

剛体円板を用いた自己駆動粒子系の相転移点シフト

村瀬信明¹, 磯部雅晴¹

¹ 名古屋工業大学大学院工学研究科工学専攻

概要

本研究では、自己駆動系 (いわゆるアクティブマター系) における排除体積効果と相転移への影響を調べるため、Vicsek モデルで用いられる質点を剛体円板に変え、固液相転移近傍において Event-Driven 型分子動力学法を実行し、相図を作成した。素子間の衝突頻度と Vicsek モデルの相互作用の競合により、粒子占有率に対する相転移点に大きな影響を及ぼすことがわかった。また、アクティブマター度の増大により系が非平衡化したときの全系の大局配向秩序変数と微視的構造との関係を明らかにした。

Anomalous phase transition in self-propelled hard disk systems

Nobuaki Murase, Masaharu Isobe

Graduate School of Engineering, Nagoya Institute of Technology

Abstract

In this study, we investigate the phase behavior of the self-propelled hard disk systems with the Vicsek-type interaction via event-driven molecular dynamics simulation systematically. In addition to the ordinal order-disorder transition of the collective velocity field known in the original point particle of the Vicsek model, we observed the novel competition driven by the global positional order (so-called Alder transition) due to the exclusive effect of hard disk, which causes anomalous fluctuations around phase transition and transition shifts.

1 はじめに

生物のように自ら動く素子 (ユニット) は「自己駆動粒子 (Self-propelled Particle)」と呼ばれ、これらを素子とした多体系で生じる巨視的な協調運動は、「アクティブマター (Active Matter)」として、精力的に研究が行われている [1]。自己駆動粒子系を研究する有名なモデルに、いわゆる Vicsek モデルがある [2]。Vicsek モデルは質点を素子とし、近傍素子の速度ベクトルの総和に素子の方向を揃える相互作用のモデルである。このモデルでは、ノイズパラメータの増大により粒子 (質点) 群が 1 方向に流れる秩序相から乱雑に動く無秩序相へと相転移を起こす [3]。近年では、素子間に様々な相互作用がある系での研究も行われている [4, 5]。本研究では Vicsek モデル

の相互作用に、排除体積効果を考慮した剛体円板系において、固液相転移 (いわゆる Alder 転移) 近傍に着目し、Event-Driven 型分子動力学法 (EDMD) [6, 7] を実行した。Vicsek モデルでは存在しない素子間の衝突とその頻度は、Vicsek モデルの相互作用と競合するため、全系に及ぼす影響並びに相転移点シフトと各相の微視的構造の特徴を調べた。

2 シミュレーション手法

平衡系の剛体円板系に以下の Vicsek モデルの相互作用を導入し、EDMD を実行した。

$$\Theta_i^{t+\Delta t} = \arg \left(\sum_j \exp(i\Theta_j^t) \right) + \delta\Theta, \quad (1)$$

$$\mathbf{v}_i^{t+\Delta t} = v_i^t \mathbf{e}_{\Theta_i^{t+\Delta t}}. \quad (2)$$

ここで \mathbf{v}_i^t は時刻 t における素子 i の速度ベクトル、 $v_i^t = |\mathbf{v}_i^t|$ と Θ_i^t はその大きさと向きである。式 (1) の第 1 項はカットオフ半径 r_c 内の素子 j の総和の偏角 (\arg は偏角、 i は虚数単位) を表し、第 2 項はゆらぎとして $\delta\Theta = [-\eta/2, \eta/2]$ で一様分布するノイズを加えている。また、(2) 式の $\mathbf{e}_{\Theta_i^t}$ は、 Θ_i^t 方向の単位ベクトルである。系内すべての素子の速度ベクトルは、時間 Δt 毎に式 (1),(2) を用いて更新する [2]。一方、EDMD は、剛体円板間の衝突毎に時間発展させる手法である [6]。そのため、 Δt 間の衝突回数が系の動力学に影響を及ぼし、Vicsek モデルとの大きな違いとなる。本研究では、これらの競合を調べるため、剛体円板系の平均衝突時間 τ で無次元化したパラメーター $\Delta t^* = \Delta t/\tau = 1 \sim 100$ を導入した。半径 σ の 2 次元剛体円板系 (粒子数 $N = 4,096$) において $r_c = 3.112\sigma$ とし、粒子占有率 ν を Alder 転移点 $\nu_c \sim 0.70$ [7, 8, 9] 近傍を含む $\nu = 0.70 \sim 0.76$ 、ノイズを $\eta = 0 \sim 2\pi$ でそれぞれ系統的に変化させた。Vicsek モデルでは、 $\eta = 2\pi$ で素子はすべての進行方向が等価に選ばれるため、ランジェバン熱浴下での平衡状態 (無秩序相) と等価になる。一方、 $\eta = 0$ では、系全体で同一方向に流れる秩序相となる [2]。全系の大局構造解析には、従来の Vicsek モデルの相を特徴づける速度秩序変数に加え、素子 i 毎の配向秩序変数 $\phi_6^i = 1/N_j \sum_{j=1}^{N_j} \exp(6i\theta_j^i)$ を考えた。ここで、 j は最近接素子で、 N_j はその総数、 θ_j^i は素子 i の中心を通る基準軸からの j の角度である。 ϕ_6^i を用いて全系の局所および大局配向秩序変数はそれぞれ $\Phi_6^L = 1/N \sum_{i=1}^N |\phi_6^i|$ 、 $\Phi_6^G = |1/N \sum_{i=1}^N \phi_6^i|$ と定義され、相が 6 回対称を持つかを特徴づける。また、素子の局所構造解析のため、ある配置で周辺の素子を固定し、注目した素子の中心が移動可能な領域として定義される自由体積 v_f 、その自由体積の周辺自由表面積 s_f 、最近接素子が 6 以外の値をとる格子欠陥について調べた。剛体球の平衡系では自由体積、自由表面積を用いて圧力 P^* が計算できる [10, 11]。そこで、各素子において (2 次元での) 局所無次元圧力 p_i^* を (3) 式のように定義し、空間分布を調べた。

$$p_i^* = 1 + \frac{\sigma s_f^i}{2 v_f^i}. \quad (3)$$

3 シミュレーション結果

3.1 配向秩序変数の変化と相図

図 1 は、 $\nu - \eta$ 空間上の大局配向秩序変数 Φ_6^G の等高線図である。 Φ_6^G の値で色分けを行った。剛体円

板系では、 $\Phi_6^G \sim 0.70$ で 6 回対称で配向のそろった系が結晶状態となることが知られ、液相、結晶相の判定が可能となる [8, 9]。まず、ノイズ η によらず粒子占有率 ν を大きくしていくと Φ_6^G が増加し、系全体が結晶状態となることがわかる。また、低ノイズ η (非平衡度 (アクティブマター度) が高い状態) では、同じ ν において、 η が大きいときに比べ、 Φ_6^G が減少傾向にある。そのため Φ_6^G の等高線は、結晶状態を示す境界が高密度側にシフトする。また $\eta \sim 1.2\pi$ 付近に非自明なカスプが見られた。

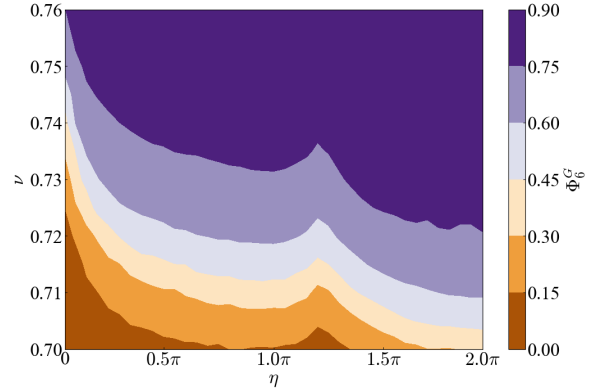


図 1: $\nu - \eta$ 空間上の Φ_6^G の等高線図。($(N, \Delta t^*) = (4096, 10)$ に固定)

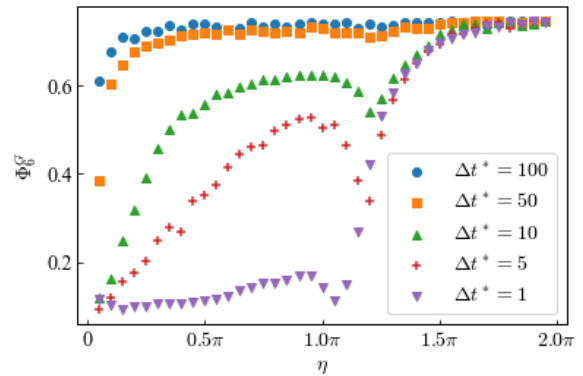


図 2: Vicsek 相互作用の更新時間 Δt^* を変えたときの Φ_6^G の η 依存性。($\nu = 0.72$ に固定)

次に、図 1 において $\nu = 0.72$ に固定し、Vicsek 相互作用の更新時間 Δt^* を変えたときの Φ_6^G の η 依存性を調べた (図 2)。平衡系 $\eta \sim 2\pi$ では $\Phi_6^G \sim 0.71$ で系全体として結晶状態である。一方 $\eta \leq 1.5\pi$ では、配向秩序変数が減少することがわかる。平均衝突時間程度 $\Delta t^* = 1$ では、 $\eta \sim 1.0\pi$ 付近で $\Phi_6^G \sim 0.1$ の液体状態になる。また、 Δt^* によらず $\eta = 1.0\pi \sim 1.3\pi$

付近に Φ_6^G が一時的に減少するカスプが見られた。Vicsek モデルでは、速度秩序変数が秩序-無秩序相転移を起こすことが知られている [2, 3]。このモデルでは $\eta = 1.2\pi$ 付近に対応している。そのためなんらかの臨界揺らぎが生じ、大局配向秩序変数の減少が生じた可能性が考えられる。

図 3 は、 $(\nu, \Delta t^*) = (0.72, 10)$ とした条件での Φ_6^G ならびに局所配向秩序変数 Φ_6^L のノイズ η 依存性を示す。 Φ_6^L は η の減少に対し減少傾向にあるが、 Φ_6^G に比べると $\eta \sim 0$ においても $\Phi_6^L \sim 0.7$ である。これは、素子 (剛体円板) 毎の局所的な配向秩序がほとんど変化していないことを意味する。つまり、 η は系全体での長距離配向秩序のみ影響を与え、著しく減少させていることを示している。

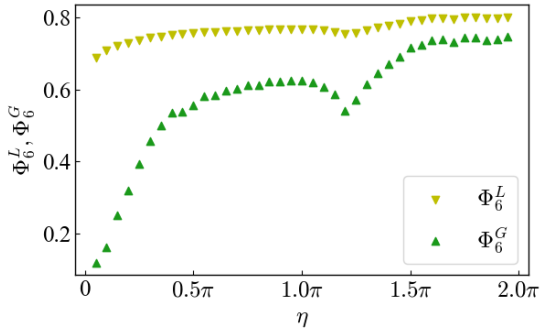


図 3: Φ_6^G および局所配向秩序変数 Φ_6^L のノイズ η 依存性。 $(\nu, \Delta t^*) = (0.72, 10)$ に固定

3.2 局所構造解析

3.1 節で得られた系全体の特徴と相図をより詳しく調べるため、個々の素子 (剛体円板) とその近傍の局所構造に着目し、配向秩序変数 $|\phi_6^i|$ 、自由体積 v_f 、局所圧力 p_i^* 、格子欠陥 n_d^* について系統的に解析を行った。図 4~6 は $(\nu, \Delta t^*) = (0.72, 10)$ において各剛体円板の自由体積 v_f の確率密度分布、配向秩序変数 $|\phi_6^i|$ および局所圧力の空間分布 p_i^* をそれぞれ示したものである。自由体積の確率密度分布 (図 4) では、 $\eta = 0.1\pi$ と 1.0π を比較すると、 $\eta = 0.1\pi$ では自由体積が小さい素子が多いことがわかる。自由体積が小さいということは、局所的に最近接素子が密につまっていることを意味する。一方、 $\eta = 1.0\pi$ と 1.2π を比較すると後者で自由体積が小さい素子が多い。 $\eta = 1.2\pi$ は、図 1~3 でカスプが生じる η に対応している。

図 5 は各素子の配向秩序変数 $|\phi_6^i|$ の空間分布であ

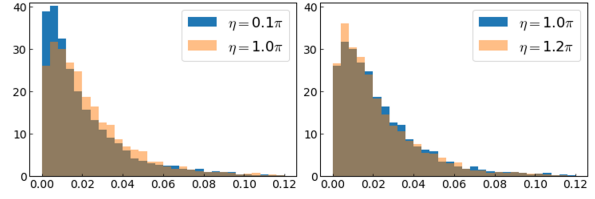


図 4: 各素子の自由体積 v_f の大きさの確率密度分布。 $(\nu, \Delta t^*) = (0.72, 10)$ に固定

る。平衡系に近い $\eta = 1.9\pi$ (図 5(右)) では、全系で配向秩序変数が高い状態になっている。一方、強い非平衡系である $\eta = 0.1\pi$ (図 5(左)) では、配向秩序変数が高い領域と低い領域に分離しクラスターを形成している。配向秩序変数が高いクラスター領域は、クラスターごとに配向の向きが異なっている。このため、局所配向秩序変数は大きいですが、系全体の大局配向秩序変数が小さくなり、図 3 の結果と一致する。

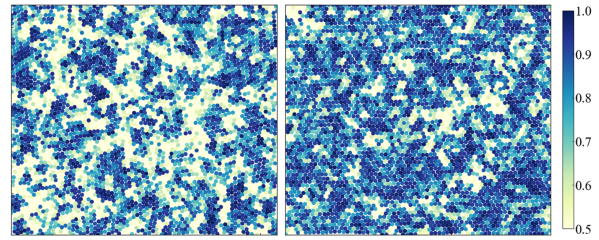


図 5: 配向秩序変数 $|\phi_6^i|$ の空間分布。 $(\text{左})\eta = 0.1\pi, (\text{右})\eta = 1.9\pi, (\nu, \Delta t^*) = (0.72, 10)$ に固定

図 6 は、各素子の局所圧力 p_i^* の空間分布を示す。平衡系に近い $\eta = 1.9\pi$ (図 6(右)) と比べ、強い非平衡系である $\eta = 0.1\pi$ (図 6(左)) では p_i^* が高い素子が増加する。 p_i^* は、個別の素子の自由体積 v_f が減少もしくは自由表面積 s_f が増大するときに大きくなる (式 (1) 参照)。つまり、素子の近傍が高密度に圧縮されている、もしくは自由体積が非等方的な形をしている場合にそれぞれ対応する。前者は、図 4 で得られた結果と一致する。一方、 p_i^* が高く、かつ $|\phi_6^i|$ が低い素子の存在が確認できる。

自由体積の異方性 (自由表面積の増大) を定量的に調べるため、格子欠陥率 n_d^* の η 依存性を図 7 に示した。完全な三角格子に素子があれば、 $n_d^* = 0$ となる。図 7 より、ノイズ η が減少すると格子欠陥率 n_d^* が増加した。また $\eta \sim 1.2\pi$ 近傍で格子欠陥率の一時的な増加 (カスプ) が見られる。格子欠陥は、局所配向秩序変数減少の直接の原因となり、結晶クラ

スター間の境界付近に分布する。

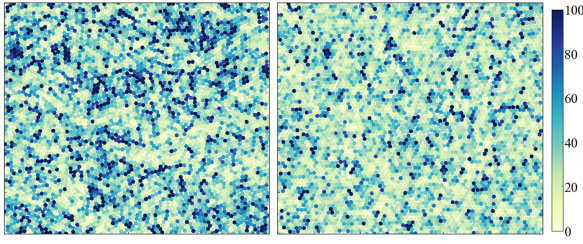


図 6: 局所圧力の空間分布。(左) $\eta = 0.1\pi$, (右) $\eta = 1.9\pi$, $(\nu, \Delta t^*) = (0.72, 10)$ に固定)

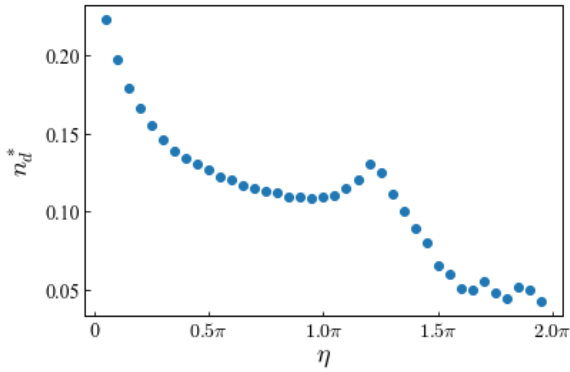


図 7: 格子欠陥率 n_d^* の η 依存性。 $(\nu, \Delta t^*) = (0.72, 10)$ に固定)

4 まとめ

本研究では、排除体積効果の影響を調べるため Vicsek モデルに剛体円板を導入し、系の特徴とその微視的起源を調べた。質点を用いる Vicsek モデルではノイズ η の減少により近傍素子間の速度ベクトルを同一方向にする働きが強くなる。その結果、系は平衡系の無秩序相から秩序相に相転移を起こす [2, 3]。一方、剛体円板系では ν の増大により固液相転移 (Alder 転移) を起こす [7, 8, 9]。本モデルでも同様に ν の増大により固液相転移 (Alder 転移) を確認できた。しかし、固液相転移点境界は非平衡度が高いほど高占有率側にシフトした。また、速度秩序変数の秩序無秩序相転移点近傍の $\eta \sim 1.2\pi$ 付近で一時的に高占有率側にシフトするカスプが生じた。Vicsek モデル相互作用の更新間隔 Δt^* が短いと、非平衡度が高くなり流動化領域が増大する。また非平衡度の増大で、配向秩序が高い微結晶クラスター生じる。このため局所配向秩序変数 Φ_6^L は高いまま系全体の大局配向秩序変数 Φ_6^G は急激に減少することが確認できた。

局所構造の解析により、局所圧力 p_i^* の高い素子が増大した。それらは配向のそろった結晶クラスターの内部で局所密度が高いこと、または格子欠陥により自由体積が異方的になることの 2 つの原因で生じることが示唆される。後者は、格子欠陥率 n_d^* が非平衡度の増大に伴い、増大することと矛盾しない。今後の課題として、高い局所圧力の空間分布と局所構造の相関を明らかにすること。また、近接素子判定条件の影響を調べるため、幾何学的近接素子 (ポロノイ法、SANN 法) などを用いて結果の相違点を明らかにしたい。本研究は JSPS 科研費 20K03785 の助成を受けたものです。

参考文献

- [1] L. Pismen, “Active Matter Within and Around Us: From Self-Propelled Particles to Flocks and Living Forms”, (Springer, 2021).
- [2] T. Vicsek, A. Czirók, E. Ben-Jacob, I. Cohen, and O. Shochet, Phys. Rev. Lett., **75**, (1995) 1226.
- [3] H. Chaté, F. Ginelli, G. Grégoire and, F. Raynaud, Phys. Rev. E, **77**, (2008) 046113.
- [4] S. Ngo, A. Peshkov, I. S. Aranson, E. Bertin, F. Ginelli, and H. Chaté, Phys. Rev. Lett., **113**, (2014) 038302.
- [5] F. Ginelli, F. Peruani, M. Bär, and H. Chaté, Phys. Rev. Lett., **104**, (2010) 184502.
- [6] B. J. Alder and T. E. Wainwright, J. Chem. Phys., **31**, (1959) 459.
- [7] B. J. Alder and T. E. Wainwright, Phys. Rev., **127**, (1962) 359.
- [8] E. P. Bernard and W. Krauth, Phys. Rev. Lett., **107**, (2011) 155704.
- [9] M. Engel, J. A. Anderson, S. C. Glotzer, M. Isobe, E. P. Bernard, and W. Krauth, Phys. Rev. E, **87**, (2013) 042134.
- [10] W. G. Hoover, N. E. Hoover, and K. Hansan, J. Chem., Phys., **70**, (1979) 1837.
- [11] R. J. Speedy and H. Reiss, Mol. Phys., **72**, (1991) 999.