

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, 3] では、粒子数 N 、粒子占有率 ν 、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 [4] 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 [5, 6]。非弾性剛体円板の先駆的研究 [3] では、粒子数 $N = 1024$ の小規模系で、アルダー転移点 [7] 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つつづ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 [3] 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。EDMD とは、粒子の衝突というイベントに基づいて時間発展させる方法である。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 σ 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 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) および $r > 1$ (先行研究は文献 [9]) 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ルリング (大局速度スケールリング)、(ii) 衝突粒子対のみに対する速度スケールリング (局所速度スケールリング)、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 φ_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、 θ_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 [10] 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 Φ_{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。可視化には HSV カラー モデルを使用した。なお、明度は各物理的特性の絶対値に対応し、色相は $\mathbf{V}(\mathbf{r})$ の方向と $\Phi^*(\mathbf{r})$ の偏角に対応する。

3 シミュレーション結果

3.1 大局速度スケールリング

本節では、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ルリング、の操作をした IHS モデルの時間発展ならびに最終状態の結果をまとめる。本モデルでは、系の全体の運動エネルギー、運動量が共に保存され、粒子軌道は速度スケールリング前と同じ (時間スケールのみ変化) となる。

3.1.1 反発係数 $r > 1$ の場合

図 1 は、準弾性剛体円板系 (長方形) $(N, \nu, r) = (1024^2, 0.698, 1.0041)$ における時間発展を示す。最終凝縮状態は、系の形に依存せず、先行研究 [8] での低密度系 ($\nu = 0.25$) の結果と同様に、円弧上に広がり伝播する密度波が生じることが確認された。しかし高密度系では、時間発展に伴い、まず微結晶クラスターが誘起され成長するステージを経て、次に円弧上の密度波伝播に励起された高温状態の結晶化が

繰り返し生じるステージに移行することがわかった。

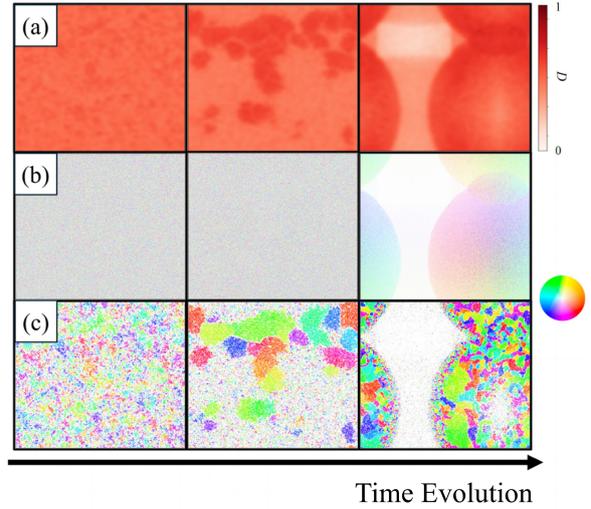


図 1: 準弾性剛体円板系 (長方形) $(N, \nu, r) = (1024^2, 0.75, 1.0041)$ における時間発展。(a) 密度場 D_{CG} 、(b) 速度場 \mathbf{V}_{CG} の方向、および (c) 配向秩序の偏角場 $\arg(\Phi_{CG}^*)$ 。(b)(c) は、ベクトル場を HSV カラーモデルを用い、可視化した。(左) 一様加熱状態、(中央) 結晶クラスター領域の出現、(右) 最終凝縮状態 (円形密度波)

3.1.2 反発係数 $r < 1$ の場合

図 2、3 は、準弾性剛体円板系 (正方形) $(N, \nu, r) = (1024^2, 0.698, 0.996)$ と固定したときの最終凝縮状態の密度場、速度場、配向秩序場の典型例である。図 2 では、粒子流が対方向に流れるシアリング状態 (シアバンド構造) を形成している。この時、系はシアバンド幅を最大化させるように発展する。このため、シア流の方向は最終的に系の境界線に垂直または平行となる。また、低密度系とは異なり、高密度系特有の現象として、シアバンド内に微結晶クラスターが存在し、結晶構造を維持しながら、流れていく様子が確認できた。一方、同じパラメーターであるにも関わらずシアバンド構造以外に、渦中心が円形状の空隙となる正負 2 つの双極渦構造の循環流に加え、渦中心が三角形状や楕円形状といった空隙を伴う新しい循環流の存在も確認できた。図 3 は、空隙が三角形状の典型的な最終凝縮状態である。空隙周りの配向秩序場は、結晶クラスター構造を伴い、2 つの循環流の合流地点で結晶クラスターの生成消滅が生じている。また、密度場と速度場から、空隙境界付

近の少数の粒子が循環流に沿って激しく動き回転流を形成している様子がみてとれる。図4は、さらに高密度系 $\nu = 0.750$ とした際の、最終凝縮状態である。図3と異なり、1つの空隙が生じ、大半の粒子が大きな結晶クラスターを形成し循環流が発生せず静止している。また、空隙周りの少数の粒子が空隙に沿って激しく流れていることが確認できる。

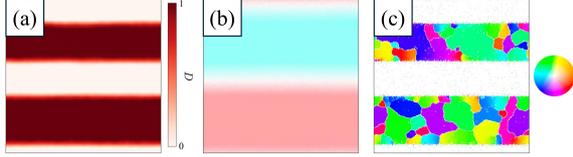


図2: 準弾性剛体円板系 (正方形) $(N, \nu, r) = (1024^2, 0.698, 0.996)$ における最終凝縮状態。(a) 密度場 D_{CG} 、(b) 速度場 \mathbf{V}_{CG} の方向、および (c) 配向秩序の偏角場 $\arg(\Phi_{CG}^*)$ 。

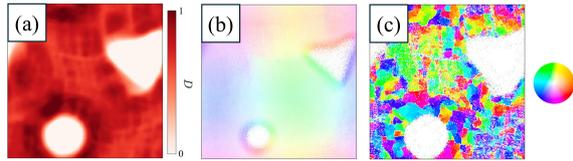


図3: 図2と同様。

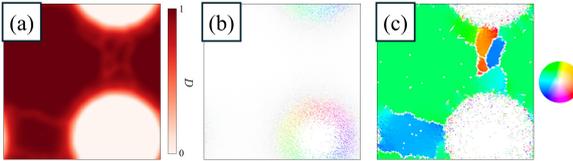


図4: 準弾性剛体円板系 (正方形) $(N, \nu, r) = (1024^2, 0.750, 0.998)$ における最終凝縮状態。(a)(b)(c) は図2と同様。

これらの状態は同じパラメーターにおいても最終凝縮状態が異なる。そこで、広範なパラメータ空間において、それぞれ、10個の独立な等配置アンサンブル (同じ初期配置で速度分布が異なるアンサンブル) を用い、各最終凝縮状態への出現確率 P を計算した。図5に、 (N, ν) において最頻出の最終凝縮状態で分類し相図にまとめた。シアバンド構造 (図2) は、 $\nu < 0.65$ (平衡系では低密度の液相に対応) ならびに $N \leq 10^3$ の小規模系で出現した。しかし、高密

度の液相では、アルダー転移点 ($\nu \sim 0.70$) 付近で、 $N = 64^2 \sim 256^2$ で円形上の空隙を伴う2重渦構造が頻繁に生じ、大規模系 $N \geq 512^2$ では、円形以外の空隙を伴う渦構造が出現した (図3)。このとき、三角形状と楕円形状は、ほぼ同確率で生じた。また、このパラメータ領域以外では出現はしなかった。最後に、結晶と1つの渦構造 (図4) は、 $\nu > 0.76$ 以上の高密度系でのみ生じることが判明した。

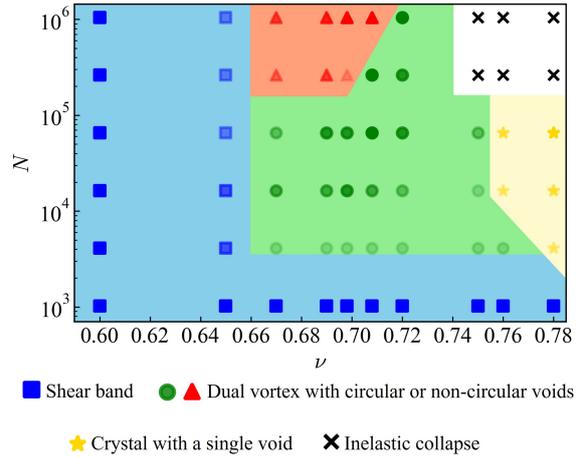


図5: (N, ν) 空間における最終アトラクター状態の相図。図中の点は、出現確率 P により濃淡をつけた。

3.2 局所速度スケーリング

本節では、系のエネルギーを一定にするため、(ii) 衝突粒子対の速度のみをスケールした結果をまとめる。本モデルでは、系全体の運動エネルギーは保存されるが、運動量は非保存となる。そのため、時間発展により系全体の運動量が変化し、最終状態では全系が一様に流れる速度秩序が生じた。アクティブマター系で活発に研究されている Vicsek モデル [11] との類似性 (アナロジー) に着目し、以下の (1) 式で定義される速度秩序変数 ψ の時間発展の様子に関して、本モデルとの比較を行った。ここで \mathbf{v}_i は、各粒子 i の速度ベクトルである。

$$\psi = \frac{|\sum_i \mathbf{v}_i|}{\sum_i |\mathbf{v}_i|} \quad (1)$$

図6は、(ii) の局所速度スケーリングを行った IHS モデル (図6(a)) と Vicsek 相互作用を導入した剛体円板系 (図6(b)) において、最終状態が速度秩序変数が1に漸近する代表的なパラメーター $(N, \nu, r) =$

($64^2, 0.250, 0.70$) を用いて、シミュレーションを実行した際の時間発展 [12] の様子である。また、図 7 は、速度秩序変数の時間発展を示す。両者は、初期のひも状のクラスター形成や速度秩序変数の増加の様子は酷似しており、微視的な粒子レベルの相互作用の詳細によらず、速度秩序の初期形成に関しては普遍性があることが確認された。

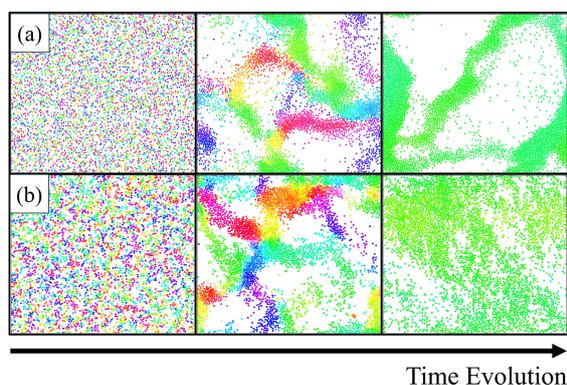


図 6: (a) 局所速度スケールを用いた IHS モデル (N, ν, r) = ($64^2, 0.250, 0.70$) と (b) Vicsek 相互作用を取り入れた剛体円板系 (N, ν, η) = ($64^2, 0.250, 0.1\pi$) の時間発展 [12]。

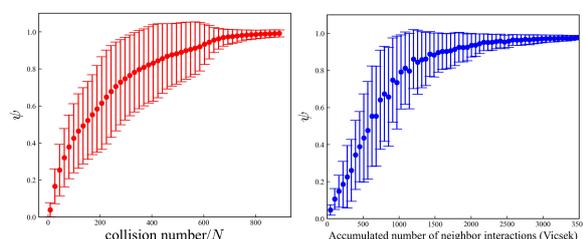


図 7: 図 6 に対応する速度秩序変数の時間発展 [12]。横軸は、(a) (IHS モデル) 一粒子あたりの衝突回数、(b) (剛体円板 Vicsek モデル) 近接粒子の累積相互作用回数、とした。

4 まとめ

本研究では、非弾性剛体円板系における反発係数の変化が引き起こす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査した。非弾性衝突する剛体円板系の運動エネルギーを一定に保つ 2 つの速度スケール (運動量保存および非保存) を導入した。特に平衡系での流動相-固相転移が生じる 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

織化パターンの形成を観察し、相図を作成した。大局速度スケール (運動量保存) において、 $r > 1$ では時間発展過程で微結晶クラスターが生成され、最終的に円形状の密度波伝播状態へと発展することが判明した。波の伝搬は、デトネーション波との類似性が指摘される。一方、 $r < 1$ では、最終凝縮状態として初期パラメータに依存した結晶化を伴う 4 つの異なる状態が存在することを発見した。これらの状態は大規模系かつ高密度条件下でのみ出現する現象であり、本研究の大規模計算により初めて確認された。また、局所速度スケール (運動量非保存) では、アクティブマター系の Vicsek モデルとの類似性が確認された。今後の課題として、これらの現象のパラメータ依存性と物理的な起源についてより詳細な研究を行う予定である。

参考文献

- [1] I. Goldhirsch and G. Zanetti, Phys. Rev. Lett., **70** 1619 (1993).
- [2] I. Goldhirsch, Annual Review of Fluid Mechanics **35**, 267 (2003).
- [3] S. McNamara and W. R. Young, Phys. Rev. E, **53** 5089 (1996).
- [4] P.K. Haff, J. Fluid Mech. **134**, 401 (1983).
- [5] M. Isobe, Phys. Rev. E, **68** 040301(R) (2003).
- [6] M. Isobe, Int. J. of Mod. Phys. C **23**, 1250032 (2012).
- [7] M. Engel et al., Phys. Rev. E **87**, 042134 (2013).
- [8] M. Isobe, Int. J. Mod. Phys. C **10**, 1281 (1999).
- [9] M. Isobe, AIP Conf. Proc. (USA), **708** 158 (2004).
- [10] D. Mugita et al., J. Chem. Phys. **160**, 174104 (2024).
- [11] T. Vicsek et al., Phys. Rev. Lett. **75**, 1226 (1995).
- [12] 村瀬信明, 磯部雅晴, 第 28 回 交通流と自己駆動粒子系 シンポジウム 論文集 **28**, pp.9 - 12 2023 年 03 月.