やわらかな自己推進粒子系における孤立波の衝突と安定性

山中貞人 [1], 太田隆夫 [2,3]

[1] 東京大学 生産技術研究所, [2] 東京大学 理学系研究科 物理学専攻
[3] お茶の水女子大学 ソフトマター教育研究センター

概要

粒子の形状が重心速度に依存して変化する、やわらかな自己推進粒子系の集団ダイナミクスについて、２次元の数値シミュレーションを用いた研究を行った。粒子の運動速度が周囲の密度に比例して増加するという効果を取り入れることで、一様な配向秩序が不安定化され、孤立密度波が誘起されることがわかった。さらに、向かい合って進む２つの孤立密度波は正面衝突した後でも崩壊せず、可積分系におけるソリトンのような振る舞いを示すことを明らかにした。

Collision and stability of solitary waves in a system of deformable self-propelled particles

Sadato Yamanaka[1], Takao Ohta[2,3]

[1] Institute of Industrial Science, The University of Tokyo
[2] Department of Physics, The University of Tokyo, [3] Soft Matter Center, Ochanomizu University

Abstract

The collective dynamics in a system of deformable self-propelled particles is investigated by two-dimensional numerical simulations. When a local density dependence of migration velocity is imposed, a homogeneous ordered state becomes unstable and solitary density waves appear. Furthermore, it is found that a pair of traveling band moving in opposite direction survive head-on collisions just like solitons in integrable systems.

1 はじめに

鳥や魚の群れのように、外部からエネルギーを受け取りつつ自発的に運動する粒子集団は自己推進粒子系とよばれている。その平衡状態から遠くはなれた多粒子系のダイナミクスは、ここ 20 年来、理論と実験の両面から活発な研究が行われている [1]。例えば、群れの形成のダイナミクス、バクテリアといったミクロな自己推進粒子系にみられる様々なパターンの発現、あるいは秩序状態における巨大密度揺らぎなど、非平衡性に起因する多様なダイナミクスの特徴を、シンプルなモデルによって説明することに成功している。

その中でも代表的な Vicsek モデルは、ランダムなノイズを受けつつ、近傍の粒子と速度の方向をそろえる (alignment) ように一定速度で運動する点粒子の動力学モデルである [2]。２次元数値シミュレーションの結果、ノイズ強度を小さくするか、または粒子数密度を高くすると、無秩序状態から速度ベクトルのそろった秩序状態へ転移することがよく知られている。Chaté *et al.* や Bertin *et al.* は Vicsek タイプのモデルを用い、ノイズを大きくしたときに秩序状態から無秩序状態へ転移する臨界点の近傍で、定常的な孤立密度波が現れることを明らかにした [3, 4]。このとき、高密度な帯状の秩序相が、低密度の無秩序相との間の界面に対して垂直な方向に一定速度で進行する。また、秩序相内部の粒子は界面の進行方

向と同じ向きに運動する。このような平衡系ではみられない転移点近傍での孤立密度波が、なぜ安定に存在できるのか、ダイナミクスを支配するメカニズムは何かなど、基本的な問題が数多く残されている。

自己推進粒子系においてしばしばみられる孤立密度波の性質を探るために、本研究ではやわらかな自己推進粒子モデルを用い、詳細な数値シミュレーションを行った。このモデルは、Vicsek モデルとは異なり、排除体積効果をもつ変形可能な粒子の運動を記述するモデルである。これらの自由度に対して、孤立密度波が安定に存在できるのかどうかに着目した。また、Vicsek モデルにおける粒子の速度は一定であるが、近年、バクテリアの集団においては個々の粒子速度がバクテリアの密度に伴って増加するという実験結果が報告されている [5]。この結果をもとに本研究では、各粒子の運動速度がそれぞれの局所的な密度の増加関数である場合を考え、孤立密度波のダイナミクスに与える影響を調べた。

2　やわらかな自己推進粒子モデル

本研究で用いるやわらかな自己推進粒子モデルは、i 番目の粒子の重心位置 $\mathbf{r}^{(i)}$、運動速度 $\mathbf{v}^{(i)}$、変形テンソル $S^{(i)}$ に関して次の微分方程式で与えられる [6, 7, 8]：

$$\dot{r}_\alpha^{(i)} = v_\alpha^{(i)}, \tag{1}$$

$$\begin{aligned}\dot{v}_\alpha^{(i)} &= \gamma(\rho^{(i)})v_\alpha^{(i)} - |\mathbf{v}^{(i)}|^2 v_\alpha^{(i)} - aS_{\alpha\beta}^{(i)}v_\beta^{(i)} \\ &\quad + f_\alpha^{(i)} + \xi_\alpha^{(i)},\end{aligned} \tag{2}$$

$$\dot{S}_{\alpha\beta}^{(i)} = -\kappa S_{\alpha\beta}^{(i)} + b\left(v_\alpha^{(i)}v_\beta^{(i)} - \frac{\delta_{\alpha\beta}}{2}|\mathbf{v}^{(i)}|^2\right). \tag{3}$$

本研究では係数 κ、a、b を正の定数とする。変形テンソルは楕円状粒子の形状を決めるトレースレスな２階対称テンソルであり、次で定義される：

$$S_{\alpha\beta}^{(i)} \equiv s_i\left(n_\alpha^{(i)}n_\beta^{(i)} - \frac{1}{2}\delta_{\alpha\beta}\right). \tag{4}$$

ここで、s_i は変形の度合いを表すスカラー変数、$\mathbf{n}^{(i)} = (\cos\theta_i, \sin\theta_i)$ は楕円長軸に平行な単位ベクトルであり、$S^{(i)}$ は s_i と θ_i を未知変数にもつ。いま粒子間相互作用 $\mathbf{f}^{(i)}$ およびノイズ $\boldsymbol{\xi}^{(i)}$ を無視したとき、負の γ に対して粒子は円形のまま静止する一方で、正の γ に対しては有限の速度をもち変形が誘起される。$b > 0$ のとき、粒子は楕円長軸に対して平行に直線運動することがわかっている [6]。式 (2)、(3) における速度ベクトルと変形テンソルとの非線形なカップリングによって、運動速度が大きいほど変形の度合いは大きくなる。

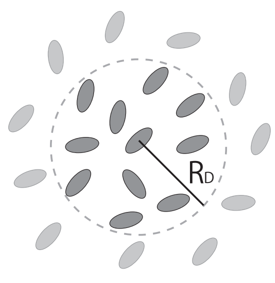

図 1: 局所密度の定義。i 番目の粒子の周りの局所密度を、$\rho^{(i)} = N_i/(\pi R_D^2)$ によって定義する。ここで、N_i は粒子の重心から半径 R_D の円に含まれる粒子数である。ただし、N_i に i 番目の粒子自体は含まれないとする。

運動方程式 (2) の右辺第１項について、係数 γ は粒子の定常状態における運動速度を決める。ここで i 番目の粒子の局所密度 $\rho^{(i)}$ を、図１のように重心から半径 R_D の円に含まれる粒子の数密度として定義する：$\rho^{(i)} = N_i/(\pi R_D^2)$。$N_i$ は円に含まれる粒子の数である。ただし、中心の粒子はカウントしない。本研究では粒子の局所密度 $\rho^{(i)}$ が高いほど運動速度が増加すると仮定し、γ を次式で定めることにする：

$$\gamma(\rho^{(i)}) = \gamma_0 + \gamma_1\left(\frac{\rho^{(i)}(t)}{\rho_0} - 1\right). \tag{5}$$

ρ_0 は系全体の粒子数密度であり、システムサイズを $L_x \times L_y$、全粒子数を N としたとき、$\rho_0 = N/(L_xL_y)$ とかける。また係数 γ_0、γ_1 を正の定数とする。

つぎに、運動方程式 (2) の右辺第４項は i 番目の粒子が受ける力を表しており、２粒子間相互作用の和で与えられる：

$$\mathbf{f}^{(i)} = K\textstyle\sum_{j=1}^{N}\mathbf{F}_{ij}Q_{ij}. \tag{6}$$

K は正の定数とする。添字 i の繰り返しは、和を表すものではない。いま $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}^i - \mathbf{r}^j$ とおいたとき、$\mathbf{F}_{ij}$ はガウス型ポテンシャル $U(\mathbf{r}_{ij}) = \exp[-\mathbf{r}_{ij}^2/(2\sigma^2)]$ から受ける斥力 $\mathbf{F}_{ij} = -\partial U(\mathbf{r}_{ij})/\partial\mathbf{r}_{ij}$ を表すとする。また Q_{ij} は変形テンソルに依存した係数で、

$$Q_{ij} = 1 + \frac{Q}{2}\mathrm{tr}\left(S^{(i)} - S^{(j)}\right)^2, \tag{7}$$

と定義する。ここで式 (4) を用いると、粒子 i と j の長軸方向が一致するときに式 (7) の右辺第２項が小さくなり、２粒子間の斥力が弱まることがわかる。つまり、式 (6) は alignment 効果を伴うガウス斥力相互

作用を表している。さらに、第５項は白色ガウスノイズを表し次を満たす：$\langle \xi_\alpha^{(i)} \rangle = 0, \langle \xi_\alpha^{(i)}(t)\xi_\beta^{(j)}(t') \rangle = \eta^2 \delta_{ij}\delta_{\alpha\beta}\delta(t-t')$。ここで、$\eta$ はノイズの強さを表すパラメータである。

最後に、本研究では系の配向秩序を定量化するために、次の大域的なオーダーパラメータ Φ を用いることにする：

$$\Phi = \left| \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} e^{2i\theta_j} \right|. \tag{8}$$

ここで、θ_j は粒子 j の楕円長軸方向の角度を表す。粒子の長軸方向が完全にそろった秩序状態では $\Phi = 1$、ばらばらな無秩序状態では $\Phi = 0$ となる。

最後に先行研究では、局所密度依存性がない場合 ($\gamma_1 = 0$) の、密度 ρ_0 とノイズ強度 η に関する相図が得られている [8]。他のさまざまな自己推進粒子モデルと同様、ノイズ強度が減少するかあるいは粒子数密度が増加するときに、無秩序状態から秩序状態へ転移することがわかっている。またやわらかな自己推進粒子モデルでは、密度をさらに増加させたとき、再び無秩序状態へ不安定化するいわゆるリエントラント転移が起こることがわかっている。これは、高密度状態における振る舞いが特徴的な、ガウス型斥力相互作用が原因の１つと考えられている。

3　数値シミュレーションの結果

本研究では、上記のやわらかな自己推進粒子モデルに対し、周期境界条件を用いた２次元の数値シミュレーションを行った [9]。次のパラメータは固定した：$\kappa = a = \sigma = 1$、$b = 0.5$、$K = R_D = 5$、$Q = 50$。

はじめに、運動速度に対する局所密度依存性がない場合 ($\gamma_1 = 0$) のモデルについて数値シミュレーションを行った。なお、$\gamma = \gamma_0 = 1, N = 8192$ とした。その結果、密度が $\rho_0 = 0.04, 0.03$ のとき、ノイズによって誘起される秩序-無秩序転移点の近傍で孤立密度波が現れることがわかった。用いたノイズ強度は $\rho_0 = 0.04, 0.03$ に対してそれぞれ $\eta = 0.6, 0.5$ である (先行研究 [8] によれば、それぞれの密度における転移点は $\eta_c = 0.7, 0.6$ である)。この孤立密度波は、(a) 転移の近傍で現れる点、(b) 高密度な帯状の秩序相が界面に対して垂直な方向に進行する点、(c) 秩序相内部の粒子は界面の進行方向と同じ向きに運動する点で、Vicsek タイプモデルにおいて発見された孤立波と同様の現象であるといえる。さらに、粒子を孤立波の前面から取り込み、後方から排出することで、孤立波は定常的に伝搬する。このことは、孤立波が内部の粒子よりも速い速度で伝搬していることを表している。

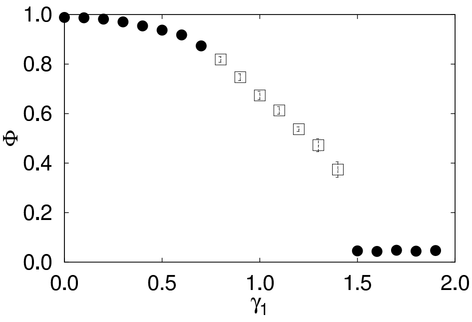

図 2: 局所密度依存性の強さ γ_1 に対する、定常状態におけるオーダーパラメータ Φ の振る舞い。パラメータは $\gamma_0 = 0.5, N = 512, \rho_0 = 0.06$。各点の値は５回の独立なシミュレーションにわたる平均値、エラーバーはその標準偏差を表す。

つぎに、局所密度依存性の強さをあらわすパラメータ γ_1 によって、系の定常状態がどのように振る舞うのかを調べた。ここでは簡単のためにノイズは無視し ($\eta = 0$)、密度を $\rho_0 = 0.06$、粒子数を $N = 512$ とした。図２は、無秩序状態からシミュレーションを開始して系が定常状態へ緩和したときのオーダーパラメータ Φ を、γ_1 の関数として表したものである。$\gamma_1 = 0$ では一様な秩序状態が現れるのに対して、γ_1 が増加するにつれて Φ は減少し、$\gamma_1 \geq 1.5$ において無秩序状態へと不安定化することがわかった。これは、局所密度依存性が強い場合には、揺らぎによって速く運動する小さなクラスターができるものの、その周りを取り囲む多くの遅い粒子に阻害されてクラスターが成長できないためだと考えられる。

また、図２において四角で示された点において、孤立密度波が現れることがわかった。孤立波の形状は、図 3(a) に示したスナップショットと同様である。孤立波の波面に対して垂直な方向の密度分布を調べたところ、波の前面では急激に密度が増加し、後方ではなだらかに減少していることがわかった。また、上に述べた局所密度依存性がないときに現れる孤立波の性質 (a)-(c) は共通している。

しかしながら、粒子数の多い大規模な系においては、局所密度依存性の有無によって孤立密度波の振る舞いが大きく異なることがわかった。つぎに、システムサイズが $L_x = 640, L_y = 213.33$、粒子数が $N = 8192$ の系でシミュレーションを行った結果を示す ($\gamma_0 = 0.5$、$\gamma_1 = 1.3$、$\rho_0 = 0.06$、$\eta = 0$)。このような大規模な系では、幅の異なる２つ以上の孤

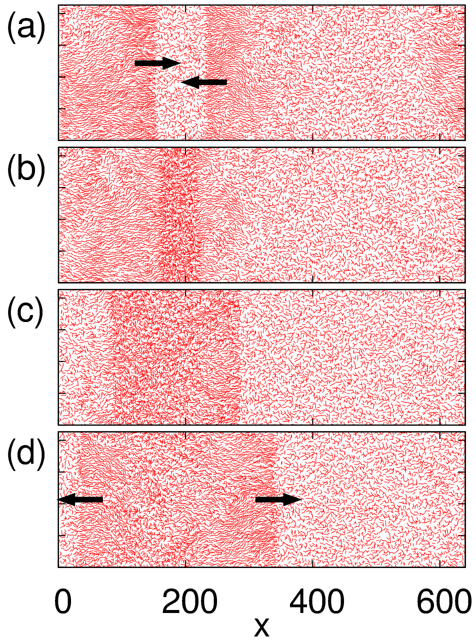

図 3: 孤立密度波が衝突する前後のスナップショット [9]：$(a)t = 5636, (b)t = 5676, (c)t = 5716, (d)t = 5756$。矢印は孤立波の進行方向を表す。パラメータは $\gamma_0 = 0.5, \gamma_1 = 1.3, N = 8192, \rho_0 = 0.06$。

立波が現れることが可能である。幅の広い孤立密度波は後方での配向揺らぎが強いことから、しばしば反対方向へ進行する細い孤立波が分裂する現象がみられた。本研究の重要な結果のひとつとして、こうしてできた２つの波は周期境界条件のためにもとの太い孤立波と衝突した後、秩序を取り戻し再び安定に進み続けることがわかった。図３に、衝突前後のスナップショットを示す。さらに、局所密度依存性のない場合の孤立密度波と比較するため、２つの孤立密度波が向かい合った状態を初期状態として数値シミュレーションを行った ($\gamma_1 = 0, \gamma_0 = 1.0, \eta = 0.5, 0.6, \rho_0 = 0.039, N = 7944$)。その結果、２つの波は 1、2 回の衝突の後に消滅し、新しい波が自発的に現れることがわかった。したがって、局所密度依存性は密度波の衝突に関して中心的な役割を果たしていると考えられる。

4　考察とまとめ

本研究では、粒子の運動速度が局所密度に依存するやわらかな自己推進粒子モデルを用いて、非平衡な秩序-無秩序転移のダイナミクスについて研究を行った。局所密度依存性がなくノイズ強度が強いときに、秩序-無秩序転移点の近傍で孤立密度波が現れることがわかった。やわらかな自己推進粒子モデルは、点粒子の運動を記述する Vicsek モデルと異なり、粒子の変形と粒子間の斥力相互作用が考慮されていることから、これらの自由度は孤立密度波の形成に対して安定であることがわかった。

また、粒子の運動速度を局所密度の増加関数としたとき、ノイズがない場合でも孤立密度波が現れ、そのうえ正面衝突に対して安定であることがわかった。このことは、定性的には次のように考えることができる。孤立波が衝突している領域 (図 3(b)、(c)) では粒子の速度が密度依存性のために増加し、変形の度合いが強くなるために alignment が促進され、容易に孤立波が回復できると考えられる。その一方で、密度依存性がないときの孤立波が衝突に対して不安定なのは、一旦衝突して無秩序化すると強いノイズのために回復できないからだと考えられる。

最近では、走化性のない粘菌の変異体を用いた実験において、粘菌のつくる孤立密度波が衝突に対してソリトン的な振る舞いを示すことがわかっている [10]。本研究での数値シミュレーションと実験とを比較すると、特に衝突の最中で粒子の振る舞いが大きく異なることがわかっている [11]。しかしながら、ソリトン的な孤立密度波の衝突現象について不明な点は数多く残っている。粒子速度の局所密度依存性によって孤立波が衝突に対してなぜ安定になるのか、粒子のやわらかさはダイナミクスに影響を及ぼしているのかなどが今後の課題である。

参考文献

[1] T. Vicsek and A. Zafeiris, Phys. Rep. **517**, 71 (2012).
[2] T. Vicsek, A. Czirók, E. Ben-Jacob, I. Cohen, and O. Shochet, Phys. Rev. Lett. **75**, 1226 (1995).
[3] H. Chaté, F. Ginelli, G. Grégoire, and F. Raynaud, Phys. Rev. E **77**, 046113 (2008).
[4] E. Bertin, M. Droz, and G. Grégoire, J. Phys. A:Math. Theor. **43**, 445001 (2009).
[5] A. Sokolov, I. S. Aranson, J. O. Kessler, and R. E. Goldstein, Phys. Rev. Lett. **98**, 158102 (2007).
[6] T. Ohta and T. Ohkuma, Phys. Rev. Lett. **102**, 154101 (2009).
[7] Y. Itino, T. Ohkuma, and T. Ohta, J. Phys. Soc. Jpn. **80**, 033001 (2011).
[8] Y. Itino and T. Ohta, J. Phys. Soc. Jpn. **81**, 104007 (2012).
[9] S. Yamanaka and T. Ohta, arXiv:1307.6709 [cond-mat.soft]
[10] H. Kuwayama and S. Ishida, Sci. Rep. **3**, 2272 (2013).
[11] T. Ohta and S. Yamanaka, Prog. Theor. Exper. Phys. (submitted).