

非対称散逸粒子系の揺動散逸関係の解析

石渡 龍輔¹, 矢口 令朗², 杉山 雄規¹

¹ 名古屋大学 大学院情報学研究科 複雑系科学専攻,

² 名古屋大学 大学院情報科学研究科 複雑系科学専攻

概要

非対称相互作用を含む散逸系である線形化された BL-OV の揺動散逸関係を調べる.

Analysis of the fluctuation dissipation relation in a dissipative system with asymmetric interactions.

Ryosuke Ishiwata¹, Reo Yaguchi², Yuki Sugiyama¹

¹ Department of Complex Systems Science, Graduate School of Information,
Nagoya University,

² Department of Complex Systems Science, Graduate School of Information Science,
Nagoya University

Abstract

We investigate the Fluctuation-Dissipation-Relation in an asymmetric dissipative system using a linearized BL-OV model.

1 はじめに

魚や鳥や昆虫の群れの移動, 自動車の交通流, 人間の歩行者流, アメーバの凝集運動などは, 自己駆動する物体により創発される集団運動として研究されている. 自己駆動する物体を質点として取りあつかう場合, そのような物体を自己駆動粒子とよぶ¹. 自己駆動粒子は, 粒子自身の自己駆動力によって推進し, 自己駆動粒子間に働く相互作用は作用・反作用や運動量保存の法則を満たさない. この相互作用は, 非対称相互作用と呼ばれており [1], 自己駆動する物体間に働く基本的な力と考えられる. 非対称相互作用は, エネルギーの散逸とともに導入されることで, 自己駆動粒子系にみられる集団運動を特徴付けている. エネルギー散逸と非対称相互作用を含む物理系は, 非対称散逸系 (Asymmetric Dissipative System) ともよばれる [1].

¹質点もしくは連続体として取り扱われる自己駆動する物体は, アクティブマターと広くよばれるようになってきている.

集団運動を特徴づける巨視的な物理量を発見することは, 非対称散逸系という新奇な物理系においても重要であると考えられる. 非対称相互作用を含む物理系は, ヘルムホルツ条件を満たしていないため, 形式的にラグランジアンをもとめることができないため [2], ラグランジアン (ハミルトニアン) を介さずに巨視的な量を定義する方法が必要であろう². この要求にたいして解析的に取り組んだ研究が, Fluctuation-Dissipation-Relation (FDR), Fluctuation-Relation (FR) などであろう [3, 4, 5].

本研究では, 非対称相互作用を含む自己駆動粒子の FDR に着目した. これまで, 自己駆動粒子の Vicsek モデル³において, 平衡状態に基づいたナイーブな FDR の破れが観察されること, 異なるアプローチで弱い熱ゆらぎのもとで FDR が成立することが報告

²異なるアプローチとして, ヘルムホルツ条件を満たすように助変数を加えて形式的なラグランジアンを求める方法が考えられる.

³文献によって導入された自己駆動粒子のモデルである.

されている [6, 7]. 本研究では, 非対称散逸系における FDR の一般的な性質をより深く理解するために, Vicsek タイプではない拡張された最適速度モデルにもとづいた FDR を調べた [8]. その結果を報告する.

2 線形 BL-OV モデルとばねモデル

2.1 線形化された BL-OV モデル

BL-OV モデルは, 拡張された最適速度モデルであり [9], 各粒子 (粒子番号 $n = 1, 2, \dots, N$) は以下の運動方程式にしたがって運動する:

$$\frac{d^2 x_n}{dt^2} = a \left\{ [V_F(x_{n+1} - x_n) + V_B(x_n - x_{n-1}))] - \frac{dx_n}{dt} \right\}. \quad (1)$$

パラメーター a は, 各粒子共通に応答時間を決定する「感応度」をあらわしている. V_F, V_B は, それぞれ前方粒子間隔 $x_{n+1} - x_n$ と後方粒子間隔 $x_n - x_{n-1}$ にもとづく相互作用力であり, 相互作用の大きさは $V_F(x) = \alpha' [\tanh(x - \beta) + \Gamma]$, $V_B(x) = -\alpha'' [\tanh(x - \beta) + \Gamma]$ で与えられる. BL-OV モデルは, トリビアルな定常流解をもち, その線形安定性も解析されている [9].

本研究では, BL-OV モデル (1) を解析するのではなく, 解析計算も視野に入れて定常流解まわりで線形化された方程式を解析する. BL-OV の定常流解は, 粒子が一定な粒子間隔 $x_{j+1} - x_j = b$ ($j = 1 \dots N$) でならば, 全粒子が一定の速度 $[V_F(b) + V_B(b)]$ でうごく状態の解であり, $\tilde{x}_n = b \cdot n + [V_F(b) + V_B(b)]t$ であらわされる. 各粒子の位置を, 定常流 \tilde{x}_n とそこからのずれ y_n をもちいて $x_n = \tilde{x}_n + y_n$ とあらわす. これを代入し, $y_{n+1} - y_n, y_n - y_{n-1}$ の 2 次以上を無視すると, 以下の線形化された BL-OV を得る:

$$\frac{d^2 y_n}{dt^2} = a \left\{ \left[V'_F(b) \cdot \Delta y_{n+1} + V'_B(b) \cdot \Delta y_n \right] - \frac{dy_n}{dt} \right\}. \quad (2)$$

ただし, $\Delta y_{n+1} := y_{n+1} - y_n, \Delta y_n := y_n - y_{n-1}, V'_F(b) = \left. \frac{dV_F(x)}{dx} \right|_{x=b}, V'_B(b) = \left. \frac{dV_B(x)}{dx} \right|_{x=b}$ である.

2.2 対称/非対称のばねモデル

FDR が非対称性によって受ける影響に注目したいので, 線形化された BL-OV モデル (2) の表式をさらに簡単化する. 簡単化は, 定数をそれぞれ

$$\frac{k_L}{m} := a \cdot V'_F(b), \quad -\frac{k_R}{m} := a \cdot V'_B(b), \quad \frac{g}{m} := a,$$

とおきかえればよく, 各粒子の運動方程式は,

$$m \frac{d^2 x_n}{dt^2} = k_L (x_{n+1} - x_n) - k_R (x_n - x_{n-1}) - \gamma \cdot \frac{dx_n}{dt} + R_n(t). \quad (3)$$

となる. $R_n(t)$ は, 熱平衡状態での相関関数を求めるために導入した熱ゆらぎである.

相互作用が対称である場合との比較をおこなうため, 散逸項を含む調和振動子の運動方程式,

$$m \frac{d^2 x_n}{dt^2} = k (x_{n+1} - x_n) - k (x_n - x_{n-1}) - \gamma \cdot \frac{dx_n}{dt} + R_n(t). \quad (4)$$

も定義しておく (粒子数はどちらも対称/非対称の場合で N としておく). k は, ばね定数をあらわしている. 次の節では, 数値計算によって求めた応答関数と相関関数を比較し, FDR を調べる.

3 応答関数と相関関数

3.1 定義

前節で設定したモデルを用いて, 速度 $u_\mu(t) := dx_\mu(t)/dt$ の応答関数と相関関数を求める. 各運動方程式に外力 $f_\nu(t)$ を加えた場合の応答関数 $\phi_{\mu\nu}$ は, 次で定義される (外力の下付き添字は, 外力を加える粒子の番号を表す):

$$\langle u_\mu(t) \rangle_{f_\nu} - \langle u_\mu \rangle_{eq} = \int_{-\infty}^t ds \phi_{\mu\nu}(t-s) f_\nu(s).$$

また, 粒子ごとに独立なホワイトノイズ $R_\nu(t)$ を加えた場合の速度の相関を

$$C_{\mu\nu}(t-s) := \langle u_\mu(t) u_\nu(s) \rangle_{eq}, \\ \langle R_\nu \rangle_{eq} = 0, \\ \langle R_\mu(t) R_\nu(s) \rangle_{eq} = 2\gamma k_B T \delta_{\mu,\nu} \delta(t-s)$$

と定義する. ここで, $\langle \cdot \rangle$ はアンサンブル平均, $\langle \cdot \rangle_{eq}$ は平衡状態における熱ゆらぎのアンサンブル平均, $\langle \cdot \rangle_{f_\nu}$ は粒子 ν だけに外力 f_ν を加えたときのアンサンブル平均をあらわす.

3.2 数値計算の設定

$N = 4$ を設定し, 4 粒子で運動方程式 (3) と (4) を用いて数値シミュレーションを行い, 応答関数と相関関数を計算した. ただし, 数値計算で加える外力は, $t = 0$ に定数 (大きさ 50) を与えるように設

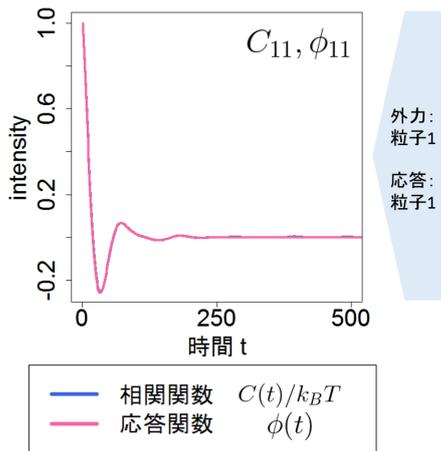


図 1: 相互作用が対称な場合の応答と相関の比較.

定した. $\phi_{\mu\nu}$ と書いた場合, ν だけに外力を与えたときの μ 番目の粒子の応答を表している. 環境温度は, 逆温度 $1/k_B T$ で 9.706×10^4 と設定した. 以降, 応答関数と相関関数の比較をする場合の逆温度も, 9.706×10^4 を用いる.

3.3 結果

まず, 運動方程式 (4) を元にしたシミュレーション結果を図 1 にしめた. この図から, 相互作用が対称の場合に揺動散逸関係がなりたつ様子が確認できた. また, 等分配則を用いて運動エネルギーから逆温度を求めたところ, 設定した環境の逆温度に近い値 (9.752×10^4) となっていた.

次に, 相互作用が非対称な場合の数値シミュレーション結果を図 2 にしめた. 結果の図からも確認できるように, k_L と k_R の値が離れていくにつれ, 応答関数と相関関数に大きな差がみられた.

揺動散逸関係を周波数成分ごとに表示した結果を, 図 3 にしめた. 相互作用が非対称である場合, 長波長成分において応答関数と相関関数の違いが見られた.

対称および非対称な場合に, 外力を与える粒子と応答を見る粒子とを変えた場合の揺動散逸関係を調べた (図 4). この結果から, 相互作用が非対称な場合, 相反定理が成り立たないことが確認できる.

ただし, 数値計算のである図 2 と図 4 に見られる応答関数と相関関数の概形は定性的に似通っており, この関係は詳しく調べる必要があるだろう.

4 まとめ

本研究では, 線形化された BL-OV モデルの FDR を調べた. 結果として, 非対称性が大きくなるにつれ, 応答関数と相関関数の値の差が大きくなっていく様子が確認できた. この結果からいわゆる揺動散逸関係が成立していないことが結論づけられる. しかしながら, 非対称な場合においても応答関数と相関関数の概形は似通っており, 何らかの関係があることも期待される. したがって, 今後の研究課題のひとつは, 数値計算および解析計算を用いてより詳細に揺動散逸関係を調べることである. さらに, もう一つの今後の課題は, 定常流解ではない動的平衡状態を基準として揺動散逸関係を調べることである.

参考文献

- [1] Yuki Sugiyama. In *Natural Computing*, pages 189–200. Springer, Tokyo, Tokyo, 2009.
- [2] E Engels. *Il Nuovo Cimento B (1971-1996)*, 26(2):481–492, 1975.
- [3] Umberto Marini Bettolo Marconi, Andrea Puglisi, Lamberto Rondoni, and Angelo Vulpiani. *Physics Reports*, 461(4-6):111–195, June 2008.
- [4] U Seifert and T Speck. *EPL (Europhysics Letters)*, 89(1):10007, January 2010.
- [5] Udo Seifert. *Reports on Progress in Physics*, 75(12):126001, December 2012.
- [6] András Czirók, H Eugene Stanley, and Tamás Vicsek. *Journal Of Physics A*, 30(5):1375–1385, March 1997.
- [7] Hugues Chaté, Francesco Ginelli, Guillaume Grégoire, and Franck Raynaud. *Physical Review E*, 77(4):046113, April 2008.
- [8] Reo Yaguchi. Violation of the fluctuation dissipation theorem caused by the asymmetric interaction (master’s thesis) (in Japanese). Master’s thesis, Department of Complex Systems Science, Graduate School of Information Science, Nagoya University, 2016.
- [9] Akihiro Nakayama, Yuki Sugiyama, and Katsuya Hasebe. *Physical Review E*, 65(1):016112, December 2001.

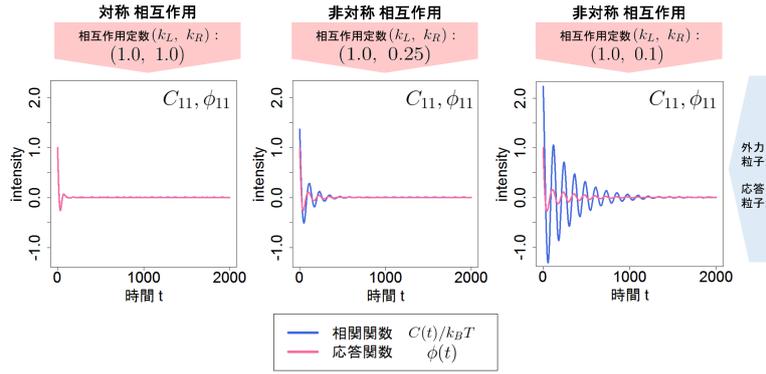


図 2: 応答関数と相関関数の比較. 左から, 対称 $k_L = k_R = 1.0$, 非対称 $k_L = 1.0, k_R = 0.25$, 非対称 $k_L = 1.0, k_R = 0.1$ の場合の比較になっている.

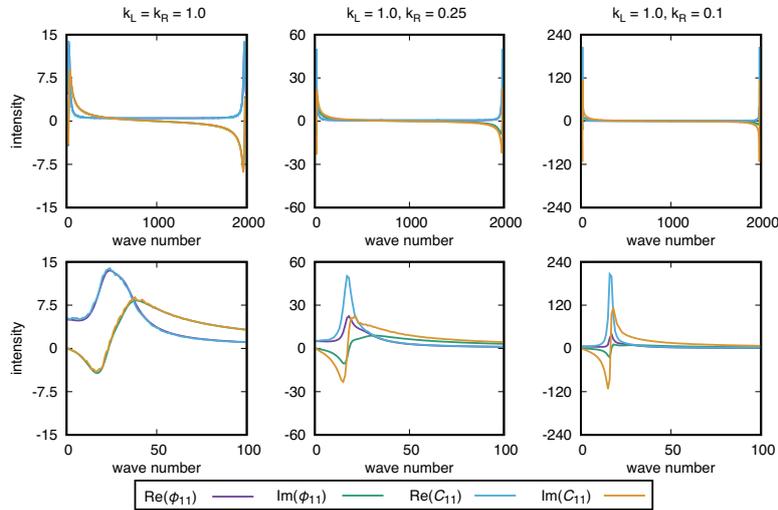


図 3: 周波数成分での応答関数と相関関数の比較. 左から, 対称 $k_L = k_R = 1.0$, 非対称 $k_L = 1.0, k_R = 0.25$, 非対称 $k_L = 1.0, k_R = 0.1$ の場合の比較になっている. 下段の図は, 上段に対応した拡大図になっている.

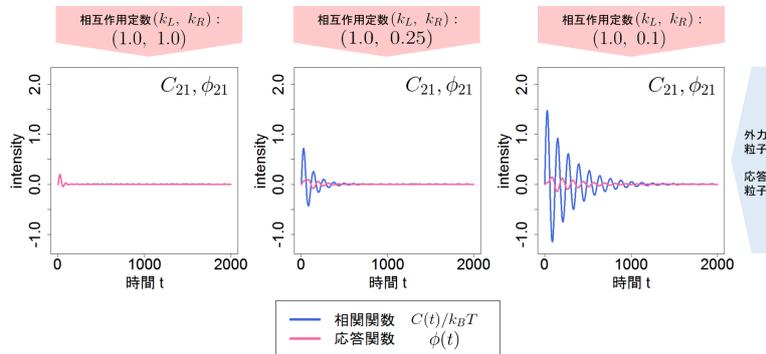


図 4: ϕ_{12} と C_{12} との比較による相反定理の確認. 左から, 対称 $k_L = k_R = 1.0$, 非対称 $k_L = 1.0, k_R = 0.25$, 非対称 $k_L = 1.0, k_R = 0.1$ の場合の比較になっている.