

# 非弾性剛体円板系の自己組織化空間不均一性と最終凝縮状態

北川遼, 麦田大悟, 村瀬信明, 礒部雅晴

名古屋工業大学 大学院工学研究科

## 概要

本研究では、非弾性剛体円板系の反発係数の変化により生じる自己組織化空間不均一性と最終凝縮状態を、大規模分子動力学シミュレーションにより系統的に調べた。流動相-固相 (Alder) 転移点近傍において、非自明な協働運動や結晶化を伴う自己組織化パターンが生じた。

## Self-organized spatial inhomogeneity and final condensed states in self-propelled quasi-elastic hard disk systems

Ryo Kitagawa, Daigo Mugita, Nobuaki Murase, Masaharu Isobe

Graduate School of Engineering, Nagoya Institute of Technology

## Abstract

We investigated self-organized spatial inhomogeneities in a quasi elastic hard disk system via large-scale molecular dynamics simulations. By changing packing fractions around the Alder transition point systematically, we elucidated non-trivial cooperative dynamics including crystallization and found the fascinating self-organized spatial patterns.

## 1 はじめに

非弾性剛体球を用いた自由冷却過程の粉体気体 (Granular Gas) 系 [1, 2] では、粒子数  $N$ 、粒子占有率  $\nu$ 、反発係数  $r$  により一般に、初期 (平衡) 状態から一様冷却状態 [3] を経て、速度場 (Shearing Regime)、密度場 (Clustering Regime) の順に不安定化し、非平衡定常状態に到達する。反発係数が 1 に近い準弾性極限、熱力学極限においては流体乱流と顕著な類似点が存在する [4, 5]。非弾性剛体円板の先駆的研究 [2] では、粒子数  $N = 1024$  の小規模系で、アルダー転移点 [6] より高密度の平衡系を初期条件とすると、粉体気体系の最終凝縮 (アトラクター) 状態として、シアバンド流以外にも双極渦構造 (正負の渦が 2 つずつ対向流として循環) の状態が存在することが報告されている。

本研究では、高密度系の非弾性剛体円板系に着目し、先行研究 [2] の約 1000 倍の約 100 万粒子系 ( $N = 1024^2$ ) において、大規模 Event-Driven 分子動力学

シミュレーション (EDMD) [8] を遂行した。特に、アルダー転移点付近の高密度系に着目し、反発係数が  $r \neq 1$  で生じる非自明なパターン形成と最終凝縮 (アトラクター) 状態について系統的に調べた。

## 2 シミュレーション手法

長方形 ( $L_y/L_x = \sqrt{3}/2$ ) と正方形 ( $L_y/L_x = 1$ ) の系内 (面積  $A (= L_x \times L_y)$ ) に配置した半径  $\sigma$  の剛体円板からなる単成分粒子系 ( $N = 1024^2$ ) (周期境界条件) を考え、様々な粒子占有率  $\nu = N\pi\sigma^2/A$  において、弾性系 ( $r = 1$ ) にて十分に長時間 Event-Driven 分子動力学法 (EDMD) [8] を実行し、平衡状態まで緩和させた。次に、得られた平衡状態を初期状態とし、反発係数を  $r < 1$  (Granular Gas における Inelastic Hard Sphere (IHS) モデル 1) および  $r > 1$  (先行研究は文献 [7]) の両方の場合を考え、 $r$  の値を変えて EDMD を実行し、定常状態への緩和過程を調べた。EDMD シミュレーションで

は、系のエネルギーを一定にするため、(i) 全粒子に対する速度スケージング、(ii) 衝突粒子対のみに対する速度スケージング、という2つの手法を適用した。緩和過程の解析には、空間不均一性を定量化するため、以下の物理量の場を用い可視化した：密度場  $D(\mathbf{r}) = \sum_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$ 、速度場  $\mathbf{V}(\mathbf{r}) = \sum_i \mathbf{v}_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$ 、および配向秩序場  $\Phi^*(\mathbf{r}) = \sum_i \varphi_i^* \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$ 。ここで、 $\mathbf{r}$  は任意の位置座標、 $\mathbf{r}_i$  は粒子  $i$  の位置、 $\mathbf{v}_i$  は粒子  $i$  の速度、そして  $\varphi_i$  は粒子  $i$  の配向秩序パラメータである： $\varphi_i = \frac{1}{N_i} \sum_{j=1}^{N_i} \exp(6i\theta_j^i)$ 。ただし、 $i$  は虚数単位、 $j$  は粒子  $i$  の最近接粒子、 $N_i$  は最近接粒子の総数、 $\theta_j^i$  は粒子  $j$  から  $i$  への位置ベクトルと任意の基準軸（例えば  $x$  軸）のなす角度である。なお、最近接粒子の特定には、2D-SANNex 法 [9] を用いた。また、物理量の空間場は、グリッドに分けたセル内で平均し、密度場  $D_{CG}$  については、ガウシアンフィルターで粗視化（スムージング）した。粗視化された速度場  $\mathbf{V}_{CG}$  と配向秩序場  $\Phi_{CG}^*$  については、それぞれ角度と偏角 ( $\arg(\Phi_{CG}^*)$ ) の値のみを可視化した。

### 3 シミュレーション結果

#### 3.1 反発係数 $r < 1$ の場合

図 1 は、準弾性剛体円板系  $(N, \nu, r) = (1024^2, 0.75, 0.996)$  における最終凝集（アトラクター）状態である。粗視化された密度場  $D_{CG}$  お

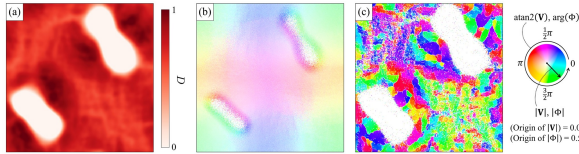


図 1: 準弾性剛体円板系  $(N, \nu, r) = (1024^2, 0.75, 0.996)$  における最終凝集（アトラクター）状態。(a) 密度場  $D_{CG}$ 、(b) 速度場  $\mathbf{V}_{CG}$  の方向、および (c) 配向秩序の粗視化偏角場  $\arg(\Phi_{CG}^*)$ 。

よび粗視化された速度場  $\mathbf{V}_{CG}$  の方向において観察された最終的なアトラクターとして、逆方向の二帯せん断流だけでなく、正負二つずつの渦が対向流を形成し、正の渦の内部に二つの楕円形の空隙を伴う特異な循環流も発見された。配向秩序の粗視化された偏角場  $\arg(\Phi_{CG}^*)$  は、二つの楕円形の空隙の外側に高密度の結晶構造が出現することを示した。

#### 3.2 反発係数 $r > 1$ の場合

図 2 は、準弾性剛体円板系  $(N, \nu, r) = (1024^2, 0.698, 1.0041)$  における最終凝集（アトラクター）状態である。

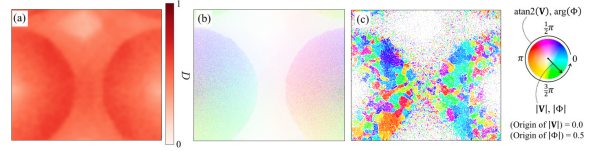


図 2: 準弾性剛体円板系  $(N, \nu, r) = (1024^2, 0.698, 1.041)$  における最終凝集（アトラクター）状態。(a) 密度場  $D_{CG}$ 、(b) 速度場  $\mathbf{V}_{CG}$  の方向、および (c) 配向秩序の粗視化偏角場  $\arg(\Phi_{CG}^*)$ 。

講演では、パラメータを系統的に変化させ、空間不均一性と結晶化ならびに流れの特徴を軸に相図を作成する。また、Vicsek モデル [10] などのアクティブマターモデルとの類似点について議論する。

### 参考文献

- [1] I. Goldhirsch and G. Zanetti, Phys. Rev. Lett., **70** 1619 (1993); I. Goldhirsch, Annual Review of Fluid Mechanics **35**, 267 (2003).
- [2] S. McNamara and W. R. Young, Phys. Rev. E, **53** 5089 (1996).
- [3] P.K. Haff, J. Fluid Mech. **134**, 401 (1983).
- [4] M. Isobe, Phys. Rev. E, **68** 040301(R) (2003).
- [5] M. Isobe, Int. J. of Mod. Phys. C **23**, 1250032 (2012).
- [6] M. Engel et al., Phys. Rev. E **87**, 042134 (2013).
- [7] M. Isobe, AIP Conf. Proc. (USA), **708** 158 (2004).
- [8] M. Isobe, Int. J. Mod. Phys. C **10**, 1281 (1999).
- [9] D. Mugita et al., J. Chem. Phys. **160**, 174104 (2024).
- [10] T. Vicsek et al., Phys. Rev. Lett. **75**, 1226 (1995).