

論文の内容の要旨

論文題目 Collective dynamics of repulsive self-propelled particles
 (斥力相互作用する自己駆動粒子系の集団動力学)
氏 名 平岡 喬之

鳥、魚、哺乳類、昆虫などの動物から真核細胞やバクテリアなどの微生物、さらには細胞内器官を形成するタンパク質繊維に至るまで、個体や生体要素が群れを作って運動する現象は、幅広い長さスケールにわたって普遍的に見られる。このような生物の集団運動を数理モデルで記述する試みは 1980 年代から始まった。Reynolds(1987) [1] は個体を「ボイド」と呼ばれる自己駆動する粒子で表現し、その間に 3 つの相互作用の効果を考えることで、鳥や魚の群れ運動がシミュレーションでもっともらしく再現できることを提案した。3 つの効果とは、衝突回避・並列配向・凝集であり、それぞれ、ある相互作用半径の中で働く斥力相互作用・強磁性的相互作用・引力相互作用として表現することができる。

その後、Vicsek et al.(1995) [2] によって、いわゆる Vicsek 模型が提案されたことを契機に、集団運動現象は物理学者の関心を集めるようになった。Vicsek 模型は自己駆動する粒子が近傍の他粒子と互いに向きを揃える相互作用のみを考える単純な模型だが、全系で粒子が同じ向きへと運動する長距離秩序相が存在し、ノイズの強さと密度を制御変数として、秩序相から無秩序相への転移があることが数値計算から明らかになった。2 次元 Vicsek 模型に対応する平衡系のモデルである XY 模型が長距離秩序を示さないことを考えると、これは非自明な結果である。さらに、自己駆動粒子系では、粒子がクラスターを作ることによって、系の中で粒子数密度が巨大にゆらぐという Toner and Tu(1998) [3] の理論的な予言が、Vicsek 模型において具体的に成立することが Chaté et al.(2008) [4] によって数値計算によって確かめられた。

集団運動を呈する別の典型的な例として、都市における歩行者群集が挙げられる。歩行者の数理モデルは数多く提案されているが、最もよく用いられるものの一つに、Helbing and Molnár(1995) [5] による social force model がある。このモデルでは、歩行者を Newton 的運動方程式に従って運動する粒子とみなし、それぞれの目的地に向かう自己駆動力に加え、他の歩行者に対して感じる社会心理学的な斥力を考える。単純な仮定によって、通路における自発的なレーン形成、出口におけるアーチ状の詰まりや間欠的に交代する流れなど、実際の歩行者群集で見られる現象を再現することから、歩行者運動を記述する有力なモデルと考えられている。

しかし、現実の系における相互作用は複雑であり、正確に同定することが容易ではない。そこで、それぞれの対象がどのような相互作用に従い、どのようなモデルでよく記述されるかを実験的に追及することと並んで、理論の立場からは、いくつかの基本的な相互作用が集団運動の形成にいかなる役割を果たしているかを考えることが重要であると考えられる。過去 20 年間にわたってさかんに研究されてきた Vicsek 模型は Reynolds の提案した 3 つの効果のうち、並列配向のみを考慮したものといえる。では、斥力相互作用が支配的であるような系では何が期待されるのだろうか。とりわけ、斥力相互作用のみを仮定した場合に、系がどのような集団的挙動を示すか、という問いが本論文を貫く関心である。

このような研究課題に答えるため、本論文では、次のような方針に従って、斥力相互作用する自己駆動粒子の単純なモデルを構築した。

- 細胞や歩行者は、自己駆動力を発揮する特定の向きを持っている。本モデルではそれを各粒子の内部自由度として、細胞生物学の用語にならい、極性と呼ぶ。
- 多くの自己駆動粒子モデルはノイズがあることを仮定し、その強さを制御変数の一つとして採用する。しかし、細胞や歩行者は熱ゆらぎを無視できる長さスケールを持つことから、そのようなノイズの存在や性質は不明である。そこで本モデルではノイズを仮定せず、系は決定論的ダイナミクスに従うとする。
- 相互作用としては短距離斥力を採用する。

具体的には以下のようなモデルを考える。2次元円盤で表される各粒子はそれぞれ単位ベクトルで表される極性を持っており、その方向 ψ へ一定の大きさの力 α で自己駆動する。そのほかに、係数 β で速度に比例する摩擦と他粒子からの外力を受け、Newton 的な運動方程式に従って運動する。粒子間の相互作用は接触による弾性衝突とし、それによって運動方向と極性がずれると、極性を運動方向に倣うよう回転するトルクが働く。この回転方向の緩和の強さを γ とする。

2次元周期境界条件下で行った多体系の数値シミュレーションの結果、初期状態として各粒子にランダムな向きを与えても、向きが自発的に揃う秩序化と巨大な密度ゆらぎが現れることが確認された（図 1）。また、系の充填率 Φ と γ を変化させると、すみやかに秩序化が進行する秩序相と、有限のシミュレーション時間内では秩序化が見られない無秩序相が現れる。相境界付近では秩序化が起こるまでの待ち時間が急速に増大する。同じ制御変数の値のもとで初期状態をさまざまにとり、シミュレーションを実行すると、待ち時間が十分に長くなったとき、その分布が指数分布に従う。このことから、相境界の付近では秩序化が Poisson 過程によって誘起されることが示唆される。異なる初期状態をもつ試行から、一定の有限時間内に秩序化が起こるものが一つでもあるかどうかで相を分類して書いた相図が、図 2 である。

また、無秩序状態にある系の秩序変数のゆらぎを解析し、その運動が 2次元調和ポテンシャル中のブラウン運動、すなわち 2次元 Ornstein-Uhlenbeck 過程で記述されることを発見した。このことから、無秩序相においては無秩序状態が準安定となっていることが示唆される。全系で粒子の向きが揃った秩序状態は、ノイズがないことから、吸収状態である。この系の秩序変数は現象論的ポテンシャルの構造中を運動していると考えられる。この描像のもとで、秩序相と無秩序相の間の転移は、自由エネルギー構造が変化して無秩序状態が不安定化あるいは準安定化することによって引き起こされる、吸収状態一次相転移と考えられる。

Vicsek 模型のように明示的な並列配向を仮定しないにもかかわらず、斥力のみで粒子の運動方向が揃うのは自明ではない。ここで、秩序化の微視的な素過程が二体の衝突散乱過程にあることを運動論的に示す。まず、衝突する 2 粒子が、衝突前に速度方向にも極性の回転方向にも十分に緩和し、定常運動状態にあると仮定する。これは多体系における希薄極限に対応する。このとき、衝突のジオメトリは運動方向の相対角度と正面衝突からのずれを表す衝突パラメータで一意に指定できる。衝突前と、衝突後、十分に緩和した時点での二体の向きの揃い方を定量化することにより、二体衝突散乱によって、平均してどの程度向きが揃うかを評価することができる。この二体配向の平均増分 $\langle \Delta M^{(2)} \rangle$ は、 γ を大きくすると、ある γ_c を境として正から負の値をとる。この 0 を横切る γ_c が二体衝突から予想される相転移点である（図 3）。

この議論を拡張し、有限濃度に対応する二体散乱過程を議論することができる。この場合には、衝突前に速度や回転方向の緩和が完了していないことがある。多体シミュレーションで見られる転移点付近では

$\beta \ll \gamma$ であることから、速度緩和のほうが回転方向の緩和より遅い。そこで、速度の分布のみを考え、衝突前の粒子の速度分布と衝突後、平均自由行程だけ移動した後の速度分布が同じであるとして、再帰的に速度分布を導く。これは数学的には確率行列の固有ベクトルを求めることに対応する。こうして得た速度分布の下で、希薄極限の場合と同様に、二体配向の平均増分が 0 を横切る点を求める。

図 2 からわかるように、二体散乱過程から予想される転移点は、多体系シミュレーションの結果と、希薄極限で一致するものの、有限濃度で一致しない。これは、二体散乱の計算において、衝突が無相関かつ等方的、また系の密度が一樣であるとする仮定のいずれかが成立していないためと考えられる。実際、粒子がクラスターを作ると明らかに衝突どうしが相関し、また密度ゆらぎが大きくなるので、この仮定は成り立たない。したがって、二体衝突散乱の描像は秩序化の初期過程を記述するものと考えられる。

本論文で提案したモデルは、Szabó et al.(2006) [6] で提案された細胞の運動を記述するモデルや、歩行者の運動を記述する social force model の一般化にあたり、斥力相互作用をする自己駆動粒子系の基本的なクラスを記述していると考えられる。そのような斥力相互作用のみを仮定する系で、Vicsek 模型に似た運動方向の秩序化が起こることを示し、その秩序-無秩序相転移をノイズの強さではなく、個体の内部変数で制御できることを示唆する成果が得られた。また秩序化の微視的な起源が二体衝突の反復にあることを明らかにした。

以上の結果を出発点として、本論文ではさらに下記のような場合、系がどのようにふるまうかを議論する。

- 粒子が非一様な性質を持つようパラメータを設定した場合
- 境界の条件を周期境界から弾性壁に変更した場合
- 3 次元の系

こうした場合は、細胞や歩行者などにより近い状況設定であり、現実の系の挙動を知る上で大きな示唆があると考えられる。

- [1] C. W. Reynolds, Flocks, herds and schools: A distributed behavioral model. ACM SIGGRAPH Comput. Graph. 21, 25 (1987).
- [2] T. Vicsek, A. Czirók, E. Ben-Jacob, I. Cohen, O. Shochet, Novel Type of Phase Transition in a System of Self-Driven Particles. Phys. Rev. Lett. 75, 1226 (1995).
- [3] J. Toner, Y. Tu, Flocks, herds, and schools: A quantitative theory of flocking. Phys. Rev. E. 58, 4828 (1998).
- [4] H. Chaté, F. Ginelli, F. Raynaud, Collective motion of self-propelled particles interacting without cohesion. Phys. Rev. E. 77, 46113 (2008).
- [5] D. Helbing, P. Molnár, Social force model for pedestrian dynamics. Phys. Rev. E. 51, 4282 (1995).
- [6] B. Szabó et al., Phase transition in the collective migration of tissue cells: Experiment and model. Phys. Rev. E. 74, 61908 (2006).

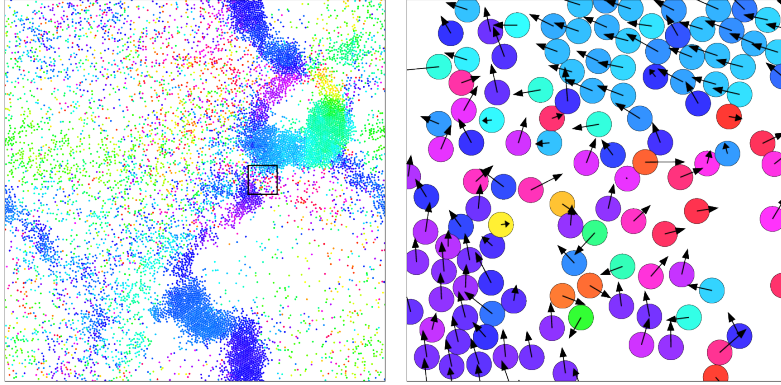


図 1 典型的な系のスナップショット ($N = 10,000$)。粒子の運動方向が自発的に揃う秩序化と大きな密度ゆらぎが生じる。色は各粒子の運動方向を表す。右は全系、左は黒い枠で囲った部分の拡大図。

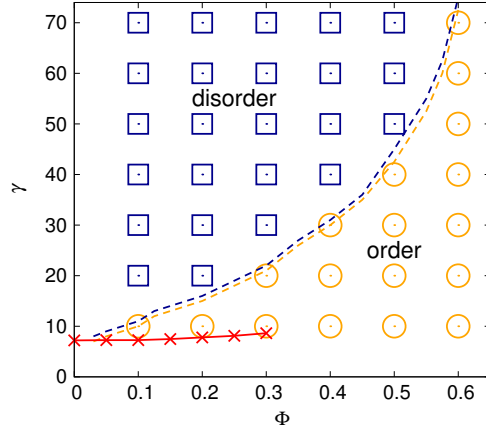


図 2 密度 Φ と回転方向の緩和の強さ γ に対する相図。異なる初期状態の 8~16 回の試行中、一つでも秩序化すれば秩序相 (黄色の円と破線)、秩序化が見られなければ無秩序相 (青い四角と破線) とする。赤い線は二体衝突から予想される転移線を表し、希薄極限で多体シミュレーションの結果と一致する。

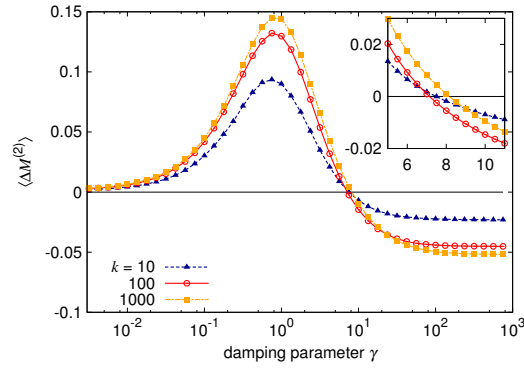


図 3 希薄極限における二体衝突散乱過程による二体配向の増分の平均。 $\gamma \simeq 1$ で極大となり、 $\gamma \simeq 7$ を境に正負が逆転する。