レーン形成の運動論

池田昌浩, 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, 粒子シミュレーションにより安定なレーンが形成される相やレーンが不安定となる相があることを示した. 我々はこのレーン形成系のモデルにを元に Enskog equation を用いて流体方程式を導いた. また, この流体方程式をもとにしてレーン形成のメカニズムについて議論を行う.

Kinetic Theory of Lane Formation

Masahiro Ikeda, Hisao Hayakawa

Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto University

Abstract

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 obtain an hydrodynamic equation from this model by Enskog kinetic theory. We will consider the mechanism of the lane formation process by this hydrodynamic equation.

---

1 はじめに

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. また, 以降で述べるように分子動力学シミュレーションで用いたモデルをもとに流体方程式を構築し解析を試みた.

ここでは分子動力学シミュレーションで用いたモデルについて説明を行う. 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た. $\boldsymbol{e}_x$, $\boldsymbol{e}_y$ を x, 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 $a_x(s_iV_0 - u_i)\boldsymbol{e}_x$ と表される. ただし u_i, v_i は粒子 i の速度の x 成分, y 成分であり, x 軸の正 (負) の方向に駆動される粒子は $s_i = +1(s_i = -1)$ 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 $-a_y v_i \boldsymbol{e}_y$ が働く. 粒子 i の運動方程式は

$$m\frac{d\boldsymbol{v}_i}{dt} = a_x(s_iV_0 - u_i)\boldsymbol{e}_x - a_y v_i \boldsymbol{e}_y - \sum_{j\neq i}\frac{\partial\phi(|\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_j|)}{\partial\boldsymbol{x}_i}, \tag{1}$$

と書かれる. ここで $\boldsymbol{v}_i = u_i\boldsymbol{e}_x + v_i\boldsymbol{e}_y$ は粒子の速度, $\phi(r_{ij})$ は粒子間の相互作用ポテンシャルであり, 粒子シミュレーションにおいては Weeks-Chandler-Andersen[3] ポテンシャルを採用している. この運動方程式に表れる項の $-a_x u_i \boldsymbol{e}_x$ と $-a_y v_i \boldsymbol{e}_y$ 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.

この粒子系のシミュレーションにより駆動力 V_0 が大きい時や駆動力に対して垂直な成分の散逸 a_y が小さい時にレーンが不安定化し乱雑な振る舞いを示すことが確かめられた. また不安定化は粒子のスケールとは分離される高波長スケールの揺らぎによっておこっていることから, レーンの不安定化は流体方程式の不安定性により説明できるであろうことが示唆された [4].

そのため粒子系のモデルだけではレーン形成やその安定性を議論するのは困難であり, レーンの不安定化のメカニズムが明らかにするには流体モデルの構築が必要である. そこで, 運動論を用いてミクロな描像をふまえた流体モデルを構築しレーン形成の安定性の解析を行いたい.

2 レーン形成の運動論

粒子シミュレーションでは異方的な散逸を与えたモデルを用いていたが, 運動論による解析では第一段階として駆動力の増加による不安定化のメカニズムについて調べたい. そこでここからは散逸は等方的であるとし (1) 式は次のように修正される

$$m\frac{d\boldsymbol{v}_i}{dt} = a(s_i\boldsymbol{V}_0 - \boldsymbol{v}_i) - \sum_{j\neq i}\frac{\partial\phi(|\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_j|)}{\partial\boldsymbol{x}_i}, \tag{2}$$

ここでは散逸を等方的な場合 $(a_x = a_y = a)$ に限定しているが, a を $a_{11} = a_x, a_{22} = a_y, a_{12} = a_{21} = 0$ となるテンソルとして扱えば異方的な散逸の時もほぼ同様の取り扱いが可能である.

ここでは Enskog equation [5, 6] をもちいてこのモデルについての流体方程式を導くことを試みる. Enskog equation を使った手法は比較的密度の高い気体にも用いられる手法であり, 我々の考えているような高密度系にも適用可能であると思われる. また, レーンの境界部分で密度が低下し, 同時に温度が高くなっており, それぞれ高密度で低温のレーン内部を繋ぐ界面の特徴付が重要であると思われる. 更に, 直線的なレーン界面が不安定化し, 曲がりくねった状態になることがレーンの乱流化そのものになっている. これらのことを踏まえて, 我々は Enskog equation から流体方程式を導出することに成功した. 同時にレーン形成を特徴付ける界面解を導びき, その直線解の安定性を議論する途上にある. また、元の粒子シミュレーションでは WCA ポテンシャルを使用したが, ここでは粒子間の相互作用についてはハードコアとして取り扱う.

3 The Enskog equation

ここで Enskog equation を導入する. ここでは駆動される向きを表す s が $s = +1, -1$ の成分の分布関数がそれぞれ $f^+(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{v}, t), f^-(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{v}, t)$ で表される二成分流体を考える. 分布関数は次の偏微分方程式を満たす.

$$\partial_t f_1^\pm + \boldsymbol{\nabla}_1\cdot(\boldsymbol{v}_1 f_1^\pm) + \boldsymbol{\nabla}_{v_1}\cdot\left(\frac{a}{m}s_1\boldsymbol{V}_0 f_1^\pm\right) - \boldsymbol{\nabla}_{v_1}\cdot\left(\frac{a}{m}\boldsymbol{v}_1 f_1^\pm\right) = J^{\pm,\pm} + J^{\pm,\mp}, \tag{3}$$

ここで $f_1^\pm = f^\pm(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{v}_1, t)$ である. これは任意の $\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{v}_1$ で $f^\pm(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{v}, t)$ が満たすべき位相空間上の連続の式であり, 粒子が衝突するときには運動量が不連続に変化するので衝突の効果は衝突項 $J^{\pm,\pm}, J^{\pm,\mp}$ として取り扱う. ($J^{\pm,\pm}$ は同じ方向に、$J^{\pm,\mp}$ は異なる方向に駆動される粒子同士の衝突を表す。)

ここで $J^{\pm,\mp}$ のみ記載すると（ $J^{\pm,\pm}$ については $\mp$ を $\pm$ に置き換えればよい．）

$$\begin{aligned} J^{\pm,\mp} &= \int d\boldsymbol{v}_2 \int d\boldsymbol{r}_{12}\delta(r_{12}-\sigma)\Theta(-\hat{\boldsymbol{r}}_{12}\cdot\boldsymbol{g}_{12})|\hat{\boldsymbol{r}}_{12}\cdot\boldsymbol{g}_{12}| \\ & \quad \left\{\chi^{\pm,\mp}(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_1+\boldsymbol{r}_{12})f^{\pm}(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{v}_1',t)f^{\mp}(\boldsymbol{r}_1+\boldsymbol{r}_{12},\boldsymbol{v}_2',t)\right. \\ & \quad \left.-\chi^{\pm,\mp}(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_{12})f^{\pm}(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{v}_1,t)f^{\mp}(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_{12},\boldsymbol{v}_2,t)\right\} \end{aligned} \tag{4}$$

と書ける． ここで $\boldsymbol{r}_{12}$ の単位ベクトルを $\hat{\boldsymbol{r}}_{12}$ で表した． この一項目が粒子間の衝突による分布関数の湧き出し，二項目が吸い込みである． 粒子同士は弾性衝突を行うため，$\boldsymbol{r}_1$ の位置を速度 $\boldsymbol{v}_1$ で運動する粒子と，$\boldsymbol{r}_2 = \boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_{12}$ の位置を速度 $\boldsymbol{v}_2$ で運動する粒子とが衝突した場合，衝突後の速度はそれぞれ $\boldsymbol{v}_1' = \boldsymbol{v}_1 - \hat{\boldsymbol{r}}_{12}(\hat{\boldsymbol{r}}_{12}\cdot\boldsymbol{g}_{12})$, $\boldsymbol{v}_2' = \boldsymbol{v}_2 + \hat{\boldsymbol{r}}_{12}(\hat{\boldsymbol{r}}_{12}\cdot\boldsymbol{g}_{12})$ となる (逆に $\boldsymbol{r}_1$ の位置を速度 $\boldsymbol{v}_1'$ で運動する粒子と，$\boldsymbol{r}_1+\boldsymbol{r}_{12}$ の位置を速度 $\boldsymbol{v}_2'$ で運動する粒子とが衝突した場合，衝突後の速度はそれぞれ $\boldsymbol{v}_1$,$\boldsymbol{v}_2$ である)．$\boldsymbol{g}_{12}$ は $\boldsymbol{v}_1$ と $\boldsymbol{v}_2$ の速度差 $\boldsymbol{g}_{12} = \boldsymbol{v}_1 - \boldsymbol{v}_2$ である．衝突が起こる条件は粒子間の距離が粒子直径 σ であり互いの速度が接近する方向を向いている (すなわち $\delta(r_{12}-\sigma)\Theta(-\hat{\boldsymbol{r}}_{12}\cdot\boldsymbol{g}_{12}) \neq 0$ の) ときである．また χ は geometric factor による補正である．衝突による分布関数の変化は $f^{\mp}$ が単位時間に $\delta(r_{12}-\sigma)$ 面上を通過する量に比例するため $J^{\pm,\mp}$ には $|\hat{\boldsymbol{r}}_{12}\cdot\boldsymbol{g}_{12}|$ がかけられている．

こうして得られた (3), (4) 式に対して $1, \boldsymbol{v}_1, \frac{1}{2}|w_1^{\pm}|^2$ をかけ $\boldsymbol{v}_1$ で積分を行うことで流体方程式が導かれる．ここで分布関数から得られる速度場を $\boldsymbol{u}^{\pm}(\boldsymbol{r},t) = \frac{1}{n^{\pm}}\int d\boldsymbol{v}\boldsymbol{v}f^{\pm}$ と定義すると $\boldsymbol{w}^{\pm}$ は $\boldsymbol{w}^{\pm} = \boldsymbol{v} - \boldsymbol{u}^{\pm}$（同様に $\boldsymbol{w}_1^{\pm} = \boldsymbol{v}_1 - \boldsymbol{u}^{\pm}, \boldsymbol{w}_2^{\pm} = \boldsymbol{v}_2 - \boldsymbol{u}^{\pm}$ ）である．

4 Approximate to Maxwell-Boltzmann distribution

ここでは (3), (4) 式に $1, \boldsymbol{v}_1, \frac{1}{2}|w_1^{\pm}|^2$ をかけ $\boldsymbol{v}_1$ で積分を行う計算の過程で使用する近似について述べる．

今回の計算では分布関数をローカルマクスウェル分布としてあつかう．すなわち分布関数は

$$f^{\pm}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{v},t) = \frac{n^{\pm}m}{2\pi T}\exp\left(-\frac{m|w^{\pm}|^2}{2T}\right). \tag{5}$$

と表される．ここで $n^{\pm}(\boldsymbol{r},t)$ はそれぞれの成分の数密度, T は温度であり成分によらないと仮定している．

このとき kinetic stress tensor と熱流は次のように計算される，

$$\sigma_{ij}^{\pm(K)}(\boldsymbol{r},t) = m\int d\boldsymbol{v}w_i^{\pm}w_j^{\pm}f^{\pm} = \delta_{ij}n^{\pm}T, \tag{6}$$

$$\boldsymbol{q}^{\pm}(\boldsymbol{r},t) = \frac{m}{2}\int d\boldsymbol{v}|w^{\pm}|^2\boldsymbol{w}^{\pm}f^{\pm} = 0. \tag{7}$$

さらに衝突項の積分にあらわれる $\boldsymbol{r}_{12}$ は粒子直径 σ の大きさを持ち，σ が流体のスケールと比べて十分小さいとして (4) 式内の $\chi^{\pm,\mp}, f^{\mp}$ について一次の項までの展開を行っている．以上の近似を用いて得られた流体方程式を次章で示す．

5 流体方程式

4 章で述べた近似のもとで (3), (4) 式より流体方程式を導くと以下のようになる．まず (3), (4) 式を $\boldsymbol{v}^{\pm}$ で積分し，(4) 式の積分結果を (3) 式の積分結果に代入することで，密度場に関する式が次のように得られる．

$$\partial_t n^{\pm} + \boldsymbol{\nabla}\cdot(n^{\pm}\boldsymbol{u}^{\pm}) = 0, \tag{8}$$

次に (3), (4) 式に $\boldsymbol{v}^{\pm}$ をかけて $\boldsymbol{v}^{\pm}$ で積分することにより，速度場に関する式が次のように得られる．

$$\begin{aligned} &\partial_t\boldsymbol{u}^{\pm} + (\boldsymbol{u}^{\pm}\cdot\boldsymbol{\nabla})\boldsymbol{u}^{\pm} + \frac{\boldsymbol{\nabla}T}{m} + \frac{T}{m}\boldsymbol{\nabla}\ln n^{\pm} \mp \frac{a}{m}\boldsymbol{V}_0 + \frac{a}{m}\boldsymbol{u}^{\pm} \\ &= -\pi\sigma^2\chi^{\pm,\pm}n^{\pm}\frac{T}{m}\left\{b_{\pm,\pm}\boldsymbol{\nabla}\ln n^{\pm} + \frac{1}{2}\boldsymbol{\nabla}\ln T\right\} \end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&+\pi\sigma^2\chi^{\pm,\mp}n^{\mp}\frac{T}{m}\\
&\left\{-\frac{2}{\sigma}\left(\frac{m}{\pi T}\right)^{\frac{1}{2}}\delta\boldsymbol{u}F\left(-\frac{1}{2},2;-\frac{m}{4T}\delta u^2\right)\right.\\
&-b^{\pm,\mp}\left(1+\frac{m}{8T}\delta u^2\right)\boldsymbol{\nabla}\ln n^{\mp}-\frac{m}{4T}b^{\pm,\mp}\delta\boldsymbol{u}(\delta\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{\nabla})\ln n^{\mp}\\
&+\frac{m}{4T}\delta\boldsymbol{u}(\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{u}^{\mp})+\frac{m}{4T}(\delta\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{\nabla})\boldsymbol{u}^{\mp}+\frac{m}{4T}\delta u_x\boldsymbol{\nabla}u_{\mp,x}+\frac{m}{4T}\delta u_y\boldsymbol{\nabla}u_{\mp,y}\\
&\left.-\frac{1}{2}\boldsymbol{\nabla}\ln T\right\},
\end{aligned}
\tag{9}
$$

ここで $\delta\boldsymbol{u}=\boldsymbol{u}^{+}-\boldsymbol{u}^{-}$, $F(\alpha,\gamma;z)$ は合流型超幾何関数 $F(\alpha,\gamma;z)=\frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\alpha)}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\Gamma(n+\alpha)}{\Gamma(n+\gamma)}\frac{z^n}{n!}$ である.

最後に (3), (4) 式に $\frac{1}{2}|w^{\pm}|^2$ をかけて $\boldsymbol{v}^{\pm}$ で積分することにより, 温度に関する式が次のように得られる.

$$
\begin{aligned}
&\frac{\partial_t T}{m}+\frac{1}{m}\boldsymbol{u}^{\pm}\cdot\boldsymbol{\nabla}T+\frac{T}{m}\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{u}^{\pm}+\frac{2aT}{m^2}\\
=\;&-\pi\sigma^2\chi^{\pm,\pm}n^{\pm}\frac{T}{m}\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{u}^{\pm}\\
&+\pi\sigma^2\chi^{\pm,\mp}n^{\mp}\frac{T}{m}\\
&\left\{\frac{2}{\sigma}\left(\frac{m}{\pi T}\right)^{\frac{1}{2}}\delta u^2F\left(-\frac{1}{2},2;-\frac{m}{4T}\delta u^2\right)\right.\\
&+b^{\pm,\mp}\left(1+\frac{3m}{8T}\delta u^2\right)\delta\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{\nabla}\ln n^{\mp}\\
&-\left(1+\frac{3m}{8T}\delta u^2\right)\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{u}^{\mp}-\frac{3m}{4T}\delta\boldsymbol{u}\cdot(\delta\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{\nabla})\boldsymbol{u}^{\mp}\\
&\left.+\frac{3}{2}\delta\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{\nabla}\ln T\right\},
\end{aligned}
\tag{10}
$$

ここで得られた (8), (9), (10) 式が運動論によって導かれたレーン形成モデルにおける流体方程式である.

6 議論

Enskog equation を用いることでレーン形成モデルの流体方程式を得る事が出来た. ミクロな描像から運動論を元にしてレーン形成の連続体モデル得る試みとしてはこれまでに例がないものと言える. さらに、得られた流体方程式より、一様状態からの安定性解析やレーン形成を特徴付ける界面解を導びきその安定性を議論することでレーン形成のメカニズムについての理解が深まることが予測される. また, (8), (9), (10) 式は密度二成分, 二次元の速度二成分, 温度の合計七変数の複雑な連立微分方程式となっているが、その中からレーン形成の安定性に大きく寄与している要素を選び出すことが行えればレーン形成の本質を知るうえで役立つと考えられる。

参考文献

[1] J. Dzubiella, G. P. Hoffmann, H. Löwen. Phys. Rev. E, **65** (2002) 021402.

[2] M.E. Leunissen, *et al.* Nature, **437** (2005) 235.

[3] John D. Weeks, *et al.* The Journal of Chemical Physics, **54** (1971) 5237.

[4] Masahiro Ikeda, Hirofumi Wada, Hisao Hayakawa. EPL **99** (2012) 68005.

[5] J. T. Willits, B. Ö. Amarson. Phys. Fluids **10** (1999) 3116.

[6] V. Garzó and J. W. Dufty, Phys. Rev. E **59** (1999) 5895.