

対向する自己駆動粒子系におけるレーン形成と その動的な転移の解明

池田光佑¹, 金鋼²

¹ 新潟大学 大学院自然科学研究科 数理物質科学専攻

² 大阪大学 大学院基礎工学研究科 物質創成専攻 化学工学領域

概要

自己駆動系における自己組織化現象のひとつであるレーン形成現象に対して粒子シミュレーションによる研究をおこなった。そこでは自己駆動しながら進行する歩行者を構成要素が一定方向へ駆動されるブラウン粒子としてモデル化している。レーン形成率, 輸送効率, 界面長, レーン幅及びレーン形成の特性時間を定量化することによってレーン形成の過程と条件を特定し, レーン形成現象の背後にある物理的なメカニズムを理解することを目指した。駆動力の大きさを決める最適速度とレーン形成を促進する異方的な散逸性を援用したシミュレーションをおこなったところ, 系の状態が無秩序, レーン形成の2つに分けられることがわかった。この結果は最適速度, 異方的な散逸という2つの効果の競合により対向する自己駆動粒子のレーン形成という協調運動をもたらしているものと考えられる。さらに, 密度依存性とシステムサイズ依存性についての解析から, 無秩序-レーン形成転移が動的なクロスオーバー転移であることを示している。レーン幅と特性時間, 及び輸送効率と界面長のスケーリング関係を定量化することで, レーン形成過程の詳細なメカニズムを明らかにしている。

Lane formation dynamics of oppositely self-driven particles

Kosuke Ikeda¹ and Kang Kim²

¹Graduate School of Science and Technology, Niigata University

² Division of Chemical Engineering, Graduate School of Engineering Science, Osaka University

Abstract

Lane formations are observed in various self-driven systems such as pedestrians in narrow passage, plus and minus oppositely charged colloidal mixture, and so on. This lane formation from a disorder to ordered state under the external field is the marked example of the non-equilibrium transition. Here, we examine the lane formation dynamics in the oppositely self-driven particle system in the two-dimensional systems by using molecular dynamics method based on the literature. The system consists of an equimolar binary mixture in the square cell with the periodic boundary condition. To explore the detailed process of the lane formation, we calculate the order parameter of the lane formation, the transport efficiency, and the lane width for various number densities. Furthermore, the strong finite size effect is observed in the present self-driven system. This size effect implies that the lane formation transition is not characterized by the analogy with the conventional scaling scenario of the critical phenomena.

1 はじめに

集団の運動における自己組織化は日常生活において様々な場面で見ることができる。例えば、魚や鳥は自発的に群れをなして移動し、歩行者の集団も混雑状況で自然に列をなして歩行する。これらの共通点は構成要素が周囲の環境にあわせて自己を駆動させて運動していることであり、このようなアクティブ性が動的な秩序化を生じさせていると考えられる [1].

本研究では、アクティブ性が引き起こす自己組織化の中で、対向する構成要素が進行しながら自発的にレーンを形成する現象に着目している。ここでレーンとは、構成要素同士が進行方向に連なり列となって運動することを指す。構成要素が自己駆動して生じるレーン形成に対して、格子モデルを用いた数理的手法と粒子シミュレーションによる研究と大きく分けて2つの研究アプローチがある。後者のうち代表的なものは Helbing によるものであり、歩行者を2次元円盤粒子とモデル化し統計物理学的な手法を用いて研究をおこなっている [2]. この Helbing によるシミュレーションモデルは Social Force と呼ばれ歩行者間の相互作用を (1) 粒子間ポテンシャル, (2) 自己の速度に応じて変化する駆動力, (3) 接触粒子間の摩擦力, (4) ノイズという4つの要素からなるとしている。Helbing らの研究は歩行者集団のふるまいや、避難時の待避行動等をシミュレーションすることに成功してきた。特に現実に対応する状況を境界条件として与えることに重点を置き多様なシミュレーションが報告されているが、“なぜレーンができるのか”, “どのような過程なのか” といったレーン形成の基礎的なメカニズムについて十分な知見が得られているとは言えない。最近の Social Force を用いたシミュレーション研究として、池田らは系の境界条件の影響を排除し、自己駆動型レーン形成現象の成立条件を探索する研究を行った [3]. そこではレーン形成を促進させる異方的な散逸をモデルに導入しており、周期境界条件下での自己駆動型レーン形成に対して最適速度、摩擦係数依存性を明らかにした。ただし、ノイズは考慮されず、調べられた数密度は限定的であった。

一方、自己駆動型とは異なるレーン形成現象が正負に帯電するコロイドやプラズマに一樣な外場を印加することによって生じることが知られている。このような外場により駆動されて起こるレーン形成を2000年初頭から研究しているのが Löwen らのグループ

である [4, 5]. Löwen らは外場駆動型レーン形成に対する分子シミュレーションをおこない、密度依存性とシステムサイズ依存性を系統的に解析している。そこで駆動力の増加に伴ってレーンが出現することを見出しており、レーン形成に必要な臨界駆動力を定量化している。臨界駆動力は数密度の増加とともに増加することが報告されている。さらに同一な数密度でシステムサイズ依存性を検証し、粒子数の増加に対する臨界駆動力の増加傾向が発散的であることを示している。この結果は無限系ではレーン形成能率が消滅することを意味している。つまり外場駆動型の無秩序-レーン形成転移は臨界的でなく動的なクロスオーバー転移であることがわかっている。

以上、対向する構成要素の集団が示すレーン形成現象の先行研究をまとめると、外場駆動型レーン形成に対する駆動力、密度、システムサイズ依存性は系統的に解析されているが、自己駆動型レーン形成現象の基本的メカニズムは完全には解明されていない。特に密度依存性とシステムサイズ依存性に関する統一された解析がなかったことから、これを克服することが本研究の目的である。これにより無秩序-レーン形成転移における外場駆動型と自己駆動型とのあいだにある類推と差異を明らかにすることができる。

2 シミュレーション手法

本研究で用いたモデル方程式を説明する。2次元系において構成要素である円板粒子 N 個が1辺 L の正方形領域中に存在する状況を考える。粒子 i の運動方程式は

$$m \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = - \sum_{j \neq i} \nabla \phi(r_{ij}) - \Gamma \mathbf{v}_i + \mathbf{R}_i(t) + \mathbf{F}_d \quad (1)$$

で与えられる。ここで、粒子間相互作用はソフトコアポテンシャル $\phi(r_{ij}) = \epsilon(\sigma/r_{ij})^{12}$ による斥力であり、 r_{ij} は粒子間距離、 σ は粒子直径、 ϵ はエネルギー、 m は粒子質量をあらわす。 Γ と $\mathbf{R}_i(t)$ はそれぞれ揺動散逸定理を満たす摩擦係数と揺動力をあらわしており、 \mathbf{F}_d は Helbing の Social Force に基づく自己駆動力である。系は対称2成分系であるとし、各粒子の自己駆動力 \mathbf{F}_d は x 軸正負方向にはたらく。各粒子には駆動方向に関する符号 $s_i = \pm 1$ が割り当てられ、したがって自己駆動力は

$$\mathbf{F}_d = -\gamma_x(v_{ix} - s_i V_0) \mathbf{e}_x - \gamma_y v_{iy} \mathbf{e}_y \quad (2)$$

とあらわされる。ここで γ_x は各粒子が持つ瞬間的な速度の x 成分と最適速度 V_0 との差に対する摩擦係

数であり, $\gamma_x = 1$ に固定している. また駆動方向と垂直な方向 (y 軸方向) に摩擦係数 γ_y を導入している [3]. この γ_y により進行方向に垂直な方向への揺らぎが抑制され, 同種粒子の進行方向への整列を促進させる効果があると期待される.

シミュレーションは全ての方向に周期境界条件を課しており, 初期条件は駆動力のない熱平衡状態によって与えられる. つまり, 時刻 $t = 0$ で均一な無秩序状態である粒子に自己駆動力がはたらき, 定常状態でレーンが形成される過程を解析している. また, シミュレーション結果は質量 m , 長さ σ , 時間 $t = \sqrt{m\sigma^2/\epsilon}$ を用いて無次元化されている.

シミュレーション結果を解析するためにレーン形成を特徴づけるパラメータを定義している. 最初に, レーンが形成されているかどうかを定量化する, レーン形成率を以下のように与える [3]. まず, 系全体を y 方向に対して等間隔の幅を持った x 方向に細長い長方形領域に分割する. 長方形が持つ y 軸方向の幅は粒子直径 σ 程度とし, 長方形数を $N_t = [L/\sigma]$ とガウス記号を用いて整数値で与える. 分割した領域 i 内での正方向に駆動されている粒子数 n_i^+ と負方向に駆動されている粒子数 n_i^- として, 両者の差を総粒子数で割ったものをその長方形 i の符号付きレーン形成率とし, $\psi_i = (n_i^+ - n_i^-)/(n_i^+ + n_i^-)$ と表される. この符号付きレーン形成率は正方向に駆動される粒子が多数ならば正に, 負方向に駆動される粒子が多数ならば負になる. この絶対値を全長方形で平均することで, 系全体におけるレーン形成率を $\Psi = (1/N_t) \sum_{i=1}^{N_t} |\psi_i|$ と与える. 定義より $0 \leq \Psi \leq 1$ となり, 長方形内で同種粒子が凝集して多数派になればレーン形成率は 1 に近づき, 異種粒子が同数ずつ存在すればレーン形成率は 0 となる. また, 粒子流れの効率の良さを輸送効率 e_v によって定量化する. これを, 1 粒子の x 軸方向の加速度が 0 になるときの定常速度に対する x 軸方向の平均速度の比で定義した.

形成されたレーンの幾何構造を評価するパラメータとしてレーン数 N_L , レーン幅 W_L , 界面長 ξ を定義した. 局所的な符号付きレーン形成率 ψ_i に対して閾値以上となる長方形領域のみを抽出する. 隣接した長方形間で符号付きレーン形成率の符号 ψ_i を比較し, 異符号であればそこがレーン間の界面であると判断し, この界面の数をレーン数 N_L と定義する. 同符号であれば連続したレーンであると判断し, 同符号であった合計回数をレーン数 N_L で割ること

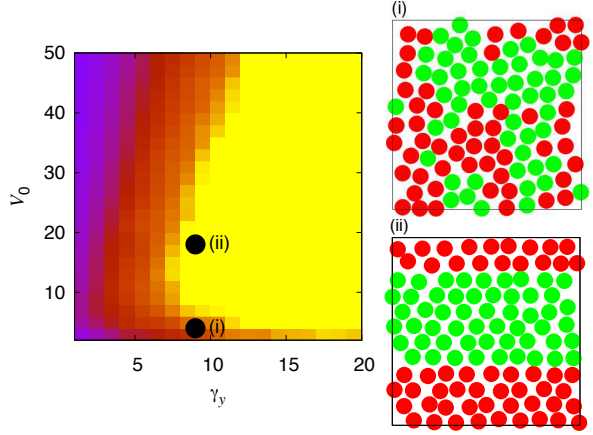


図 1: レーン形成率の V_0, γ_y 依存性. 紫から黄色になるにつれレーン形成率が高くなることをあらわしている. スナップショットから, 最適速度 V_0 の増加により無秩序状態 (i) からレーン形成状態 (ii) に変化することがわかる.

で 1 レーンあたりのレーン幅 W_L と定義する. 定義より関係式 $L/N_L = W_L + \xi$ が成り立ち, レーン数 N_L とレーン幅 W_L から界面長 ξ を求めることができる. 左辺は系の 1 辺のうち 1 レーンあたりが占める長さをあらわしており, レーン幅と界面長の和に等しいことを意味する. さらに, レーン形成過程の特性時間 τ をレーン形成率 Ψ の時間変化に対して $\Psi(t) = \Psi_{st} (1 - e^{-t/\tau})$ とすることにより決めた. ここで Ψ_{st} は定常状態におけるレーン形成率をあらわしている.

3 結果と考察

図 1(a) は数密度 $\rho = N/L^2 = 0.8$ におけるレーン形成率 Ψ の最適速度 V_0 , 滑り摩擦係数 γ_y 依存性と, 状態 (i), (ii) のスナップショットをあらわす. 状態 (i) に比べ状態 (ii) は滑り摩擦係数は同一であるが最適速度 V_0 が大きく, 最適速度を変化させたときのレーン形成の典型的な様子がわかる. 図 1 で与えられる動的相図より, 最適速度 V_0 , 滑り摩擦係数 γ_y がいずれも一定値以上のときにレーンを形成することがわかる. レーン形成に至る過程では, 対向する粒子が衝突した際に駆動方向に垂直な方向に互いに押し出され, これを繰り返しながら同種粒子が集合し整列する. 対向粒子同士の衝突は V_0 が増加するほど頻繁になるが, γ_y が増加することで衝突後の y 軸方向への拡散が抑制される. その 2 つの効果により, V_0 と γ_y が大きくなるほど同種粒子の凝集を促し, 同一進

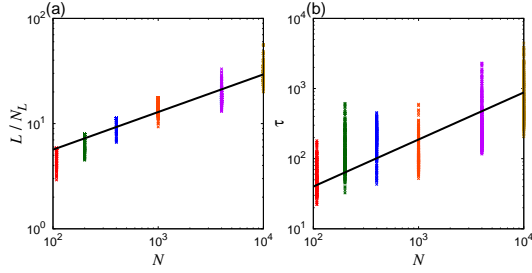


図 2: (a): 1 本のレーンが占める長さ L/N_L , (b): 特性時間 τ の粒子数依存性. 各システムサイズにおいて, レーン形成率 Ψ が 0.8 以上である状態の値をプロットしている. 両者ともに粒子数に対して発散する傾向を示しており, 無秩序-レーン形成転移が臨界的ではないことを意味している.

行方向へのレーン形成がもたらされる.

レーン形成率に対する密度依存性の解析から, 高密度ほどレーン形成率が減少していることがわかった. レーン形成過程において平均粒子間距離が短いほど粒子位置の入れ替えが起りにくい. したがって密度が高いほど同種粒子は整列しにくく, その結果レーン形成率が低下する. また, 高密度ほどレーン数が減少する傾向にあることがわかった. 低密度では粒子間距離が長いため, 衝突後の連鎖衝突が起りにくく, 初期配置の近傍でレーンを形成しやすくレーン数が増加する傾向にある. これに対して高密度では粒子間距離が短く, 衝突の影響が広範囲かつ多体に及ぶことになる. その結果, レーンが形成されるまでの移動距離が増加し, 同種粒子の集合が促されレーン数は減少する. 以上の結果は外場駆動型レーン形成と本質的な違いはない.

数密度 $\rho = 0.8$ でのシステムサイズ依存性の解析により, 系の一辺の長さ L とレーン数 N_L の比 L/N_L は粒子数の増加に伴って発散する傾向があることがわかった. 図 2(a) は L/N_L の粒子数依存性をあらわしており, 平均的に $L/N_L \propto N^{0.4}$ で増加している. L/N_L が 1 本のレーンが占める平均的な長さであることから, 無限系で特徴的なレーン幅が定まらないことを示している. 同様に無秩序状態からレーンを形成するに至る特性時間 τ も粒子数の増加に伴って発散する傾向にあることを見出した. 図 2(b) は特性時間 τ の粒子数依存性をあらわしており, $\tau \propto N^{0.7}$ で増加している. この特性時間 τ の粒子数に対する発散より, 自己駆動系における無秩序-レーン形成転移は外場駆動型レーン形成と同様に臨界的ではなく動的なクロスオーバー転移であると結論づけられる.

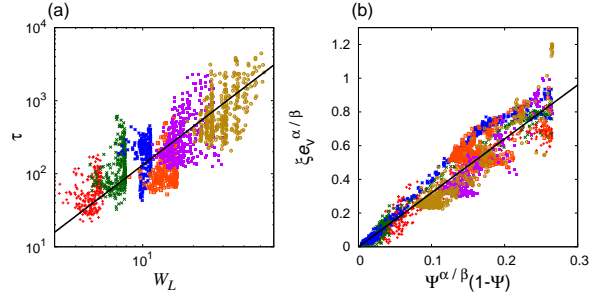


図 3: (a): レーン幅 W_L と特性時間 τ の関係. レーン幅 W_L の増加によりレーン形成が困難になり, 特性時間 τ は増加する. (b): レーン形成率 Ψ , 輸送効率 e_v , 界面長 ξ は, $(\xi e_v^{\alpha/\beta}) / (\Psi^{\alpha/\beta} (1 - \Psi)) = \text{const.}$ を通して関係している.

また, レーン幅 W_L は $W_L \propto N^{0.4}$ というシステムサイズ依存性があることがわかり, したがって特性時間と $\tau \propto W_L^{1.8}$ というスケーリング関係が得られる (図 3(a)). レーン幅 W_L が増加するほどレーン形成に至るまでの粒子の移動距離が増加し, それに伴いレーン形成に至る時間 τ が増加することを示している.

さらに, 輸送効率 e_v と界面長 ξ がレーン形成率 Ψ を通して $e_v \propto N^{-\alpha\Psi}$, $\xi \propto N^{\beta}(1 - \Psi)$ というシステムサイズ依存性を示し, $\alpha \simeq 0.5$, $\beta \simeq 0.6$ であることを見出した. これらより関係式 $(\xi e_v^{\alpha/\beta}) / (\Psi^{\alpha/\beta} (1 - \Psi)) = \text{const.}$ を得ることができる (図 3(b)). これは, レーン形成率 Ψ が 1 に近い場合でも界面長 ξ が厚くなると, 対向粒子と衝突する粒子が界面中に多数存在し, これに伴い輸送効率 e_v が低下することを意味している.

参考文献

- [1] T. Vicsek, *et al.*, Phys. Rev. Lett. **75**, (1995) 1226.
- [2] D. Helbing, Rev. Mod. Phys. **73** (2001) 1067.
- [3] M. Ikeda, H. Wada and H. Hayakawa, EPL **99** (2012) 68005.
- [4] T. Vissers, *et al.*, Soft Matter, **7** (2011) 2352.
- [5] T. Glanz and H. Löwen, J. Phys.: Condens. Matter, **24** (2012) 464114.