

具有吸引作用的活性布朗粒子的团簇行为和自发速度对齐^{*}

陈健丽 李佳健 艾保全[†]

(华南师范大学物理学院, 原子亚原子结构与量子调控教育部重点实验室, 广东省高等学校物质
结构与相互作用基础研究卓越中心, 广州 510006)

(2024年12月19日收到; 2025年1月9日收到修改稿)

在活性布朗粒子系统中, 速度的自发对齐是可实现的, 但其机制及影响因素尚需进一步研究。本文主要探讨了具有吸引性相互作用的活性布朗粒子系统中的团簇行为和自发全局速度对齐现象。吸引性相互作用和自推进作用的耦合导致粒子趋向于与周围粒子速度对齐。通过数值模拟, 本文发现自推进作用与吸引性相互作用之间的竞争显著影响团簇的形成及其结构, 系统中会出现网状团簇、块状团簇、粒子离散分布或形成不稳定团簇, 并进而影响自发速度对齐程度。其中, 块状团簇结构最有利于自发速度对齐的实现。随着自推进作用在竞争中逐渐占优, 中低填充分数系统中速度对齐程度呈现增加-稳定-下降的趋势, 而高填充分数系统则表现为先稳定后下降的趋势。系统形成单一块状团簇时, 能够实现自发全局速度对齐。

关键词: 活性布朗粒子, 团簇行为, 自发速度对齐, 全局速度对齐

PACS: 05.40.Jc, 05.70.Ln, 45.50.-j

DOI: [10.7498/aps.74.20241746](https://doi.org/10.7498/aps.74.20241746)

CSTR: [32037.14.aps.74.20241746](https://cstr.aps.ac.cn/32037.14.aps.74.20241746)

1 引言

活性物质是一类由自驱动个体组成的非平衡系统, 涵盖了从宏观到微观尺度的多种物质, 例如鸟类^[1]、鱼群^[2]、细菌^[3]和各种人工合成粒子^[4]等。活性颗粒或生物体能够通过内部物理化学机制, 将储存的化学能或环境能量转化为动能, 从而实现自我驱动^[5,6], 因而在药物运输、心血管疾病治疗以及环境可持续发展等领域具有巨大的应用潜力^[7-9]。活性粒子的速度对齐是当前的研究热点之一。该现象最初被认为是显式对齐作用或某种微观对称性破缺的结果, 例如典型的 Vicsek 模型^[10,11]和哑铃状、杆状及细长形状的活性粒子系统^[12-14]。惯性效

应^[15]、空间约束^[16]、粒子几何不对称^[17]或偏心粒子^[18]等都可能产生对齐效应。此外, 粒子通过链连接也可能产生速度对齐^[19]。

然而, 近年来的研究表明, 在缺乏明确的对齐作用或微观对称性破缺的情况下, 活性粒子可通过某些特定机制实现自发速度对齐^[20,21]。例如, 在具有纯排斥性相互作用的活性布朗粒子模型 (active Brownian particle model, ABP 模型) 中, 已观察到局部自发速度对齐现象^[22,23]。通过将自推进作用定义为一个时滞反馈力, 可以实现自发全局速度对齐^[24], 且系统呈现出均匀相。对于具有吸引性相互作用的 ABP 模型, 发现了全局速度对齐程度较高的单一团簇^[25]。此外, 吸引性相互作用在集群生长与老化^[26]、活性粒子的相分离与集群运动^[27]、

* 国家自然科学基金(批准号: 12075090, 12475036) 和广东省自然科学基金(批准号: 2022A1515010449, 2024A1515012575) 资助的课题。

† 通信作者。E-mail: aibq@scnu.edu.cn

被动与活性粒子的分离^[28]、手性活性粒子的集群行为^[29]等方面的作用也已受到广泛关注与研究。吸引性相互作用作为一种基本的粒子间相互作用, 已被证明对活性粒子的集体行为具有重要影响。然而, 吸引相互作用如何诱导和影响速度对齐仍需进一步探讨。

为了解决这个问题, 本文研究了具有吸引性相互作用的活性布朗粒子系统中的团簇行为和自发速度对齐。团簇结构对自发速度对齐程度有重要影响, 而研究表明, 自推进作用与吸引性相互作用之间的竞争显著影响了团簇行为。随着自推进作用在竞争中的主导作用逐渐增强, 中低填充分数下, 系统依次呈现网状团簇、块状团簇、离散分布或不稳定团簇, 速度对齐程度呈现增大-稳定-减小的趋势; 高填充分数下, 系统从块状团簇向不稳定团簇转变, 速度对齐程度先保持不变后减小。其中, 自发全局速度对齐现象出现在系统形成单一稳定的块状团簇时。

2 模型与方法

考虑 N 个直径为 σ 的圆形活性布朗粒子在二维周期矩形空间中的运动, 该空间尺寸为 $L \times L$ 。粒子运动由质心位置 $\mathbf{r}_i \equiv (x_i, y_i)$ 和方向 $\mathbf{n}_i \equiv (\cos(\varphi_i), \sin(\varphi_i))$ 描述, 其中 φ_i 是粒子的自推进方向和 x 轴正方向的夹角。任意两个粒子之间的空间相互作用由截断的 Lennard-Jones 势来描述:

$$U(r_{ij}) = \begin{cases} 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right], & r_{ij} \leq 2.5\sigma, \\ 0, & r_{ij} > 2.5\sigma, \end{cases} \quad (1)$$

其中, r_{ij} 表示第 i 个与第 j 个粒子之间的距离, ϵ 表示相互作用势的势强度。粒子 i 受到的空间相互作用力为 $\mathbf{F}_i = -\nabla_i U_{\text{tot}}$, 其中 $U_{\text{tot}} = \sum_{i < j} U(r_{ij})$ 。

对于平移热波动可忽略^[15]的 ABP 模型, 描述粒子动力学性行为朗之万方程为

$$m \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \gamma v_0 \mathbf{n}_i - \gamma \frac{d\mathbf{r}_i}{dt} + \mathbf{F}_i, \quad (2)$$

$$\frac{d\varphi_i}{dt} = \sqrt{2D_r} \xi_i, \quad (3)$$

其中, v_0 为自推进速度大小, γ 为平移斯托克斯阻力系数, D_r 为旋转扩散系数, ξ_i 为具有单位方差和零平

均值的高斯白噪声, 满足 $\langle \xi_i(t) \rangle = 0$ 和 $\langle \xi_i(t) \xi_i(t') \rangle = \delta(t - t')$ 的关系。

为了定量描述系统中粒子速度的全局对齐程度, 引入全局速度对齐序参量:

$$P = \frac{1}{N} \sqrt{\left(\sum_{i=1}^N \cos \theta_i \right)^2 + \left(\sum_{i=1}^N \sin \theta_i \right)^2}, \quad (4)$$

其中, θ_i 为第 i 个粒子的速度方向与 x 轴正方向的夹角。当 $P = 1$ 时, 表示系统内粒子的速度方向完全对齐; $P = 0$ 则表示粒子的速度方向完全无序。

引入系统的极性平均参量, 说明粒子取向平均方面的信息:

$$Q = \frac{1}{N} \sqrt{\left(\sum_{i=1}^N \cos \varphi_i \right)^2 + \left(\sum_{i=1}^N \sin \varphi_i \right)^2}. \quad (5)$$

当 $Q = 1$ 时, 表示系统内粒子取向是一致的, 即其自推进速度方向完全相同; $Q = 0$ 则表明粒子取向是完全无序的。

为了研究系统的团簇行为, 引入了最大团簇分数 λ_{\max} 、局域面积分数 Φ_V 及其概率分布函数 $P(\Phi_V)$ 。当两个粒子之间的距离 $r_{ij} < 1.2\sigma$, 认为它们属于同一团簇。 λ_{\max} 表示最大团簇的粒子数与总粒子数之比。 $\lambda_{\max} = 1$ 表示所有粒子在同一团簇中, 而 $\lambda_{\max} \rightarrow 0$ 则表示粒子完全离散。为了进一步探讨团簇的结构, 采用了 Voronoi 剖分^[30], 定义第 i 个粒子的局域面积分数 Φ_V^i 为

$$\Phi_V^i = \frac{\pi\sigma^2}{4S_i}, \quad (6)$$

其中 S_i 为粒子 i 所在的泰森多边形的面积。 Φ_V^i 越大, 说明粒子 i 与其他粒子越紧密。 $P(\Phi_V)d\Phi_V$ 表示粒子的局域面积分数在 Φ_V 到 $\Phi_V + d\Phi_V$ 之间的概率, 并满足归一化条件 $\int_0^1 P(\Phi_V)d\Phi_V = 1$ 。

本文分别以 σ , $\varepsilon = k_B T$ 和 $\tau_B = \gamma\sigma^2/(k_B T)$ 作为长度、能量和时间单位。约化吸引性相互作用势强度为 $\tilde{\epsilon} = \epsilon\tau^2/(m\sigma^2)$, 为了方便表示, 下文将 $\tilde{\epsilon}$ 写作 ϵ 。采用随机欧拉算法对方程 (2) 和方程 (3) 进行数值积分, 积分步长 $dt = 10^{-4}$, 积分总时长 $T_{\text{all}} = 5 \times 10^3$, 以 dt 为间隔时间记录粒子的速度, 并设置粒子的初始位置和速度方向随机。序参量 P 和 Q 的计算结果进行了 200 次平均。考虑 $m \ll 1$ 以研究过阻尼系统。由于惯性效应只影响系统的暂态, 而 $T_{\text{all}} \gg \tau_l = m/\gamma$, 因此粒子质量对于研究结果几

乎没有影响。无特殊说明时, 其他参数分别为 $N = 500$, $m = 0.01$, $\gamma = 1$ 和 $D_r = 1$ 。

3 结果与讨论

活性布朗粒子系统的自发速度对齐现象的出现被认为是粒子的自推进作用和空间相互作用耦合的结果^[22]。在持续时间 $\tau = 1/D_r$ 内, 自推进速度方向可视为恒定。对于具有吸引性相互作用的活性粒子系统, 当团簇中的两个粒子相互靠近至 $r_{ij} < 1.12\sigma$ 时, 粒子间排斥力增大, 导致粒子的相对速度减小; 当两个粒子相互远离时, 由于彼此间的吸引作用和周围其他粒子的排斥作用的制约, 它们不能无限远离且相对速度和相对位置减小。这样, 相对速度与其相对位置、相互作用力的反馈调节同时发生在所有粒子与其近邻粒子之间, 从而使粒子趋向于与周围粒子速度对齐, 且粒子间距趋近于平衡距离 $r_{ij0} = 1.12\sigma$ 。因此, τ 越大^[31] 或粒子排布越紧密, 越有利于粒子通过反馈调节实现更大范围的自发速度对齐。然而, 在团簇外的粒子或未形成稳定团簇的系统中, 粒子几乎无法实现自推进作用与粒子间相互作用的耦合, 此时粒子运动由自推进作用主导。

粒子间吸引性相互作用使粒子彼此靠近, 形成具有共同速度的局部微小团簇^[25]; 而粒子的自推进作用则为粒子提供了挣脱“牢笼”的动能, 从而使粒子倾向于脱离粒子对。自推进作用和吸引性相互作用的竞争对粒子的运动产生了显著影响。因此,

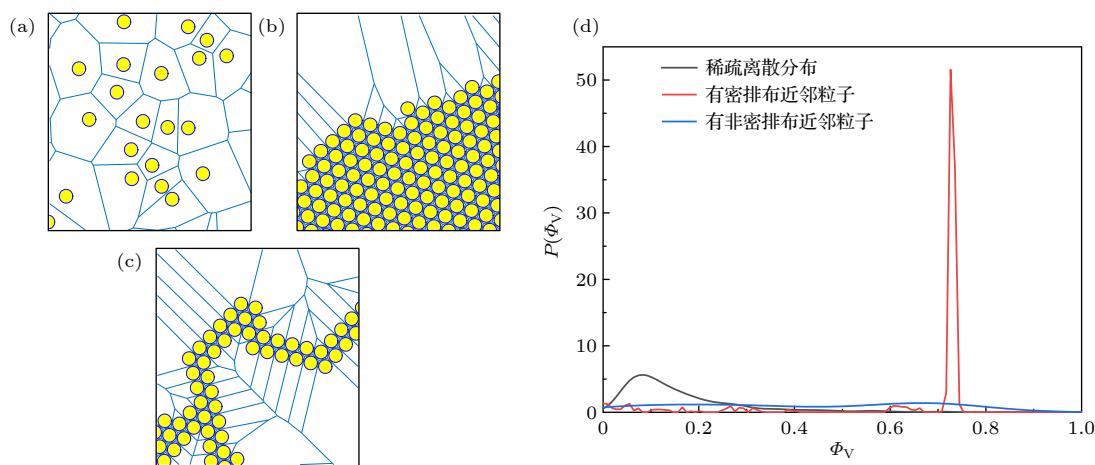


图 1 (a) 稀疏离散分布的粒子; (b) 有密排布近邻粒子的粒子; (c) 有非密排布近邻粒子的粒子; (d) 三种粒子分布下的概率分布函数 $P(\Phi_V)$ 图像, 其中黄色圆形表示粒子, 浅蓝色线表示粒子所在泰森多边形的边界

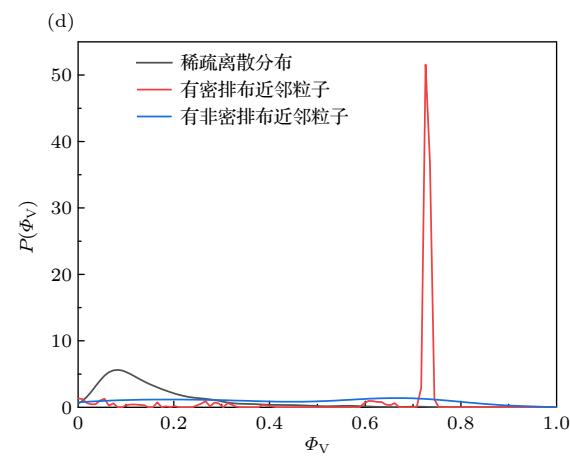
Fig. 1. (a) Particles in a sparse state; (b) particles with densely packed neighboring particles; (c) particles with non-densely packed neighboring particles; (d) the probability distribution function $P(\Phi_V)$ under three particle distributions, the yellow circles indicate the particles, while the light blue lines represent the boundaries of Thiessen polygons.

定义约化佩克莱特数 $Pe^* = Pe/\epsilon$, 即自推进作用强度与吸引性相互作用强度的比值, 用以量化这两者的竞争关系。其中佩克莱特数 $Pe = v_0\tau/\sigma$ 。

系统的填充分数 $\phi = N\pi\sigma^2/(4L^2)$ 对粒子的集体行为有重要影响。随着 ϕ 的增大, 系统有可能出现运动诱导相分离甚至结晶。以这两种特殊的集体行为能否实现为划分依据, 将系统划分为低填充分数系统 ($0 < \phi < 0.4$)、中填充分数系统 ($0.4 \leq \phi < 0.7$) 以及高填充分数系统 ($\phi \geq 0.7$), 并分别以 $\phi = 0.1$, $\phi = 0.4$ 和 $\phi = 0.7$ 的系统作为代表。

3.1 典型粒子分布

图 1(a)—(c) 分别展示了系统中几种典型的粒子分布, 图 1(d) 展示了相应的 $P(\Phi_V)$ 图像。图 1(a) 中稀疏离散分布的粒子几乎没有近邻粒子, 因此 Φ_V 较小, 相应的 $P(\Phi_V)$ 曲线出现 $\Phi_V \in (0, 0.2)$ 的宽峰 (低 Φ_V 峰)。图 1(b) 展示了有密排布近邻粒子的粒子, 其近邻粒子形成了正六边形结构。此时粒子在平衡位置附近有微小振动, $r_{ij} \approx 1.12\sigma$, 因此其 $\Phi_V \approx 0.72$, 相应的 $P(\Phi_V)$ 曲线出现 $\Phi_V \in (0.7, 0.75)$ 的高且窄的峰 (高 Φ_V 峰)。图 1(c) 展示了有非密排布近邻粒子的粒子, 其 Φ_V 值主要取决于由粒子在带状结构中的位置: 拐角内侧粒子 $\Phi_V \rightarrow 0.7$; 拐角外侧粒子 $\Phi_V \rightarrow 0$; 其余粒子的 Φ_V 值则在中间值附近分布。因此, 由粒子带连接而形成的网状结构的 $P(\Phi_V)$ 曲线呈现为在 $\Phi_V \in (0, 1)$ 的分布较均匀的曲线。



3.2 低填充分数的系统

图 2(a) 描述了低填充分数 ($\phi = 0.1$) 的系统在不同 ϵ 下, 最大团簇分数 λ_{\max} 随 Pe^* 的变化。对于 $\epsilon = 100$ 的系统, 随着 Pe^* 的增大, λ_{\max} 先保持为 1, 然后减小并趋近于 0; 对于其他 3 个系统, λ_{\max} 随着 Pe^* 的增大而由 $\lambda_{\max} < 1$ 增至 $\lambda_{\max} = 1$ 并保持不变, 然后减小并趋近于 0, 且 ϵ 越小, $\lambda_{\max}(Pe^* \rightarrow 0)$ 越小。图 2(b) 描述了当 $\epsilon = 100$ 时, 不同 Pe^* 下的概率分布函数 $P(\Phi_V)$ 图像。对于 $\epsilon = 100$ 的系统, 当 $Pe^* \rightarrow 0$ 时, $\lambda_{\max} = 1$ 且 $P(\Phi_V)$ 在 $\Phi_V \in (0, 1)$ 分布均匀, 表明形成了单一的网状团簇, 如图 3(a) 所示;

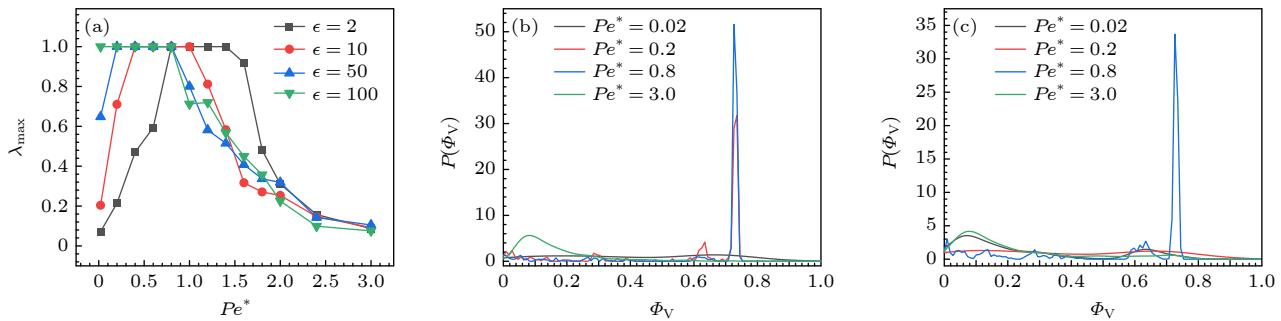


图 2 低填充分数 ($\phi = 0.1$) 系统中, (a) 不同 ϵ 下, 最大团簇分数 λ_{\max} 与约化佩克莱特数 Pe^* 的关系; (b), (c) $\epsilon = 100$ 和 $\epsilon = 2$ 的系统中, 不同 Pe^* 下的概率分布函数 $P(\Phi_V)$

Fig. 2. In a low packing fraction system ($\phi = 0.1$), (a) the maximum cluster fraction λ_{\max} as a function of the reduced Peclet number Pe^* for different ϵ ; (b), (c) the probability distribution function $P(\Phi_V)$ for different Pe^* when $\epsilon = 100$ and $\epsilon = 2$, respectively.

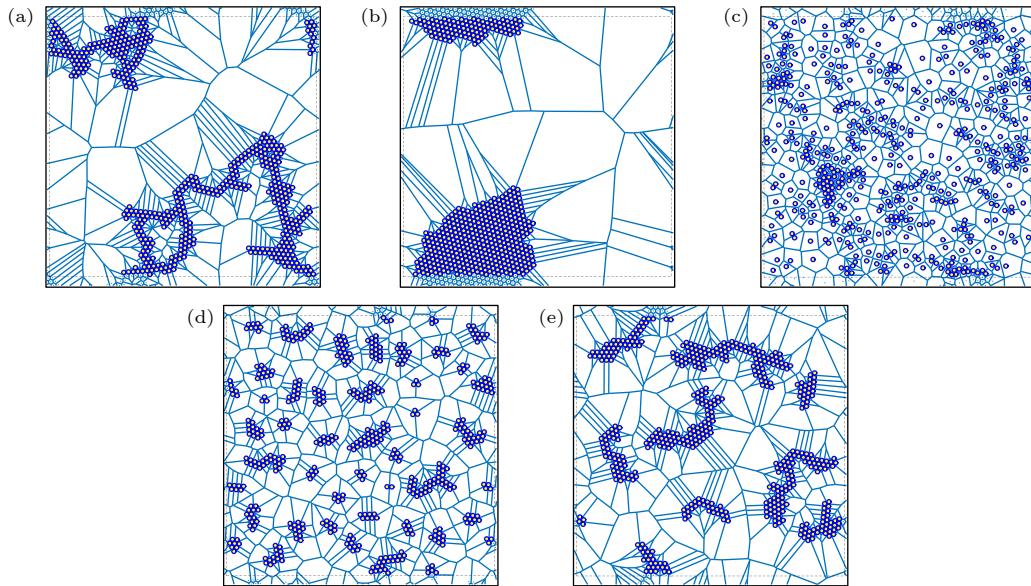


图 3 低填充分数系统 ($\phi = 0.1$) 的快照 (a) 网状团簇结构, $Pe^* = 0.02$, $\epsilon = 100$; (b) 块状团簇结构, $Pe^* = 0.8$, $\epsilon = 100$; (c)–(e) 离散结构, 其中 (c) $Pe^* = 3.0$, $\epsilon = 100$; (d) $Pe^* = 0.02$, $\epsilon = 2$; (e) $Pe^* = 0.2$, $\epsilon = 2$; 线条意义同图 1

Fig. 3. Snapshots of systems with a low packing fraction ($\phi = 0.1$): (a) The network-like cluster structure, where $Pe^* = 0.2$ and $\epsilon = 100$; (b) the block-like cluster structure, where $Pe^* = 0.8$ and $\epsilon = 100$; (c)–(e) the discrete structure, where (c) $Pe^* = 3.0$ and $\epsilon = 100$; (d) $Pe^* = 0.02$ and $\epsilon = 2$; (e) $Pe^* = 0.2$ and $\epsilon = 2$. The line types are the same as those in Fig. 1.

当 $Pe^* = 0.2$ 或 $Pe^* = 0.8$ 时, $\lambda_{\max} = 1$ 且 $P(\Phi_V)$ 曲线呈现单一的高 Φ_V 峰, 表明形成了单一的块状团簇, 如图 3(b) 所示; 当 Pe^* 很大时, $\lambda_{\max} \rightarrow 0$ 且 $P(\Phi_V)$ 曲线呈现单一的低 Φ_V 峰, 说明粒子稀疏离散分布, 如图 3(c) 所示。图 2(c) 描述了 $\epsilon = 2$ 的系统中不同 Pe^* 下的 $P(\Phi_V)$ 图像。 $\epsilon = 2$ 与 $\epsilon = 100$ 的系统的不同在于: $\epsilon = 2$ 的系统中, 当 $Pe^* \rightarrow 0$ 时, $\lambda_{\max} \rightarrow 0$ 且 $P(\Phi_V)$ 曲线分别在 $\Phi_V \in (0, 0.2)$ 和 $\Phi_V \in (0.5, 0.8)$ 存在宽峰, 其快照如图 3(d); 当 $Pe^* = 0.2$ 时, $\lambda_{\max} \approx 0.2$ 且 $P(\Phi_V)$ 曲线在 $\Phi_V \in (0, 1)$ 分布均匀, 其快照如图 3(e)。图 4 对这种差异进行了讨论。

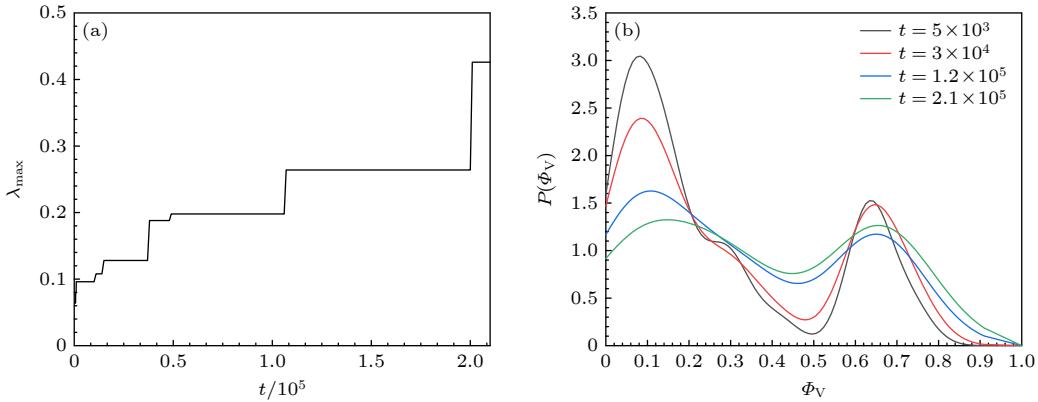
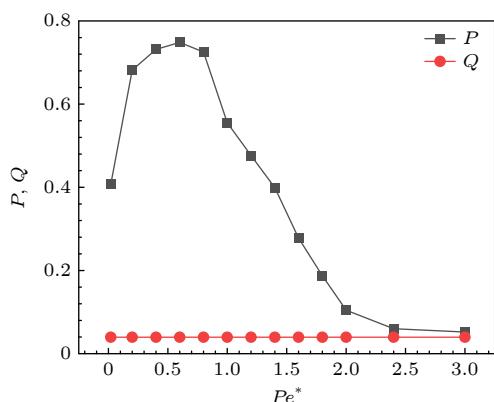
图 4 (a) 最大团簇分数 λ_{\max} 随时间的变化; (b) 不同时间下的概率分布函数 $P(\Phi_V)$;

Fig. 4. (a) Time evolution of the largest cluster fraction λ_{\max} ; (b) the probability distribution function $P(\Phi_V)$ at different t . The other parameters are $\phi = 0.1$, $\epsilon = 2$ and $Pe^* = 0.02$, respectively.

图 4 展示了当 $\epsilon = 2$ 且 $Pe^* = 0.02$ 时, 最大团簇分数 λ_{\max} 和概率分布函数 $P(\Phi_V)$ 随时间变化的情况。随着时间的增加, λ_{\max} 呈阶梯状增大且 $P(\Phi_V)$ 曲线中的两个峰间的峰谷逐渐变浅。这表明经过足够长的时间后, 将趋向于实现 $\lambda_{\max} = 1$ 且 $P(\Phi_V)$ 在 $\Phi_V \in (0, 1)$ 均匀分布, 即系统将形成网状团簇结构。这是因为当 $\epsilon = 2$ 且 $Pe^* = 0.02$ 时, 自推进速度 $v_0 = 0.04$, 系统内粒子运动缓慢且方向随机, 需要很长的时间才能够相遇并形成大团簇。因此, 当时间足够长时, 图 2(b) 将趋向于与图 2(c) 一致, 即不同 ϵ 的系统都将随着 Pe^* 的增大而呈现由网状团簇到块状团簇的转变, 并最终趋向于形成离散态。

图 5 描述了全局速度对齐序参量 P 和极性平均参量 Q 随约化佩克莱特数 Pe^* 的变化。随着 Pe^* 值的增大, Q 值始终保持 $Q \rightarrow 0$, 表明其粒子取向

图 5 全局速度对齐序参量 P 和极性平均参量 Q 随 Pe^* 的变化,

其他参数分别为 $\phi = 0.1$ 和 $\epsilon = 100$

是无序的; P 值则呈现出增大-几乎不变-减小的趋势。当 $Pe^* \rightarrow 0$ 时, 系统形成了网状团簇, 粒子与相邻粒子的速度的微小偏差由于带状结构而被放大, 从而使 $P < 0.5$, 如图 6(a) 所示。随着 Pe^* 的增大, 系统由网状团簇结构向块状团簇结构转变, 粒子排布更紧密, 更容易通过反馈调节机制实现速度对齐, 因此 P 值随之增大至 $P \rightarrow 0.8$, 出现了较高程度的全局速度对齐, 如图 6(b) 所示。 $Pe^* = 3.0$ 时, 粒子分布稀疏离散, 其运动由自推进作用主导, 因此 $P \rightarrow 0$, 如图 6(c) 所示。

3.3 中填充分数的系统

图 7(a) 描述了中填充分数 ($\phi = 0.4$) 的系统的最大团簇分数 λ_{\max} 随约化佩克莱特数 Pe^* 的变化。随着 Pe^* 的增大, λ_{\max} 先保持为 1, 然后减小且 $\lambda_{\max} > 0.8$ 。图 7(a) 还描述了序参量 P 和极性平均参量 Q 随 Pe^* 的变化。随着 Pe^* 值的增大, Q 值始终保持 $Q \rightarrow 0$, P 值则呈现出增大-几乎不变-减小的趋势。图 7(b) 展示了在不同 Pe^* 值下的 $P(\Phi_V)$ 图像。当 $Pe^* \rightarrow 0$ 时, $\lambda_{\max} = 1$, $P(\Phi_V)$ 曲线上出现一个 $\Phi_V \in (0.6, 0.8)$ 的宽峰且峰值横坐标 $\Phi_V > 0.72$, 表明出现了网状结构且有较多粒子密排布, 即形成了粗网状结构。因此, $0.5 < P < 0.8$, 呈现局部速度对齐, 如图 8(a)。当 $Pe^* = 0.8$ 时, $\lambda_{\max} = 1$ 且 $P(\Phi_V)$ 曲线呈现单一的高 Φ_V 峰, 表明形成了单一块状团簇。因此 $P \rightarrow 0.9$, 出现了全局速度对齐, 如图 8(b)。当 $Pe^* = 3.0$ 时, 即使 $0.8 < \lambda_{\max} < 1$ 表明了系统中存在大团簇, 但 $P(\Phi_V)$ 曲线出现一个 $\Phi_V \in (0.6, 0.8)$ 的宽峰且峰值横坐标 $\Phi_V < 0.72$, 表

明所形成的团簇中粒子并没有位于平衡位置, 而是更疏松的。这揭示了系统内由于运动诱导相分离形

成了不稳定团簇, 自发速度对齐被团簇的不稳定性破坏, 因此 $P \rightarrow 0$, 如图 8(c)。

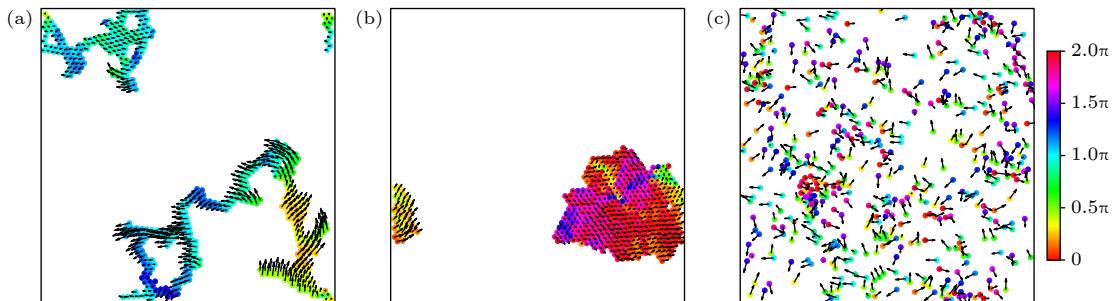


图 6 粒子的位置及速度的典型快照 (a) $Pe^* = 0.02$; (b) $Pe^* = 0.8$; (c) $Pe^* = 3.0$; 其中, 粒子颜色表示其速度方向与 x 轴正方形的夹角, 黑色箭头标注了粒子的速度大小和方向

Fig. 6. Typical snapshots of the position and velocity of particles: (a) $Pe^* = 0.02$; (b) $Pe^* = 0.8$; (c) $Pe^* = 3.0$. The other parameters are $\phi = 0.1$ and $\epsilon = 100$. The color of the particles represents the angle between their velocity direction and the positive x -axis, with black arrows indicating the magnitude and direction of each particle's velocity.

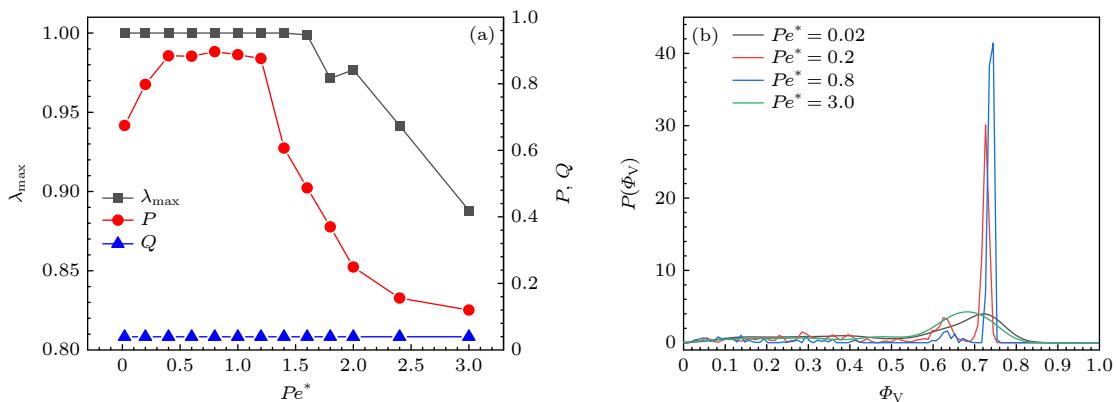


图 7 (a) 最大团簇分数 λ_{\max} 、全局速度对齐序参量 P 和极性平均参量 Q 随 Pe^* 的变化; (b) 不同 Pe^* 下的概率分布函数 $P(\Phi_V)$; 其他参数分别为 $\phi = 0.4$ 和 $\epsilon = 100$

Fig. 7. (a) Variation of the largest cluster fraction λ_{\max} , the global velocity alignment order P and the polarity averaged order Q with Pe^* ; (b) the probability distribution function $P(\Phi_V)$ for different Pe^* . The other parameters are $\phi = 0.4$ and $\epsilon = 100$.

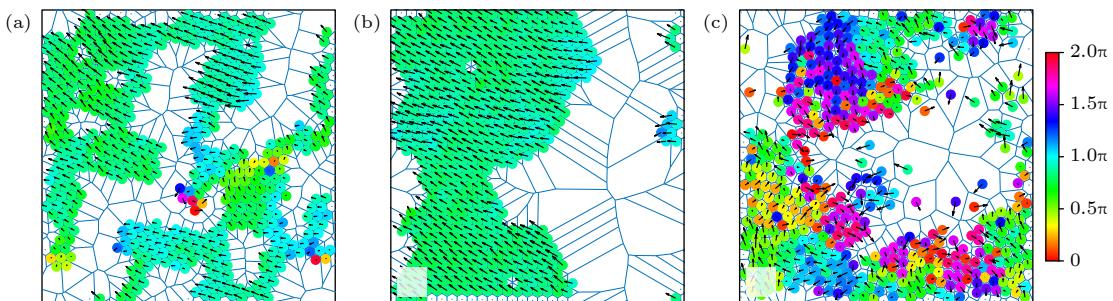


图 8 粒子的位置及速度的典型快照 (a) $Pe^* = 0.02$; (b) $Pe^* = 0.8$; (c) $Pe^* = 3.0$; 其中, 粒子的颜色表示其速度方向与 x 轴正方形的夹角, 黑色箭头标注了每个粒子的速度大小和方向, 浅蓝色线表示粒子所在泰森多边形的边界

Fig. 8. Typical snapshots of the position and velocity of particles: (a) $Pe^* = 0.02$; (b) $Pe^* = 0.8$; (c) $Pe^* = 3.0$. The other parameters are $\phi = 0.4$ and $\epsilon = 100$. The color of the particles indicates the angle between their velocity and the positive x -axis, with black arrows showing the magnitude and direction of particles' velocity, and light blue lines representing the boundaries of the Thiessen polygons.

3.4 高填充分数的系统

图 9(a) 描述了高填充分数 ($\phi = 0.7$) 的系统的最大团簇分数 λ_{\max} 、序参量 P 和极性平均参量 Q 随 Pe^* 的变化。随着 Pe^* 的增大，从 $\lambda_{\max} = 1$ 变为 $\lambda_{\max} \rightarrow 1$ ， Q 值始终保持 $Q \rightarrow 0$ ， P 值则先在 $P = 0.9$ 附近几乎不变，然后减小但保持 $P > 0.7$ 。图 9(b) 展示了在不同 Pe^* 值下的 $P(\Phi_V)$ 图像。当 $Pe^* \rightarrow 0$ 或 $Pe^* = 0.8$ 时， $\lambda_{\max} = 1$ 且 $P(\Phi_V)$ 曲线呈现单一的高 Φ_V 峰，表明形成了块状团簇。因此，当 $Pe^* \leq 1.6$ 时， P 值几乎不变且 $P \gtrsim 0.9$ ，出现了全局速度对齐。当 $Pe^* = 3.0$ 时， $\lambda_{\max} \rightarrow 1$ ， $P(\Phi_V)$ 曲线呈现 $\Phi_V \in (0.6, 0.8)$ 的宽峰且峰值横坐标 $\Phi_V > 0.72$ ，表明系统中形成不稳定团簇，但大部分粒子由于高 ϕ 值而能够维持在平衡位置附近，形成不稳定的块状团簇。因此，即使团簇的不稳定性阻碍了粒子的自发速度对齐，但粒子之间的距离始终较小，仍能保持自推进与空间相互作用的较强的耦合，所以 P 值的下降幅度较小。

值得注意的是，本文结果存在有限尺寸效应，可以用持续长度 $l_p = v_0\tau$ 和系统尺寸 L 来衡量。当 $l_p \gg L$ 时，系统内趋向于形成全局速度对齐；当 $l_p \sim L$ 时，形成局部速度对齐，且全局速度对齐程度较高；当 $l_p \ll L$ 时，则呈现无序态。然而，在实验和应用中，通常研究较小尺寸的系统，因此有望通过调整参数来实现全局速度对齐。此外，本研究还忽略了平动热噪声的影响，因为平动热噪声增加了粒子运动的随机性，会扰乱粒子的自发速度对齐。当平动热噪声很大以至于在粒子运动中占据主导地位时，系统将呈现速度无序态。

实际上，自推进作用与吸引作用在速度对齐效应上同时存在竞争和协同效应。粒子排布越密集越有利于速度对齐效应的实现。当吸引性作用趋近于无限大以至于自推进作用可以忽略时，粒子分布由系统初始状态决定：当初始粒子分布离散且稀疏时，由于吸引性作用很强且作用范围有限，粒子就近相互吸引形成离散的小团簇，并经过足够长时间后就近连接形成网状结构，因此全局速度对齐程度趋向于 0；当粒子分布密集时，离散的小团簇能够结合形成大团簇甚至形成单一块状团簇，因此全局速度对齐程度相对较高。当吸引性作用很弱以至于可以忽略时，粒子的运动由自推进作用主导，因此全局速度对齐程度也趋向于 0。但当两者的强度相

当时，网状结构由于自推进作用而松动，导致粒子带断裂并重新连接，或粒子带转向，直至形成更稳定的块状团簇结构。此时大部分粒子有密排布的近邻粒子，有利于全局速度对齐的实现。

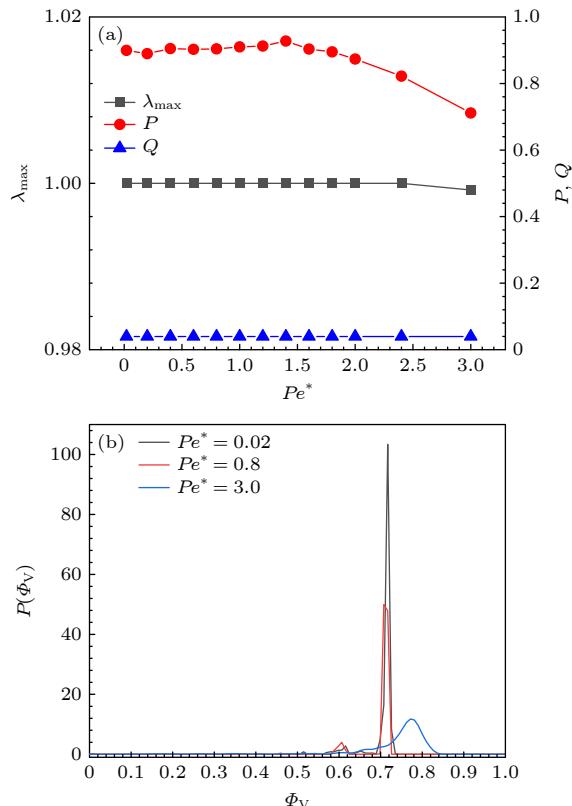


图 9 (a) 最大团簇分数 λ_{\max} 、全局速度对齐序参量 P 和极性平均参量 Q 随 Pe^* 的变化; (b) 不同 Pe^* 下，概率分布函数 $P(\Phi_V)$ 的图像; 其他参数分别为 $\phi = 0.7$ 和 $\epsilon = 100$

Fig. 9. (a) Variation of the largest cluster fraction λ_{\max} , the global velocity alignment order P and the polarity averaged order parameter Q with Pe^* ; (b) the probability distribution function $P(\Phi_V)$ for different Pe^* . The other parameters are $\phi = 0.7$ and $\epsilon = 100$.

4 结 论

本文探讨了具有吸引性相互作用的活性布朗粒子系统的团簇行为和自发速度对齐。粒子排布越紧密，越有利于粒子与周围粒子实现自推进作用和空间相互作用的耦合，从而促进大范围的自发速度对齐。这两种作用的竞争决定了系统的团簇形成及其结构，进而影响了全局速度对齐程度。在中低填充分数下，当吸引性相互作用占主导、自推进作用可忽略时，由于粒子初始位置随机，系统形成了网状团簇结构，粒子速度的微小差异被带状结构放大，阻碍了速度对齐。其中，低填充分数系统形成

细网状团簇，中填充分数系统形成粗网状团簇，因此前者的速度对齐程度更低。随着自推进作用逐渐占优，系统由网状团簇转变为块状团簇，粒子密排布，导致全局速度对齐。当自推进作用占主导、吸引作用可忽略时，粒子稀疏分布或形成不稳定团簇，导致系统速度无序。在高填充分数下，粒子初始分布密集，即使吸引性作用占主导、自推进作用可忽略，系统也能够形成块状团簇而导致全局速度对齐。当自推进作用占主导时，尽管团簇的不稳定性在一定程度上阻碍了自发速度对齐，但粒子依然呈密排布，导致了局部速度对齐。因此，通过调节 Pe^* 值，可以促使系统形成单一稳定的块状团簇，导致自发全局速度对齐的实现。

与以往的研究不同，由吸引性相互作用和自推进作用的耦合而导致的粒子速度对齐机制是一种隐式的对齐效应，即没有对齐作用力的各向同性的粒子也能够实现自发速度对齐。并且对比与其他新颖的隐式对齐效应，具有吸引力的 ABP 系统中形成的团簇更加单一稳定。因此，该工作能够促进人们理解具有吸引性相互作用的活性布朗粒子系统的自发速度对齐现象，并为研究动物群体运动^[32]、细胞迁移^[33]等缺乏显式速度对齐相互作用的集群行为提供了新视角。研究结果还可为活性胶体的设计提供参考，推动对活性粒子定向运动的深入研究。

参考文献

- [1] Emlen J T 1952 *The Auk* **69** 160
- [2] Becco C, Vandewalle N, Delcourt J, Poncin P 2006 *Phys. A* **367** 487
- [3] Fletcher D A, Geissler P L 2009 *Annu. Rev. Phys. Chem.* **60** 469
- [4] Bechinger C, Di Leonardo R, Löwen H, Reichhardt C, Volpe G, Volpe G 2016 *Rev. Mod. Phys.* **88** 045006
- [5] Paxton W F, Kistler K C, Olmeda C C, Sen A, St Angelo S K, Cao Y, Mallouk T E, Lammert P E, Crespi V H 2004 *J. Am. Chem. Soc.* **126** 13424
- [6] Ramaswamy S 2010 *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* **1** 323
- [7] Nelson B J, Kaliakatsos I K, Abbott J J 2010 *Annu. Rev. Biomed. Eng.* **12** 55
- [8] Yang W, Misko V R, Nelissen K, Kong M, Peeters F M 2012 *Soft Matter* **8** 5175
- [9] Patra D, Sengupta S, Duan W, Zhang H, Pavlick R, Sen A 2013 *Nanoscale* **5** 1273
- [10] Vicsek T, Czirók A, Ben-Jacob E, Cohen I, Shochet O 1995 *Phys. Rev. Lett.* **75** 1226
- [11] Grégoire G, Chaté H 2004 *Phys. Rev. Lett.* **92** 025702
- [12] Peruani F, Deutsch A, Bär M 2006 *Phys. Rev. E* **74** 030904
- [13] Aranson I S, Tsimring L S 2003 *Phys. Rev. E* **67** 021305
- [14] Ginelli F, Peruani F, Bär M, Chaté H 2010 *Phys. Rev. Lett.* **104** 184502
- [15] Caprini L, Marconi U M B 2021 *Soft Matter* **17** 4109
- [16] Lushi E, Wioland H, Goldstein R E 2014 *Proc. Natl. Acad. Sci.* **111** 9733
- [17] He J X, Qin C R, Xu T L, Chen K, Tian W D 2022 *Acta Phys. Sin.* **71** 150501 (in Chinese) [何景熙, 秦超然, 许天亮, 陈康, 田文得 2022 物理学报 **71** 150501]
- [18] Wang J H, Xu T L, He J X, Chen K, Tian W D 2023 *Chin. Phys. B* **32** 070501
- [19] Xu T L, Qin C R, Tang B, Gao J C, Zhou J, Chen K, Zhang T H, Tian W D 2024 *J. Chem. Phys.* **161** 064905
- [20] Lam K D N T, Schindler M, Dauchot O 2015 *New J. Phys.* **17** 113056
- [21] Giavazzi F, Paoluzzi M, Macchi M, Bi D, Scita G, Manning M L, Cerbino R, Marchetti M C 2018 *Soft matter* **14** 3471
- [22] Caprini L, Marini Bettolo Marconi U, Puglisi A 2020 *Phys. Rev. Lett.* **124** 078001
- [23] Caprini L, Marconi U M B, Maggi C, Paoluzzi M, Puglisi A 2020 *Phys. Rev. Res.* **2** 023321
- [24] Kopp R A, Klapp S H 2023 *Europhys. Lett.* **143** 17002
- [25] Caprini L, Löwen H 2023 *Phys. Rev. Lett.* **130** 148202
- [26] Chakraborty S, Das S K 2020 *J. Chem. Phys.* **153** 044905
- [27] Barberis L, Peruani F 2019 *J. Chem. Phys.* **150** 144905
- [28] Hrishikesh B, Mani E 2023 *Soft Matter* **19** 225
- [29] Hrishikesh B, Mani E 2022 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **24** 19792
- [30] Du Q, Faber V, Gunzburger M 1999 *SIAM Rev.* **41** 637
- [31] Digregorio P, Levis D, Suma A, Cugliandolo L F, Gonnella G, Pagonabarraga I 2018 *Phys. Rev. Lett.* **121** 098003
- [32] Ballerini M, Cabibbo N, Candelier R, Cavagna A, Cisbani E, Giardina I, Lecomte V, Orlandi A, Parisi G, Procaccini A, Viale M, Zdravkovic V 2008 *Proc. Natl. Acad. Sci.* **105** 1232
- [33] Alert R, Trepat X 2020 *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* **11** 77

Cluster behavior and spontaneous velocity alignment of active Brownian particles with attractive interactions*

CHEN Jianli LI Jiajian AI Baoquan †

(Guangdong Basic Research Center of Excellence for Structure and Fundamental Interactions of Matter, Key Laboratory of Atomic and Subatomic Structure and Quantum Control (Ministry of Education), School of Physics, South China Normal University, Guangzhou 510006, China)

(Received 19 December 2024; revised manuscript received 9 January 2025)

Abstract

Spontaneous velocity alignment can occur in active particle systems. As a fundamental inter-particle interaction, the attractive interaction is shown to significantly affect the collective behavior of active particles. However, the mechanisms by which attractive interactions induce and affect velocity alignment are still unclear. To solve this problem, we conduct numerical simulations by using the stochastic Euler method to investigate cluster behavior and spontaneous global velocity alignment in active particle systems with attractive interactions. The local area fraction of particles and its corresponding probability distribution function are computed to capture the system's cluster behavior. The global velocity alignment order parameter and the polar average parameter are also calculated to characterize the particle velocity directions. Based on whether motion-induced phase separation and crystallization can be achieved, the system is categorized into low, medium, and high packing fraction regimes, and the cluster behavior and velocity alignment within each regime are systematically investigated.

Spontaneous velocity alignment results from the coupling of self-propulsion and attractive interactions. During the persistent time, feedback regulation involving particle velocities, relative positions, and interaction forces operates simultaneously among neighboring particles. This process leads to the alignment of particle velocities with those of their neighbors, ultimately achieving large-scale alignment. The closer the particles' arrangement, the more conducive it is to the coupling of self-propulsion and spatial interactions, thus promoting large-scale spontaneous velocity alignment. The competition between these two effects governs the formation and structure of clusters, ultimately affecting global velocity alignment.

At low and medium packing fractions, when the attractive interaction dominates and self-propulsion is negligible, particles attract each other to form discrete banded clusters due to the strong attraction and limited range of interaction. Over time, these clusters connect to form a network-like cluster. Small differences in particle velocity are amplified by the banded structure, hindering velocity alignment. In the systems with low packing fractions, a thin network-like cluster forms, whereas in systems with medium packing fractions, a thicker network-like cluster forms, leading to lower velocity alignment in the former. As self-propulsion becomes more dominant, the network structure loosens, causing the particle bands to break and reconnect until a more stable block-like cluster structure is formed. The system transitions from a network-like cluster to a block-like cluster, with particles becoming closely packed, resulting in global velocity alignment. When self-propulsion dominates and attraction is negligible, particle motion is mainly driven by self-propulsion, resulting in sparse particle distribution or unstable clusters, leading to disordered velocity. Thus, as self-propulsion competes with

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 12075090, 12475036) and the Natural Science Foundation of Guangdong Province, China (Grant Nos. 2022A1515010449, 2024A1515012575).

† Corresponding author. E-mail: aibq@scnu.edu.cn

attractive interactions and becomes dominant, the global velocity alignment increases from low values to a higher plateau and then decreases, approaching zero.

At high packing fractions, the initial distribution of particles is dense. Even when the attractive interaction dominates and self-propulsion is negligible, the system forms a block-like cluster, leading to global velocity alignment. As self-propulsion becomes dominant, the instability of the clusters partially hinders spontaneous velocity alignment. Nevertheless, the particles remain densely packed, resulting in local velocity alignment. Thus, as self-propulsion transitions from weak to dominant in competition with attractive interactions, global velocity alignment first plateaus at a higher value, then decreases, but remains above 0.5.

It is important to note that the spontaneous velocity alignment discussed here exhibits a finite size effect. In experimental setups and applications involving active particles, smaller systems are usually studied. By modulating the balance between self-propulsion and attractive interactions in these systems, a broader range of spontaneous velocity alignment can be achieved, which may even lead to global velocity alignment.

Keywords: active Brownian particles, cluster behavior, spontaneous velocity alignment, global velocity alignment

PACS: 05.40.Jc, 05.70.Ln, 45.50.-j

DOI: [10.7498/aps.74.20241746](https://doi.org/10.7498/aps.74.20241746)

CSTR: [32037.14.aps.74.20241746](https://cstr.aps.org/32037.14.aps.74.20241746)



具有吸引作用的活性布朗粒子的团簇行为和自发速度对齐

陈健丽 李佳健 艾保全

Cluster behavior and spontaneous velocity alignment of active Brownian particles with attractive interactions

CHEN Jianli LI Jiajian AI Baoquan

引用信息 Citation: [Acta Physica Sinica](#), 74, 060501 (2025) DOI: 10.7498/aps.74.20241746

CSTR: 32037.14.aps.74.20241746

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.74.20241746>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

具有不同扩散系数的活性手征粒子分离

Separation of active chiral particles with different diffusion coefficients

物理学报. 2024, 73(20): 200201 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240686>

冲击速度对单晶镍层裂行为的影响规律及作用机制

Law and mechanism of impact velocity on spalling and fracture behavior of single crystal nickel

物理学报. 2024, 73(16): 164601 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240244>

非保守力作用下二维耦合布朗粒子的定向输运

Directional transport of two-dimensional coupled Brownian particles subjected to nonconserved forces

物理学报. 2023, 72(4): 040501 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20221741>

强吸收纳米粒子团簇的光泳力悬浮及热泳力下的迁移行为

Levitation of air-borne strong-absorbing nanoparticle clusters dominated by photophoretic force and migration behavior under thermophoretic force

物理学报. 2024, 73(13): 134206 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240288>

温差条件下包含手征活性粒子的封闭圆环的输运

Transport of closed ring containing chiral active particles under transversal temperature difference

物理学报. 2023, 72(3): 030501 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20221772>

有限多孔介质诱导活性哑铃的聚集行为

Finite porous medium induced aggregation behavior of active dumbbells

物理学报. 2024, 73(16): 160502 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240784>