

異方的散逸を持つ粒子系の対向流モデルにおけるレーン形成とその不安定性

池田昌浩, 和田浩史, 早川尚男

京都大学 基礎物理学研究所

概要

レーン形成とは対向する向きに駆動される二種類の粒子集団が共存するとき、同じ方向に流れる粒子同士が進行方向に列を作る現象である。この現象は歩行者の流れや電荷を帯びたコロイドの運動などで見ることができる。我々は異方的な散逸をもち対向する方向に駆動される粒子系のモデルを導入し、パラメーターの違いにより安定なレーンが形成される相とレーンが不安定となる相があることを示し、相図にまとめた。また、最少散逸原理を用いたレーンの不安定化についての議論も行った。

Lane formation and instability in a counter driven model with anisotropic dissipation

Masahiro Ikeda, Hirofumi Wada and Hisao Hayakawa

Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto University

Abstract

In this paper, we introduce a simple self-propelling particle model. From our molecular dynamics simulation of this model, we demonstrate that (i) this model can exhibit a stable lane formation under a certain parameter set, (ii) this model exhibits that the formed lane becomes unstable under a different condition. We also draw the phase diagram whether the formed lane is stable. We will consider the mechanism of the lane formation process in terms of the least dissipation principle.

互いに対面する二方向の流れが共存するとき、同じ方向に流れるもの同士が進行方向に列を作るレーン形成という現象が知られている。この現象は歩行者の流れや電荷を帯びたコロイドの運動などで見ることができる。[1, 2] ところが、異方的な散逸を持ち対向した駆動力が働くモデルを用いて分子動力学シミュレーションを行った結果、駆動力に対して垂直な成分の散逸が小さいあるいは駆動力を十分に大きく取る時、対面する二方向の流れが共存するにもかかわらず、安定したレーンは形成されず不安定な振る舞いを見せる事が分かった。そこで我々は、駆動力や駆動力と垂直な散逸を変化させオーダーパラメーターを測定することによりレーン形成についての相図を作成し、レーンの不安定化について議論を行った。

本研究では二次元平面内の二種類の粒子が対向する二方向に駆動されるモデルを用いている。 e_x, e_y を x 方向, y 方向の単位ベクトルとし、駆動力方向を x 方向にとると駆動力は $a_x(\pm V_0 - u_i)e_x$ と表される。ただし u_i, v_i は粒子 i の速度の x 成分, y 成分である。この駆動力によって一方の粒子は x 軸正方向に V_0 の速さで進むように、もう一方の粒子は x 軸負の方向に V_0 の速さで進むように駆動される。それに対して駆

動力と垂直な y 方向には散逸力 $-a_y v_i e_y$ が働く. さらに粒子間には Weeks-Chandler-Andersen[3] ポテンシャル

$$\phi(r_{ij}) = \begin{cases} 4\epsilon \left\{ \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 + \frac{1}{4} \right\}, & (r_{ij} \leq 2^{1/6}\sigma), \\ 0, & (r_{ij} > 2^{1/6}\sigma). \end{cases} \quad (1)$$

による相互作用も働くので粒子 i の運動方程式は

$$m \frac{dv_i}{dt} = a_x (\pm V_0 - u_i) e_x - a_y v_i e_y - \sum_{j \neq i} \frac{\partial \phi(r_{ij})}{\partial \mathbf{x}}, \quad (2)$$

と書かれる. ここで $v_i = u_i e_x + v_i e_y$ である. この運動方程式に表れる項の $-a_x u_i e_x$ と $-a_y v_i e_y$ はそれぞれ速度に比例した摩擦力の形をしているがこのモデルでは a_x, a_y は一般的には $a_x \neq a_y$ である. そのためこのモデルは散逸が異方的であるという特徴を持っている. また境界条件は x, y 方向共に周期 l の周期境界条件であり, 粒子数は両種類とも同じ数存在している. また本論文ではこれ以降, 粒子の質量 m 及び WCA ポテンシャルのエネルギースケール ϵ , 粒子直径 σ を尺度として無次元化した値を用いる.

1 オーダーパラメーターの測定

オーダーパラメーターは次のように定義する. まず粒子直径 σ の間隔で x 軸と平行に引いた直線によって空間を N 個に分割する. 分割された領域 i 内に存在する x 軸の正方向に駆動される粒子数 n_i^+ と負方向に駆動される粒子数 n_i^- から

$$\Phi = \left\langle \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{|n_i^+(t) - n_i^-(t)|}{n_i^+(t) + n_i^-(t)} \right\rangle_t, \quad (3)$$

と定義している. ただし, ここで $\langle * \rangle_t$ は時間平均を表している. このようにオーダーパラメーター Φ は 0 から 1 までの値をとりレーンが形成されるときに 1 に近づくよう定義されている.

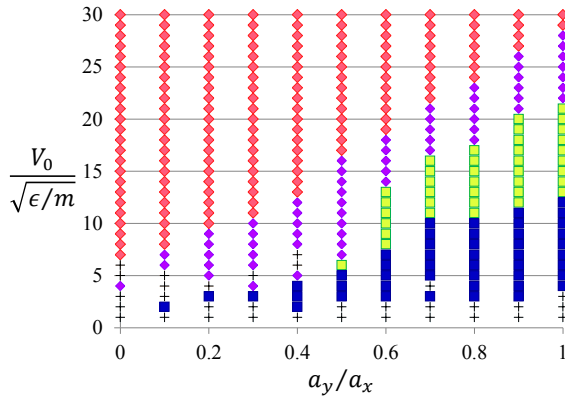


図 1: V_0, a_y を変化させたときの Φ . それぞれの点は Φ の値 \blacklozenge :0.00-0.25, \blacklozenge :0.25-0.50, \blacksquare :0.50-0.75, \blacksquare :0.75-1.00 を表している. また, + は粒子の動きがせき止められて動かなくなってしまう場合を表している. $a_x = 1.0$, 面積分率は 0.79.

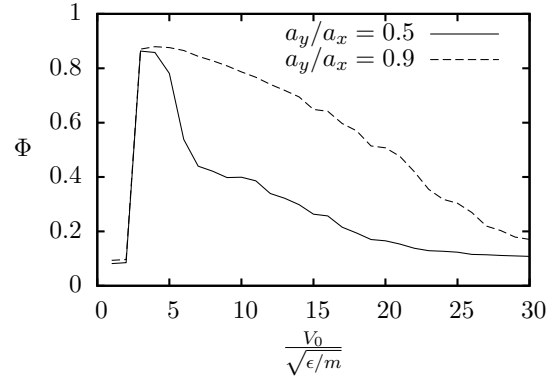


図 2: $a_y = 0.5$ および $a_y = 0.9$ のときの Φ . $a_y = 0.5$ では $V_0 = 5.0$ から 6.0 の間で Φ の急激な変化が見られる. m, ϵ はそれぞれ粒子の質量と WCA ポテンシャルのエネルギースケールである.

$a_x = 1.0$ で面積分率が 0.79 の時, a_y を 0 から 1 まで, V_0 を 1.0 から 30.0 までの間で測定したオーダーパラメーター Φ を図 1 に示す. ここで V_0 が小さすぎる時や反対方向に駆動される粒子同士がせき止り場合など, 粒子の運動が停止してしまう場合については + で表している. 一方, 粒子の動きがせき止められることなく運動している場合には, V_0 が小さく a_y が大きいときにレーンが形成され, V_0 を増加させたり

a_y を減少させた時 Φ が減少しレーンが形成されなくなる事が分かる. また $a_y = 5.0$ と $a_y = 0.9$ の部分を取り出した図 (図 2) に見られるように $a_y = 0.9$ のときには Φ は V_0 を増加させるにしたがって徐々に減少しているが a_y がある程度小さくなると V_0 の増加に対して Φ が急激に減少する部分が現れる.

また, V_0 を増加させた場合と V_0 を固定して a_y を減少させた場合でレーンが形成されない相へ移行する過程を比較すると, V_0 を増加させた場合には V_0 の増加に伴ってレーン境界の粒子の混ざり合う領域が広がるのに対して, a_y を減少させた場合では二種類の粒子が相分離した状態を維持したまま乱雑な振る舞いを見せるという違いも確認できる.

2 レーンの密度, 温度, 速度プロファイル

レーンが形成される場合には x 軸方向には密度や速度分布がほぼ一様になっている. そこで密度と温度および速度について x 軸方向の平均および時間平均を取りその y 依存性を調べた. 測定には $a_x = a_y = 1.0$, $V_0 = 6.0$, 周期境界条件の周期が $l = 80$, 面積分率が 0.79 となるパラメーターでのシミュレーションの結果を使用した. この測定は空間座標を x 軸に平行な直線によって y 方向の幅が 1.0 の領域ごとに分割し, それぞれの領域ごとに粒子数密度や速度の x 成分の平均を測定した. また温度については

$$T = \frac{1}{N_p} \sum_i \langle (v_i - \langle v_i \rangle)^2 \rangle \quad (4)$$

で導入し, その測定を行っている. 但し N_p は領域内にある粒子数である. ここでのブラケットは領域内の粒子ごとの平均および時間平均を取ることを意味している.

測定結果について, 数密度と温度の y 依存性を示したものが図 3 である. この図からレーンの境界部分で密度が低下し温度が上昇していることが分かる. また, レーンの境界で密度が低下した分だけレーンの内部では通常よりも密度が増加する. 速度平均の x 成分については図 4 に示している. この測定結果からレーン部分では V_0 に近い速さで粒子が流れることが出来ている事が確認できる.

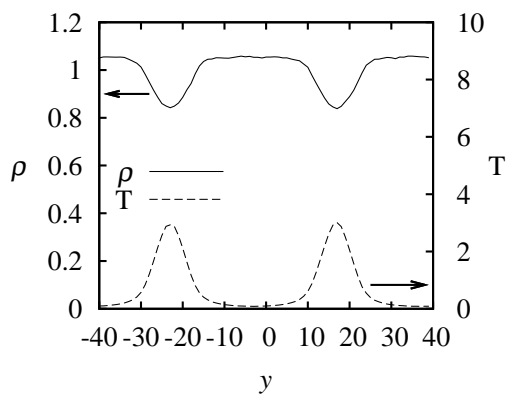


図 3: $a_x = a_y = 1$, $V_0 = 6.0$ での数密度 ρ と温度 T .

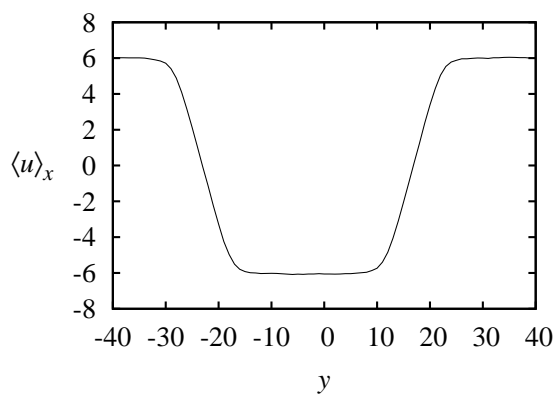


図 4: $a_x = a_y = 1$, $V_0 = 6.0$ での平均速度の x 成分.

3 最小散逸原理による考察

レーンが形成されている相では最少散逸原理が成り立っていると考えられる. そこでここでは最少散逸原理を用いてレーンの安定性についての議論を行う. 系全体のエネルギーは次のように書ける.

$$H = \sum_i \left[m \frac{v^2}{2} + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \phi(r_{ij}) \right] \quad (5)$$

この時間微分 $\dot{H} \equiv \frac{dH}{dt}$ は

$$\dot{H} = \sum_i [-a_x u_i (u_i - \varepsilon_i V_0) - a_y v_i^2] \quad (6)$$

となる。

ここで粒子 i が正方向に駆動される場合に $\varepsilon_i = 1$, 負方向に駆動される場合に $\varepsilon_i = -1$ としたとき駆動力方向への平均速度 $\bar{u} \equiv \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (\varepsilon_i u_i)$ および, この平均速度からのずれ $\Delta u_i \equiv u_i - \varepsilon_i \bar{u}$ を導入して \dot{H} を書き直すと,

$$\dot{H} = -na_x \bar{u} (\bar{u} - V_0) - a_x \sum_{i=1}^n (\Delta u_i)^2 - a_y \sum_{i=1}^n (\Delta v_i)^2. \quad (7)$$

に帰着する. ここで, $-a_x \sum_{i=1}^n (\Delta u_i)^2 - a_y \sum_{i=1}^n (\Delta v_i)^2$ の部分は散逸力によるエネルギーの散逸を表す. 一方で $-na_x \bar{u} (\bar{u} - V_0)$ の項は駆動力によるエネルギーの供給である. 系が定常状態に達したときにはこのエネルギーの供給と散逸がバランスしていると期待される.

またこの系に最小散逸原理を適用すると $a_x \sum_{i=1}^n (\Delta u_i)^2 + a_y \sum_{i=1}^n (\Delta v_i)^2$ の項および $-na_x \bar{u} (\bar{u} - V_0)$ の項がそれぞれできるだけ 0 に近いときが安定であると考えられる. つまり $(\Delta u_i)^2$ が小さい一方で \bar{u} が 0 または V_0 に近い値を取ればよい. $\bar{u} = 0$ の例としては逆方向に駆動される粒子同士が互いに運動を妨げあい完全に動けなくなってしまう場合があげられる. もう一方の \bar{u} が V_0 に近い値を取るときはそれぞれの粒子がその駆動される向きに V_0 に近い速度で運動している状況である. このような状況は粒子同士のぶつかり合いが少ない構造であるレーン形成の時に実現される. このことからレーン形成は散逸ができるだけ小さくなるうとした結果であると考えられる.

また a_y を減少させた場合, その分散逸項のうち $-a_y \sum_{i=1}^n (\Delta v_i)^2$ の項による散逸の効果が弱まり, その分 $\sum_{i=1}^n (\Delta v_i)^2$ の値が増加しうる. これはレーンと垂直な方向の速度の揺らぎが増大する事を意味し, このことがレーンの不安定化の原因となっている可能性が考えられる.

4 結論

二種類の粒子が存在する系に対向する駆動力が加わる時レーンが形成される現象 [1, 2] 及び, 駆動力が極端に大きいときレーンが作られなくなる現象 [4] については以前から調べられていたが, 今回異方的な散逸を持つモデルを導入することにより, レーンが不安定化し乱雑な動きを示すという駆動力が極端に大きくする場合とは性質の異なるレーン相からレーンが形成されない相への非平衡転移が発見された. またこの乱雑な動きを見せる相は駆動力が比較的小さく, 駆動力と垂直な方向への散逸が小さいときに現れることが分かった.

参考文献

- [1] J. Dzubiella, G. P. Hoffmann, and H. Löwen. Lane formation in colloidal mixtures driven by an external field. *Phys. Rev. E*, Vol. 65, No. 2, p. 021402, Jan 2002.
- [2] M.E. Leunissen, C.G. Christova, A.P. Hynninen, C.P. Royall, A.I. Campbell, A. Imhof, M. Dijkstra, R. Van Roij, and A. Van Blaaderen. Ionic colloidal crystals of oppositely charged particles. *Nature*, Vol. 437, No. 7056, pp. 235–240, 2005.
- [3] John D. Weeks, David Chandler, and Hans C. Andersen. Role of repulsive forces in determining the equilibrium structure of simple liquids. *The Journal of Chemical Physics*, Vol. 54, No. 12, pp. 5237–5247, 1971.
- [4] Xiaoxing Liu, Wei Ge, and Jinghai Li. Non-equilibrium phase transitions in suspensions of oppositely driven inertial particles. *Powder Technology*, Vol. 184, No. 2, pp. 224 – 231, 2008.