

# アクティブ XY モデルにおけるトポロジカル欠陥の効果

井上 駿, 湯川 諭

大阪大学大学院 理学研究科 宇宙地球科学専攻

## 要旨

本研究では格子点上に固定された古典的な XY モデルと自由空間を動き回れる Vicsek モデルとの中間的モデルとしてスピンの向きに自らを駆動して格子点を動き回れるようにした「アクティブ XY モデル」について考える。古典 XY モデルではスピンの向きがトポロジカル欠陥を示すが、本研究ではアクティブ XY モデルを用いてトポロジカル欠陥と自己駆動力との関係性について調べる。その結果、自己駆動力を大きくすると粒子は +1 渦欠陥に凝集し、-1 渦欠陥は系に存在しにくいことが明らかとなった。過度についてのヒートマップと相分離の様子を比較することで、運動性誘起相分離 (MIPS) とトポロジカル欠陥の相関についても考察する。

## Effect of Topological Defects in Active-XY Model

Shun Inoue, Satoshi Yukawa

Department of Earth and Space Science, Graduate School of Science, Osaka University

## Abstract

In this study, we introduce the active-XY model which is an intermediate model between the classical XY model with spins fixed on lattice points and the Vicsek model with spins traversing freely through space. This model allows spins to self-propel and navigate across lattice points according to their orientations. While the classical XY model is known for the emergence of topological defects, our research investigates the relations between topological defects and the self-propulsion mechanisms within the framework of the active-XY model. Our results show that as self-propulsion intensifies, particles increasingly aggregate at +1 vortex defects, while -1 vortex defects become less common in the system. By comparing the heatmap of vorticity and the behavior of phase separation, we also examine the relations between motility-induced phase separation (MIPS) and topological defects.

## 1 はじめに

鳥や魚の群れのように自らを駆動する要素の集団はアクティブマターと呼ばれ、多様な協同現象を示す。鳥や魚が「群れ」を作ることも一つの協同現象であるが、特に近年では細胞集団がトポロジカル欠陥と呼ばれる渦構造に集積する例 [1] など、アクティブマターの協同現象にはトポロジカル欠陥が重要な

役割を果たしていることがわかっている。

本研究では格子点上に固定された古典的な XY モデル [2] と自由空間を動き回れる Vicsek モデル [3] の中間モデルとしてスピンの向きに自らを駆動して格子点を動き回れるようにしたアクティブ XY モデルについて考える。古典 XY モデルではトポロジカル欠陥が現れるが、Vicsek モデルではトポロジカル欠陥が与える影響が明らかではない。以上を踏ま

え、アクティブ XY モデルでは排他性を仮定し、自己駆動力とトポロジカル欠陥の関係性を調べる。

## 2 モデルの説明

スピン系のモデルとして知られる古典 XY モデルをアクティブ系に拡張する事を考える。周囲と向きを揃える相互作用を反映したアクティブマターモデルとしては Vicsek モデルが有名であるが、古典 XY モデルも同様の相互作用を持つ。

### 2.1 古典 XY モデル

古典 XY モデルとは、スピンを 2 成分ベクトルで表したモデルである。スピンは 2 次元の単位ベクトルであり、格子点上に配置される。古典 XY モデルのエネルギーは以下の式で与えられ、アクティブ XY モデルにおいても同様の相互作用を用いる。

$$E = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j) \quad (1)$$

ただし、 $\langle i,j \rangle$  は最近接スピンを表し、 $J$  は相互作用結合定数である。以下では  $J = 1.0$  と固定する。このモデルは十分低温においてトポロジカル欠陥が現れることでも知られている。

### 2.2 アクティブ XY モデル

周期境界条件のもとで古典 XY モデルから更にスピンの格子点上を移動できるようにした単純なモデルを構築し、これをアクティブ XY モデルと呼ぶ。このモデルでは、粒子（スピン）は各格子点上に存在し、前後左右 4 方向へと確率的に移動ができる。自己駆動力に対応する重み変数を  $\epsilon$  ( $0 \leq \epsilon \leq 1$ ) とし、その移動レートは自己駆動力  $\epsilon$  によって変化する (図 1)。さらに、斥力相互作用に対応する排他性を仮定し、複数の粒子が同一格子点上を占有できないとする。系の格子点の数  $m = 3600$  と粒子数  $n$  を用いて密度  $\rho = n/m$  と定義し、密度変化についても考える。排他性から、密度  $\rho = 1.0$  では古典 XY モデルと完全に一致する。以下では、古典 XY モデル ( $\rho = 1.0$ ) において低温相に対応する  $T = 0.25$  と固定する。

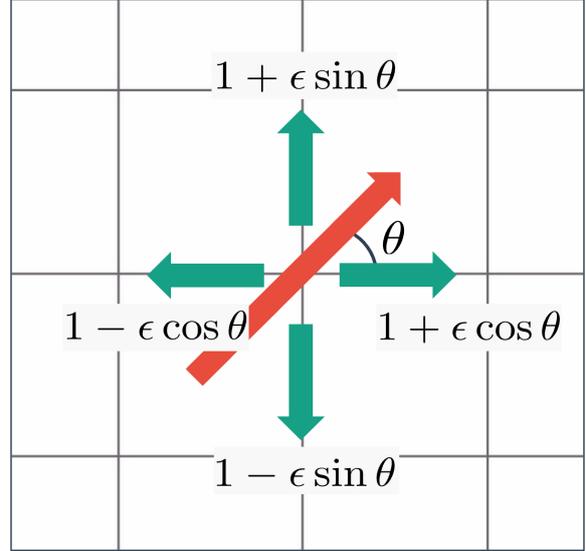


図 1: 粒子の移動レート。スピンの向きに応じて移動レートを自己駆動力  $\epsilon$  で変化させる。

## 3 結果と考察

### 3.1 シミュレーション結果

シミュレーションのスナップショットを図 2 にまとめる。自己駆動力  $\epsilon$  が大きくなると相分離（運動性誘起相分離：MIPS）が起こる。また、密度  $\rho$  が大きければより小さな  $\epsilon$  においても相分離する。相分離を引き起こすのは自己駆動力  $\epsilon$  と排他性の効果により、+1 渦欠陥が発生するとその欠陥部分に粒子が集積するためだと考えられる。密度  $\rho$  と自己駆動力  $\epsilon$  が大きければ大きいほど、より大きなクラスターサイズに成長することが確認できる。

### 3.2 渦度 $N$ と自己駆動力 $\epsilon$ 変化の関係

シミュレーション結果から、クラスター形成による相分離とトポロジカル欠陥には関連性があると考えられる。古典 XY モデルでは +1 渦欠陥と -1 渦欠陥は等確率で出現するが、アクティブ XY モデルでは +1 渦欠陥の方が優先的に残る。これは +1 渦欠陥を起点にクラスターが形成される一方で、-1 渦欠陥は崩れやすいためであると考えられる。自己駆動力が大きいと系に残る渦に偏りが発生すると予想し、系に出現する渦の数について定量化を行う。以

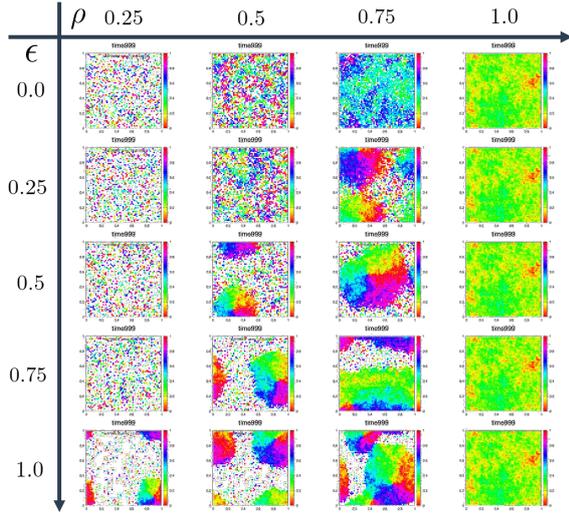


図 2:  $\rho$  と  $\epsilon$  を変化させた際のシミュレーションのスナップショット. 自己駆動力  $\epsilon$  を大きくすると相分離が起こる. (MIPS)

下では, 系に発生した  $+1$  渦の数を  $N_{+1}$ ,  $-1$  渦の数を  $N_{-1}$ , 系の渦度として  $N = N_{+1} - N_{-1}$  と定義する. 粒子密度  $\rho = 0.5$  と固定した時の自己駆動力  $\epsilon$  の変化と系に出現する渦度  $N$  の関係を調べたものが図 3 である. 一般に古典 XY モデルでは  $+1$  渦欠陥も  $-1$  渦欠陥も等確率で出現する.  $\epsilon = 0.0$  はランダムに移動する XY モデルと捉えることができるため, この場合も渦欠陥は等確率で出現する. 自己駆動力  $\epsilon$  を大きくするにつれて  $+1$  渦欠陥と  $-1$  渦欠陥の対称性が崩れ,  $+1$  渦欠陥が残りやすいことが定量的にも確認できた.

### 3.3 渦度 $N$ と密度 $\rho$ 変化の関係

次に, 自己駆動力  $\epsilon$  の大きい状態において, 粒子密度  $\rho$  の変化と渦度  $N$  の関係性を調べる.  $\epsilon = 1.0$  と固定した時の密度  $\rho$  の変化と系に出現する渦度  $N$  の関係を図 4 に示す. 粒子が存在しない  $\rho = 0.0$  と, 古典 XY モデルと一致する  $\rho = 1.0$  では, 厳密に渦度は  $N = 0$  である. このことと図 4 から, 粒子が存在せず, したがって渦度も 0 である  $\rho = 0.0$  から粒子数が増加するにつれて渦度  $N$  も大きくなり, 密度  $\rho$  が 1.0 に近づくと共に渦度  $N$  は再び 0 へと落ち込むことがわかる. つまり, 渦度  $N$  は密度  $\rho$  変化にお

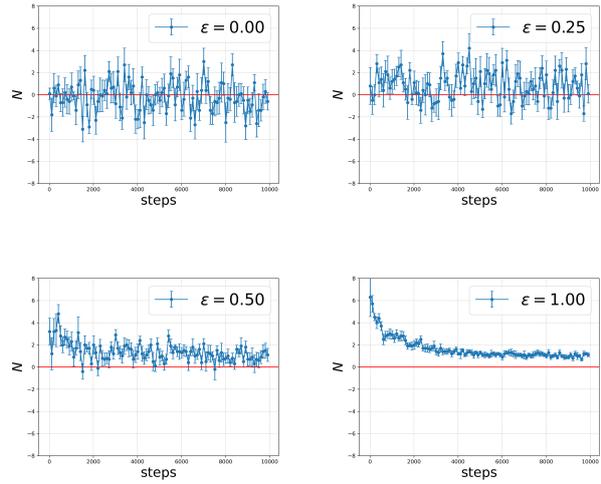


図 3: 自己駆動力  $\epsilon$  と渦度  $N$  の関係 ( $\rho = 0.5$ ).  $\epsilon = 0.0$  はランダムに移動する XY モデルであり,  $\epsilon$  を大きくすると自己駆動力の効果が現れる. 初期配置はランダムであり, 渦度は平均的に 0. 渦度のデータ点は 10step から始め, 100step ごとにプロットしている. 赤線は  $N = 0$  を示す. (10 サンプル平均)

いて最大値となるピークを持つ.

### 3.4 $\epsilon$ と $\rho$ 変化についてのヒートマップ

最後に, 自己駆動力  $\epsilon$  の変化と粒子密度  $\rho$  の変化についてヒートマップを作成した (図 5). 自己駆動力  $\epsilon$  を 0.25 刻みで 0 から 1 まで変化させ, 粒子密度  $\rho$  については 0.1 刻みで 0.1 から 0.9 まで変化させた. 10 サンプルについて, 安定状態に落ち着いた 5000step 以上での渦度  $N$  の平均値を求め, 密度  $\rho$  と自己駆動力  $\epsilon$  の変化に応じて色付けをしている.

自己駆動力  $\epsilon$  が小さければ  $+1$  渦と  $-1$  渦の発生が等確率に近づくため  $N$  の平均値も 0 に近づく. そして,  $\epsilon$  を大きくすれば渦度が正の渦度をとることが確認できる. しかし, 特に高密度においては自己駆動力を大きくすればするほど渦度  $N$  が大きくなるわけではない. これは, 高密度かつ自己駆動力の大きな場合では最終的に巨大な一つのクラスターになりやすいが, それらクラスターには渦度  $+1$  をとるもの他に, 渦度 0 をとるものも存在するからで

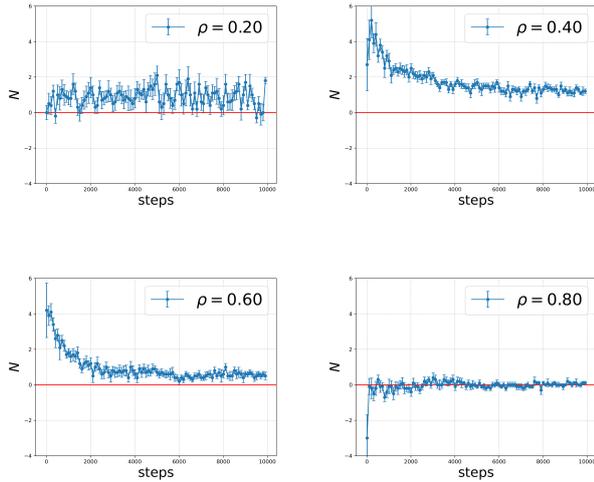


図 4: 密度  $\rho$  と渦度  $N$  の関係 ( $\epsilon = 1.0$ ).  $\rho = 0.0$  と  $\rho = 1.0$  では厳密に  $N = 0$  である. 初期配置はランダムであり, 渦度は平均的に 0. 渦度のデータ点は 10step から始め, 100step ごとにプロットしている. 赤線は  $N = 0$  を示す. (10 サンプル平均)

ある. 高密度で渦度 0 のクラスターが出現することは以下のように理解できる. 巨大なクラスターへの成長過程では, 渦度 +1 のクラスター同士の衝突が発生している. 高密度ではない場合に渦度 +1 のクラスター同士が衝突する際には, 2つのクラスターの間には 1つの  $-1$  渦欠陥が発生するため, 衝突後は渦度 +1 をとるようなより大きなクラスターが形成される. 一方, 高密度では周期境界を跨いでしまうために衝突するクラスター同士の間は 2つ存在し, その両側において渦度  $-1$  が発生してしまうために全体としては渦度 0 の大きなクラスターへと成長する.

ここで, 図 2 と図 5 とを比較する. 図 2 では自己駆動力  $\epsilon$  の値が小さくなるにつれて, 高密度側での相分離の様子が目立っていた. 一方で, 図 5 でも  $\epsilon$  の値が小さくなるにつれて, 渦度  $N$  の最大値ピークは高密度側にシフトする様子が確認できる. このことから, アクティブマターによる凝集 (MIPS) とトポロジカル欠陥の渦度  $N$  のピークの分布には相関があると考えられる.

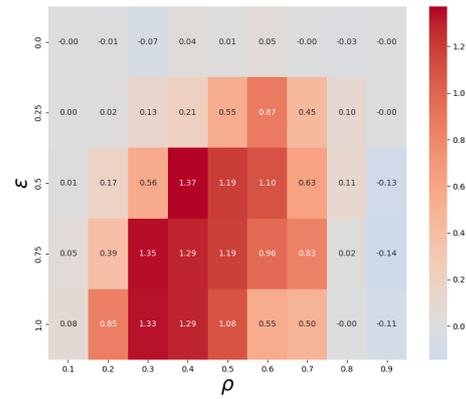


図 5: 渦度  $N$  に関するヒートマップ.  $\text{steps} \geq 5000$ step について平均値を求めた. (10 サンプル平均)

## 4 まとめ

本研究では, 古典 XY モデルをアクティブ系に拡張したモデルとしてアクティブ XY モデルについて考えた. 今回のモデルでは自己駆動力を大きくするとトポロジカル欠陥のうち  $+1$  渦欠陥が優先的に残り, 相分離を引き起こす要因となっていることが明らかとなった. また, 自己駆動力を小さくすると渦度のピークは高密度側へとシフトすることが確認できた. このことと, 高密度ではより小さな自己駆動力でも相分離を引き起こすことから, 渦度の分布と相分離の分布とは相関があることが示唆された.

今後の課題として, 自己駆動力が大きい場合での超高密度 ( $\rho \geq 0.8$ ) における渦度の緩和過程について理解を深めたいと考えている.

## 参考文献

- [1] K. Kawaguchi et al., Nature **545**, 327-331(2017).
- [2] H. E. Stanley, Phys. Rev. Lett. **20**, 589(1968).
- [3] T. Vicsek et al., Phys. Rev. Lett. **75**, 1226(1995).