため、関数 $F(v_n^i, v_n^{i+1}, d_n^i)$ と速度 v_n^i は 0 もしくは 1 の 2 つの値をとるとし、 $F()$ は以下のルールに従うとする。

- $d_n^i > 1$ の時、 $F(v_n^i, v_n^{i+1}, d_n^i) = 1$
- $d_n^i = 0$ の時、 $F(v_n^i, v_n^{i+1}, 0) = 0$
- $d_n^i = 1$ の時、 $F(v_n^i, v_n^{i+1}, d_n^i = 1)$ は粒子の種類に応じて、値 0 もしくは 1 をとる。

ここで、粒子の種類について述べる。速度 v_n^i は値 0 もしくは 1 をとるので、組合せ (v_n^i, v_n^{i+1}) は、 $(0, 0)$, $(0, 1)$, $(1, 0)$, $(1, 1)$ の 4 種類が存在する。そして $d_n^i = 1$ の時、そのそれぞれに対し、 F は値 0 もしくは 1 をとる。よって、 $F(v_n^i, v_n^{i+1}, 1)$ に対し、 $\{F(0, 0, 1) = 0, F(0, 1, 1) = 0, F(1, 0, 1) = 0, F(1, 1, 1) = 0\}$ から $\{F(0, 0, 1) = 1, F(0, 1, 1) = 1, F(1, 0, 1) = 1, F(1, 1, 1) = 1\}$ の計 16 種類のルールが存在する。ということで、逆にこの 16 種類の $F(v_n^i, v_n^{i+1}, 1)$ のルールの違いによって、種類の異なる 16 種類の粒子が定義される。これらの粒子の種類の名前として rule number 'a' を用い、rule number は Wolfram の方法に習い

$$a = 2^0 F_a(0, 0, 1) + 2^1 F_a(0, 1, 1) + 2^2 F_a(1, 0, 1) + 2^3 F_a(1, 1, 1) \quad (3)$$

と定義する。ここですべての粒子が 'a' = 15 の時、この系は CA rule 184 に帰着する。

この様に簡単なモデルにより、やや複雑な相互作用をする数種類の粒子を作ったので、実際にシミュレーションすることで、系の振舞いを見て行く。

§3. シミュレーション

今回、このモデルを用いて、まず純粋な 1 種類の粒子 'a' からなる系の流れを、次に 2 種類の粒子を混合した系の流れを、周期境界条件のもとシミュレーションした。以下その結果を、粒子密度 ρ と Flow f との関係図である、基本図を中心に簡単に見て行く。

3.1 1 種類の粒子系

Figure.1 は 1 種類の粒子系における典型的な基本図である。これより、幾つかの種類の子系の振舞いに関しては、基本的に従来の交通流、粉体流において見られるものと同様に、「自由流」「渋滞流」の二つの相が現れ、 ρ の変化に対し、相転移を起こす ((a),(b))。しかし $F()$ に関して、ある共通の相互作用ルールを持つ粒子からなる系では、(c),(d) の様に、 ρ の変化に対する流相の種類が 1 つ増え、「自由流」「渋滞流」の間の密度領域において、「中間流」が現れる (Fig. 2 (b),(e))。この「中間流」の振舞いは、'a' の違いによって、様々であり、例えば、「自由流」の特徴であるホールと「渋滞流」の特徴であるスラグが共存する場合、「渋滞流」で安定に存在し続けるスラグが生成消滅を繰り返す場合、等が見られる。また更に、別の共通のルールを持つ粒子からなる系では、 ρ の増化に対し、「自由流」的流れから「渋滞流」的流れへの転移が、2 度発生する (Fig.1(e),(f), Fig. 3) といったことが見られる。このときは ρ の増化によって、密度の薄い流相 (「自由流」, 希薄な「渋滞流」) から密度の濃い流相 (「自由流」に似た流れ, 「渋滞流」) への転移が見られる。これは密度の薄い流体から濃い流体への転移、例えば気液転移に似ており、大変興味深い。

この様に、ある特定の相互作用を行う粒子系においては、粉体流、交通流に比べ、より多様な流相、相転移が発生することが分かる。

3.2 2種類の粒子の混合系

次に異なる2種類の粒子が混合され、ランダムに分布しているときの、系の流れについて、見て行く。

粒子の組合せは多数存在するが、多くの場合 Fig.4(a) で表されているように、混合系の基本図は、混合する前の2種類の粒子の基本図を、ほぼ平均したような形になる。しかしある組合せにおいては、 ρ に対し flow が、混合前に比べ激減し、流れが止まって、凝固する場合がある (Fig.4(b))。この様に、ある種の共通な相互作用ルールを持つ粒子は、また別の共通な相互作用ルールを持つ粒子の流れを妨げ、あたかも「凝固剤」の様に振舞うものが、存在することが分かる。

§4. まとめ

今回、複雑な相互作用をする、粒子集団の流れの、簡単なモデルとして、Rule 184+a というセルオートマトンモデルを提案し、シミュレーションの結果を見てきた。それにより、ある特定の共通な相互作用ルールを持つ粒子系において、流相、相転移の種類の多様化や、異なる種類の粒子の混合による、系の流れの凝固、といった現象が見られた。ここで、注意すべき事は、ただやみくもに相互作用を複雑にただけでは、系の振舞いは多様化しないことである。多様化は、特定の相互作用ルールなどといった、何らかのメカニズムによって引き起こされている。よって、今回見られた多様な現象は、モデルの詳細に依らず発生すると考えられる。

-
- 1) S.Wolfram: 'Cellular Automata and Complexity', Addison-Wesley. Reading. Massachusetts. (1994)
 - 2) K.Nagel and M.Schreckenberg: J.Phys.I.France **2** (1992) 2221.
 - 3) S.Yukawa, M.Kikuchi and S.Tadaki: J.Phys.Soc.Jpn. **63** (1994) 3609.
 - 4) M.Bando, K.Hasebe, A.Nakayama, A.Shibata and Y.Sugiyama: Phys.Rev.E **51**, 1035 (1995).
 - 5) G.Peng and H.J.Herrmann: Phys.Rev.E **51**(1995) 1745.
 - 6) O.Moriyama, N.Kuroiwa, M.Matsushita, and H.Hayakawa: Phys.Rev.lett,**80**(1998)2833.
 - 7) A.Awazu: 'The Dynamics of Rule 184+a: Thermo-dynamical Behavior of The Complex Materials Flow (preprint)

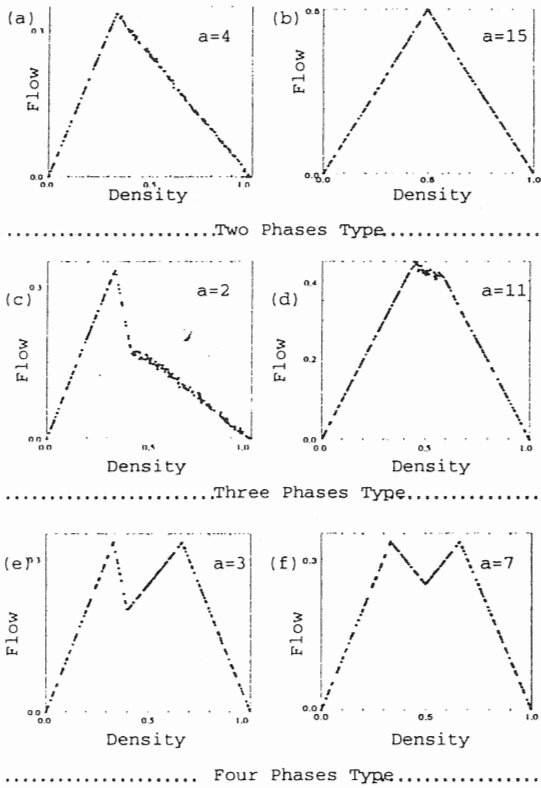


Fig.1: The typical fundamental diagrams for each 'a'. There are three types of fundamental diagrams, (a)(b) 2-type, (c)(d) 3-type, and (e)(f) 4-type.

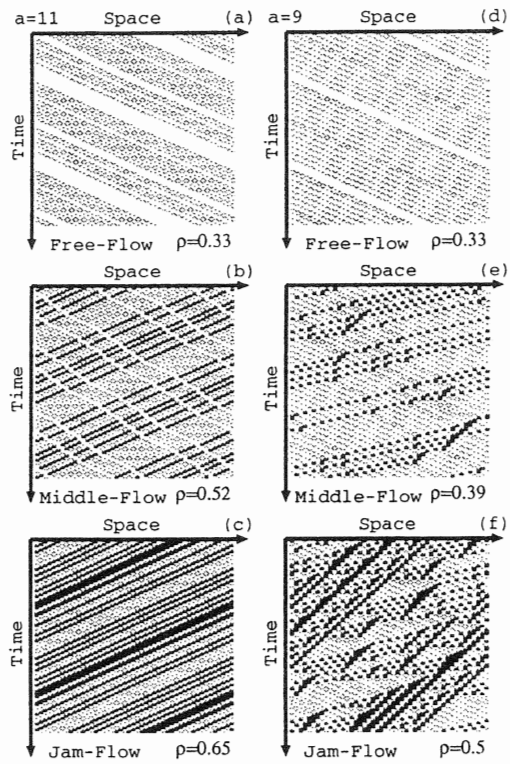


Fig.2: The space-time evolutions of the stationary states of 'a'= 11 particles systems ((a),(b),(c)), and 'a'= 9 ((d),(e),(f)), where black dots means $v = 0$ particles and gray dots means $v = 1$ particles. They indicates respectively free-flow ((a) and (d)), middle-flow ((b) and (e)), and jam-flow ((c) and (f)).

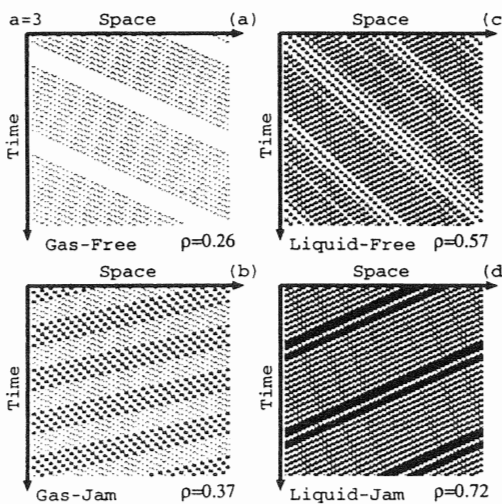


Fig.3: The space-time evolutions of the stationary states of 'a'= 3 particles system, respectively (a)gas-free-flow, (b)gas-jam-flow, (c)liquid-free-flow, and (d)liquid-jam-flow.

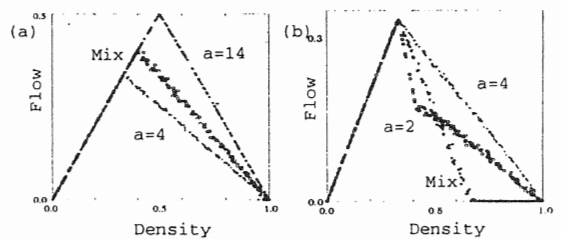


Fig.4: The typical fundamental diagrams of two pure particles systems and the mixed particles systems. The rate of particles is 1:1. (a) Normal type. (b) Decreasing type.