

複雑な相互作用をする粒子の集団の流れ

茨城大 理
粟津暁紀 (Akinori Awazu)

§1. 何を考えたいか

「流れ」は、日常どこにでもある現象である。例えば、水の流れ、風、人や車の流れ、砂の流れ、血液の流れ、熱や電気の流れ、など様々である。しかし同じ「流れ」ではあるが、すべてがいわゆる「流体」として扱い得るものであるわけではなく、様々な「物の流れ」が存在する。最近、そのようなものの一つである、細い管の中の粉体の流れ、または類似の現象と考えられている、高速道路上での交通流の研究が盛んに進められている。

しかし「物の流れ」という視点から見ると、こういった系は、個々の要素が比較的単純な相互作用しか行わない、やや特殊で理想的な系である。実際、例えば、形、硬さに異方性のある物や、長距離力による相互作用を行う物の集団等は、各要素間に働く力が単純ではなく、流れも複雑になると考えられる。

我々は、そのような一般的な「物の流れ」が、如何なる挙動を示し得るのか、という事に興味がある。そこで今回、やや複雑な相互作用をする粒子集団のモデル作り、そこから「物の流れ」の持つ多様性、法則性を考えていく。

§2. どのように考えるか

「複雑な相互作用をする粒子集団の流れ」を考える第一歩として、複雑な相互作用をする粒子集団の、簡単なモデルを考える。そこで今回我々は、Rule 184+a というセルオートマトンモデルを提案する。これは、交通流、粉体流の最も簡単なモデルと見做されるセルオートマトン Rule 184 に、簡単な速度変化のルールを盛り込んだメタモデルである。以下にモデルの具体的な形を示す。

空間、時間は離散的とし、各粒子は以下の方程式に従い運動する。

$$v_{n+1}^i = F(v_n^i, v_n^{i+1}, d_n^i) \quad (2.1)$$

$$x_{n+1}^i = x_n^i + v_{n+1}^i \quad (2.2)$$

ここで、 i はある粒子の番号であり、その前方に存在する粒子の番号は $i+1$ である。 x_n^i 、 v_n^i は、時間 n における粒子 i の位置、速度であり、 d_n^i は、粒子 i と $i+1$ の間にある空白格子数である。今回は簡単のため、関数 $F(v_n^i, v_n^{i+1}, d_n^i)$ と速度 v_n^i は 0 もしくは 1 の 2 つの値をとるとし、 $F()$ は以下のルールに従うとする。

- $d_n^i > 1$ の時、 $F(v_n^i, v_n^{i+1}, d_n^i) = 1$
- $d_n^i = 0$ の時、 $F(v_n^i, v_n^{i+1}, 0) = 0$
- $d_n^i = 1$ の時、 $F(v_n^i, v_n^{i+1}, 1)$ は粒子の種類に応じて、0 もしくは 1 をとる。

ここで、粒子の種類について述べる。速度 v_n^i は値 0 もしくは 1 をとるので、組合せ (v_n^i, v_n^{i+1}) は、 $(0, 0)$ 、 $(0, 1)$ 、 $(1, 0)$ 、 $(1, 1)$ の 4 種類が存在する。そして $d_n^i = 1$ の時、そのそれぞれに対し、 F は 0 もしくは 1 をとる。よって、

$F(v_n^i, v_n^{i+1}, 1)$ に対し、 $\{F(0, 0, 1) = 0, F(0, 1, 1) = 0, F(1, 0, 1) = 0, F(1, 1, 1) = 0\}$ から $\{F(0, 0, 1) = 1, F(0, 1, 1) = 1, F(1, 0, 1) = 1, F(1, 1, 1) = 1\}$ の計 16 種類のルールが存在する。ということで逆に、この 16 種類の $F(v_n^i, v_n^{i+1}, 1)$ のルールの違いによって、種類の異なる 16 種類の粒子が定義される。これらの粒子の種類の名前として rule number 'a' を用い、rule number は Wolfram の方法に習い

$$a = 2^0 F_a(0, 0, 1) + 2^1 F_a(0, 1, 1) + 2^2 F_a(1, 0, 1) + 2^3 F_a(1, 1, 1) \quad (2.3)$$

と定義する。ここですべての粒子が 'a' = 15 の時、この系は CA rule 184 に帰着する。

この様に簡単なモデルにより、やや複雑な相互作用をする数種類の粒子を作ったので、実際にシミュレーションすることで、系の振舞いを見て行く。

§3. シミュレーション

今回、このモデルを用いて、まず純粋な 1 種類の粒子 'a' からなる系の流れを、次に 2 種類の粒子を混合した系の流れを、周期境界条件のもとシミュレーションした。以下その結果を、粒子密度 ' ρ ' と Flow ' f ' との関係図である「基本図」を中心に、簡単に見て行く。

3.1 純粋な 1 種類の粒子系の流れ

Figure.1 は 1 種類の粒子系における典型的な基本図である。多くの種類の粒子系においては、基本的に従来の交通流、粉体流において見られるものと同様に、「自由流」「渋滞流」の二つの相が現れ、 ρ の変化に対し、相転移を起こす、といった現象が見られる ((a),(b))。しかし $F()$ に関して、ある共通の特徴的な相互作用ルールを持つ粒子からなる系では、(c),(d) の様に、 ρ の変化に対する流相の種類が 1 つ増える。また更に、別の共通のルールを持つ粒子からなる系では、 ρ の増化に対し f が増加する「自由流」的流れから、 f が減少する「渋滞流」的流れへの転移が、2 度発生する (Fig.1(e),(f)、Fig. 2)。このとき、 ρ の増化によって密度の薄い流相（「自由流」的流れ、「渋滞流」的流れ）から、密度の濃い流相（「自由流」的流れ、「渋滞流」的流れ）への転移が見られるのである。これは密度の薄い流体から濃い流体への転移、例えば気液転移に似ており、大変興味深い。この様に、ある特徴的な相互作用を行う粒子系においては、粉体流、交通流に比べ、より多様な流相、相転移が発生することが分かる。

3.2 2 種類の粒子が混合した系の流れ

次に異なる 2 種類の粒子が、数の割合 1 : 1 でランダムに存在しているときの、系の流れについて、見て行く。

混合する粒子の種類の組合せは多数存在するが、多くの場合 Fig.3(a) で表されているように、混合系の基本図は、混合する前の 2 種類の粒子の基本図を、ほぼ平均した

ような形になる。しかし、ある種類の粒子の組合せにおいては、 ρ に対するflowが、混合前に比べ激減し、更に流れが止まって「凝固」してしまうことある (Fig.3(b))。この様に、ある種の共通な相互作用ルールを持つ粒子は、また別の共通な相互作用ルールを持つ粒子の流れを妨げ、あたかも「凝固剤」の様に振舞う。つまりこのような現象が、巨視的、散逸的な要素からなる系の混合においても、発生しうるのである。

§4. 分かったこと

今回、複雑な相互作用をする、粒子集団の流れの、簡単なモデルとして、Rule 184+a というセルオートマトンモデルを提案し、シミュレーションの結果を見てきた。それにより、ある特定の共通な相互作用ルールを持つ粒子系において、流相、相転移の種類の多様化や、異なる種類の粒子の混合による、系の流れの凝固、といった様々な現象が見られた。ここで、注意すべき事は、ただやみくもに相互作用を複雑にただけでは、系の振舞いは多様化しないことである。多様化は、特定の相互作用ルールなどといった、何らかのメカニズムによって引き起こされている。よって、今回見られた多様な現象は、モデルの詳細に依らず発生すると考えられる。

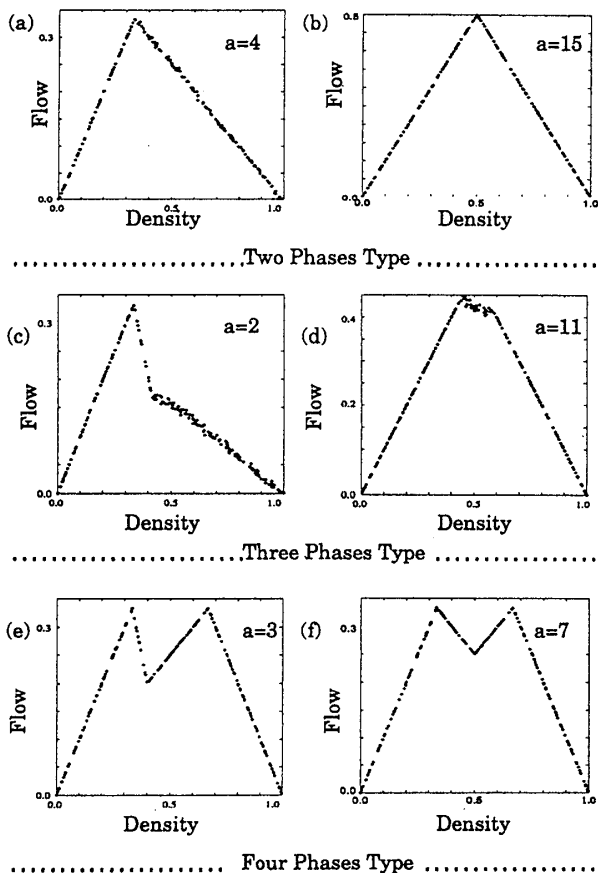


Fig.1: The typical fundamental diagrams for each 'a'. There are three types of fundamental diagrams, (a)(b) 2-type, (c)(d) 3-type, and (e)(f) 4-type.

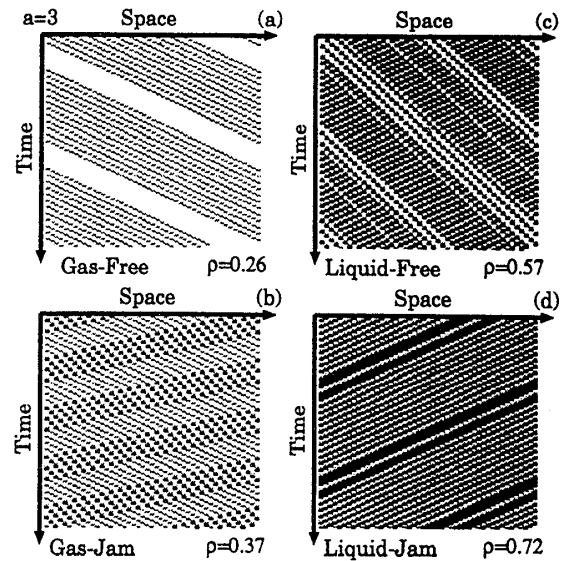


Fig.2: The space-time evolutions of the stationary states of 'a'=3 particles system, respectively (a) gas-free-flow, (b) gas-jam-flow, (c) liquid-free-flow, and (d) liquid-jam-flow. Here, the dots represent individual particles which flow from the left to the right where black dots indicates $v = 0$ particles and gray dots means $v = 1$ particles.

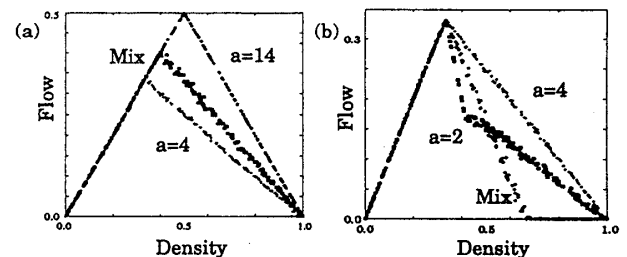


Fig.3: The typical fundamental diagrams of two pure particles systems and the mixed particles systems. The rate of particles is 1:1. (a) Decreasing type. (b) Decreasing type.

- 1) S.Wolfram: 'Cellular Automata and Complexity', Addison-Wesley, Reading, Massachusetts. (1994)
- 2) K.Nagel and M.Schreckenberg: J.Phys.I.France 2 (1992) 2221.
- 3) S.Yukawa, M.Kikuchi and S.Tadaki: J.Phys.Soc.Jpn. 63 (1994) 3609.
- 4) M.Bando, K.Hasebe, A.Nakayama, A.Shibata and Y.Sugiyama: Phys.Rev.E 51, 1035 (1995).
- 5) G.Peng and H.J.Herrmann: Phys.Rev.E 51(1995) 1745.
- 6) O.Moriyama, N.Kuroiwa, M.Matsushita, and H.Hayakawa: Phys.Rev.Lett, 80(1998) 2833.
- 7) A.Awazu: 'The Dynamics of Rule 184+a: Thermo-dynamical Behavior of The Complex Materials Flow (preprint)