《欧洲物理
快报》草稿

涌现 手性自驱动杆系统中的 ent 状态

Rüdiger Kürsten[1,2,3] and Demian Levis[1,2]

[1] 凝聚态物理系，巴塞罗那大学 - *C. Mart´ı Franqu`es 1, 08028* 巴塞罗那，西班牙。[2] 巴塞罗那大学复杂系统研究所 - *C. Mart´ı i Franqu`es 1, E08028* 巴塞罗那，西班牙。[3] 格赖夫斯瓦尔德大学物理研究所，*Felix-Hausdorff-Str. 6, 17489* 格赖夫斯瓦尔德，德国

arXiv:2302.04740v1 [cond-mat.soft] 9 Feb 2023

pacs 05.40.Jc – 布朗运动pacs 05.20.Dd– 动力学理论pacs 64.60.Cn– 有序-无序转变

摘要 – 我们研究二维中本征手性的自推进粒子。这些粒子以固定频率自旋，并受到向列对齐相互作用和旋转噪声的影响。通过均匀平均场动力学理论和空间分辨平均场动力学理论，我们识别出多种不同的群集态。我们利用基于主体的模拟证实了预测相的存在，尤其是在低频下出现的均匀向列相，以及在更高频率下出现的微群集图案相；后者以有限尺寸的向列团簇为特征。我们强调，模拟时必须格外谨慎，以避免伪影，并提出一种非标准模拟技术来避免这些伪影。

引言。 – 由自驱
p动相互作用单元组成的活性系统呈现出丰富多样的非
e平衡动态结构，这些结构在平
l衡条件下几乎无法实现 [1]。一个显著的例子是不同尺度上集
o体运动的出现，从鸟群
t到胶体组装体 [2, 3]。从理论角度看——
p点来看，这种群聚现象已在
dVicsek 式简单模型的框架下得到研究 `，这类模型
c考虑点状自驱动粒子，使其速度与周围环境相适应——
i——其速度与邻域相适应 [4, 5]。此外
r近年来，在自推进的基础上，自旋转也已成为研究内容
i引入典型活性粒子模型 [6–9], 旨在
t描述圆周游动粒子，即沿着
m在二维（2D）中运动，沿着（有噪声的）圆形
t轨迹运动，并具有给定的手性。圆周游动粒子
a是手性活性物质的一个实例 [9], , 例如手性
m
微管 [10], 、弯曲聚合物 [11, 12], 、靠近壁面的精子 [13] 或手性自推进胶体 [14–16]„ 类似的手性运动也可以在更大的颗粒尺度 [17, 18]上实现。

对带有极性速度对齐相互作用的手性活性粒子（或圆周游动粒子）的简单干燥模型进行分析后发现，手性并不会显著改变Vicsek模型的集群转变，但会控制对称性破缺相中不同类型结构的出现 [6]。在大多数情况下，圆周游动粒子的一种主要相互作用很可能源于各向异性碰撞，这是由其细长形状所致。这通常会产生有效的向列对齐，而非极性对齐 [19]。尽管这类自推进杆 [20, 21] 的对齐部分依赖于排斥体积相互作用，但一种广为采用的简化图景（保留问题的对称性）是考虑Vicsek模型的向列版本：粒子是点状的，运动具有极性，但速度对齐具有向列性 [22, 23]。在此，我们采用这一视角，研究手性（表现为以给定固有频率自旋转 ω）对向列型点状自推进杆集体行为的影响。近期一项研究也考察了具有旋转频率分布的向列型Vicsek手性粒子，以探究有序态抵御此类淬火无序的稳定性 [8]。本文将聚焦于单频情形，以及由固有频率控制的图样的出现 ω。

本文中，我们通过动力学理论和基于粒子的模拟，研究二维（2D）中具有向列排列倾向的点状手性活性粒子的稳态相。为提高模拟效率，我们针对所研究的模型优化了一种非标准二阶离散格式。动力学理论是在对 N 体福克–普朗克方程采用平均场近似的基础上推导而得。为了解该系统的相行为，我们对所得单体方程的均匀解进行线性稳定性分析，

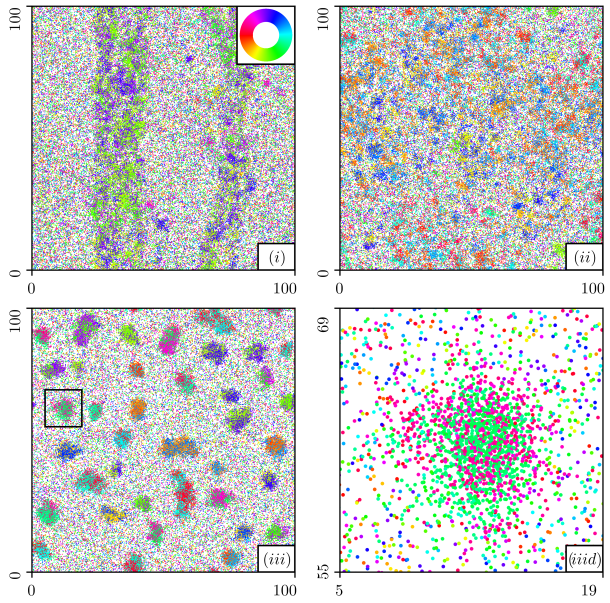

图 1：模拟 $N = 10^5$ 个粒子所得有序相的典型快照，粒子按照其取向着色（使用（i）中的色轮）。（i）非手性向列带（$\omega = 0$，$\Gamma = 0.14$）。（ii）在大尺度上均匀的向列序（$\omega = 1$，$\Gamma = 0.18$）。（iii）向列微群集（$\omega = 3$，$\Gamma = 0.18$）。（$iiid$）向列微群集的详细视图，在（iii）中以黑色方框标出。数值细节见补充材料 [24]。

随后将我们的发现与微观模拟进行比较。我们发现，适中的 ω 会使向列带失稳，产生一种没有明显图样、但整体上相当均匀的向列态（见图 1）；而在这一参数范围内，极性相互作用会引发宏观相分离 [6]。更高的频率会诱发旋转微群集的形成，类似于极性情形 [6],，但具有向列序。如下文所示，稳定性分析得出的预期——即足够大的 ω 会通过有限波长失稳促使结构形成 —— 得到了数值模拟的证实。

模型。– 我们考虑 N 个自推进点状粒子，它们位于一个带有周期性边界条件的 $L \times L$ 盒子中，在时间 t 的位置为$\mathbf{r}_i(t) = (x_i(t)\ y_i(t))$，取向为$\mathbf{n}_i(t) = (\cos\ \phi_i,\ \sin\phi_i)(t)$。它们的运动遵循过阻尼动力学：

$$\dot{\mathbf{r}}_i = v\mathbf{n}_i,\quad \dot{\phi}_i = \omega + \Gamma\sum_{j\in\partial_i}\sin[2(\phi_j-\phi_i)] + \sqrt{2D}\xi_i \qquad (1)$$

其中，ω 是粒子的固有频率，使其产生圆周游动；v 是粒子的自推进速度。相互作用由求和项描述，该求和遍历粒子 i 的最近邻 j，定义为$|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| < R$（定义我们的长度单位）。向列耦合的强度由 Γ量化，而 D 则量化噪声强度（也称为旋转扩散，其倒数定义了我们的时间单位）。噪声项 ξ_i是高斯白噪声，均值为零、方差为一。在没有噪声和相互作用的情况下，粒子以恒定速度沿半径为 v/ω 的圆形轨迹运动。我们模拟了规模最大为 $N = 10^5$ 的系统，在数密度 $\rho = NR^2/L^2 = 10$固定时改变 $\Gamma = 0..0.3$和 $\omega = 0...3$，并取 $v,\ R,\ D = 1$。该模型是在 [6], 中提出的模型的扩展，在相互作用项中引入因子 2，以描述向列对齐 [25]。该模型与 [8] 中所研究的模型不同，其相互作用项没有按邻居数归一化。

平均场理论。– 为了理解系统的相行为，我们从粒子级运动方程出发构建平均场理论。其主要假设是将系统在时间 t 处处于给定微观态的 N–体概率 $P_N(\{\mathbf{r}_i,\phi_i\}_{i=1}^N;\ t)$ 分解为 N 个相同的单体概率。对除一个粒子以外所有粒子的自由度积分，并取热力学极限 $N\to\infty$，我们得到一个非线性单体福克–普朗克方程，参见例如 [26]。我们解析地求出该方程的长时间均匀解，然后分析其线性稳定性。

与朗之万方程式（1）等价的 N体福克–普朗克方程为

$$\partial_t P_N = \sum_{i=1}^N -\partial_{\phi_i}\Big\{\big[\omega + \Gamma\sum_{j=1}^N\theta_{ij}\sin(2(\phi_j-\phi_i))\big]P_N\Big\}$$
$$+ D\partial_{\phi_i}^2 P_N - v\sum_{i=1}^N\Big\{\cos(\phi_i)\partial_{x_i} + \sin(\phi_i)\partial_{y_i}\Big\}P_N, \qquad (2)$$

其中，当 $|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| \le R$ 时，$\theta_{ij} = 1$；其他情况下为 0。因此我们假设

$$P_N(x_1,y_1,\phi_1,x_2,y_2,\phi_2,\ldots,x_N,y_N,\phi_N)$$
$$= P_1(x_1,y_1,\phi_1)P_1(x_2,y_2,\phi_2)\ldots P_1(x_N,y_N,\phi_N). \qquad (3)$$

均匀态。此外，我们假设单粒子分布在空间上是均匀的，即：

$$P_1(x_1,y_1,\phi_1) = p(\phi_1)/L^2. \qquad (4)$$

将 试探解 代入式（3）、（4），再代入式（2），我们得到

$$\partial_t p(\phi) = -\partial_\phi\Big\{M\Gamma\big[\langle\sin(2\varphi)\rangle\cos(2\phi)$$
$$- \langle\cos(2\varphi)\rangle\sin(2\phi)\big]p(\phi)\Big\} - \omega\partial_\phi p(\phi) + D\partial_\phi^2 p(\phi) \qquad (5)$$

对除一个角度坐标以外的所有粒子空间坐标积分后，并取极限 $N\to\infty$。这里，$\langle . \rangle$表示相对于 $p(\varphi)$ 的角度期望值，而 M 表示定义如下的平均邻居数

$$M := \pi\rho \approx (N-1)\pi R^2/L^2. \qquad (6)$$

为简单起见，我们先考虑 $\omega = 0$ 的情况。首先，我们假设 $\langle \sin(2\phi)\rangle$ 和 $\langle \cos(2\phi)\rangle$ 是先验已知的。在这种情况下，我们可以很容易地求得方程（5）的稳态解

$$p_s(\phi) = \frac{1}{Z}\exp\left\{\frac{M\Gamma\langle\cos[2(\varphi-\phi_0)]\rangle\cos[2(\phi-\phi_0)]}{2D}\right\}, \tag{7}$$

with

$$Z = 2\pi I_0\left(\frac{M\Gamma}{2D}\langle\cos[2(\varphi-\phi_0)]\rangle\right), \tag{8}$$

其中，I_α 表示第一类修正贝塞尔函数；对于满足 $\sin(2\phi_0)/\cos(2\phi_0) = \langle\sin(2\varphi)\rangle/\langle\cos(2\varphi)\rangle$ 的适当 ϕ_0 取值，分布 p_s 因此可解释为温度为 $k_BT = D$、能量为 $U(\phi) = -M\Gamma\langle\cos[2(\varphi-\phi_0)]\rangle\cos[2(\phi-\phi_0)]/2$ 的平衡态分布。

现在转向一般情形 $\omega \neq 0$。我们可以将角度分布在长时间下的解写为

$$p(\phi,t) = \left[2\pi I_0\left(\frac{M\Gamma Q}{2D}\right)\right]^{-1} e^{\frac{M\Gamma Q}{2D}\cos[2(\phi-\phi_0-\omega t)]}, \tag{9}$$

其中，我们定义向列序参量

$$Q := \langle\cos[2(\varphi-\phi_0-\omega t)]\rangle. \tag{10}$$

因此，长时间解式（9）取决于 ϕ_0，它决定了集群态的取向，以及向列序参量 Q。后者满足以下自洽方程

$$Q = I_1\left(\frac{M\Gamma Q}{2D}\right)\Big/ I_0\left(\frac{M\Gamma Q}{2D}\right), \tag{11}$$

容易验证，当 Q 满足方程（11）时，分布（9）确实是方程（5）的解。显然，$Q = 0$ 始终是方程（11）的一个解。根据 $\frac{M\Gamma}{D}$ 的取值，还可能有另外两个解 $Q = \pm Q^*$。这两个解描述的是同一个物理状态，因为当坐标系旋转 π 时，Q 会映射为 $-Q$。通常，参见例如 [26,27],，当耦合强度高于临界耦合时，非零解便会出现；临界耦合由相变条件给出，即方程（11）右侧关于 Q 在 $Q = 0$ 处的导数为 1，具体为 $M\Gamma = 4D$。在空间均匀理论中，向列序参量 Q 与 ω [1] 无关。然而，在基于主体的模拟中，我们观察到，集群的出现以及序参量的数值都取决于 ω，见图 2（a）。下文将重点研究由手性诱发的空间结构形成。

线性稳定性分析。在这里，我们不再假设$P_1(\mathbf{r}_1,\phi_1)$是均匀的。我们采用与均匀情形类似的方法，推导出单粒子福克-普朗克方程（22），详情请参见补充材料 [24]。

[1]这与文献 [6]，中建立的该模型极性版本的流体动力学描述一致，区别仅在于因相互作用的对称性而产生的一个因子 2。

我们分析均匀解方程（9）的线性稳定性，这与例如 [28–30], 中的方法类似，但这里是在动力学理论层面，而不是流体力学层面进行分析。我们假设空间区域 $(x,y) \in [0,L]\times[0,L]$ 具有周期性边界条件，并将偏离该解的部分写成傅里叶形式：

$$P_1(\mathbf{r},\phi) - \frac{1}{L^2}p(\phi,t) = \sum_{klm} F_{klm}(t)e^{ik\phi}e^{i\frac{2\pi}{L}lx}e^{i\frac{2\pi}{L}my}. \tag{12}$$

我们显式计算忽略二次项时所有傅里叶模态组成的向量 $\mathbf{F} = \{F_{klm}\}$ 的时间演化方程，见补充材料 [24]。时间演化可用算符形式概括地写为

$$\partial_t\mathbf{F} = \mathbb{A}(t)\mathbf{F}. \tag{13}$$

在非手性情形下，$\omega = 0$，A 与时间无关。可以通过数值计算其特征值和特征向量，以确定均匀向列有序态的稳定性。

然而，在手性情形下，由于均匀态随时间变化，矩阵 A 显式地依赖于时间。因此，A 的特征向量也随时间变化，这给线性稳定性分析带来了一些复杂性。不过，我们可以利用 $\mathbb{A}(t)$ 具有周期 $T = \pi/\omega$ 的周期性这一事实；这是由于均匀态 (9) 的周期性及其在 $\phi \to \phi + \pi$ 下的不变性所致。现在，我们关注$\mathbf{F}$ 在一个周期 T 内的时间演化，并记为

$$\mathbf{F}(T) = \lim_{n\to\infty,\Delta t=T/n}\left[\prod_{s=0}^{n-1}(\mathbb{1}+\Delta t\mathbb{A}(s\Delta t))\right]\mathbf{F}(0), \tag{14}$$

其中 $\mathbb{1}$ 表示单位矩阵。根据定义

$$\mathbb{A}_T := \lim_{n\to\infty,\Delta t=T/n}\left[\prod_{s=0}^{n-1}(\mathbb{1}+\Delta t\mathbb{A}(s\Delta t))\right] \tag{15}$$

式 (14) 变为

$$\mathbf{F}(T) = \mathbb{A}_T\mathbf{F}(0). \tag{16}$$

式 (16) 相较于式 (13) 的优点是，$\mathbb{A}_T$ 不依赖于时间。因此，它可以直接用于均匀向列态的线性稳定性分析。实际上，我们根据式 (15) 数值计算 $\mathbb{A}_T$，不执行极限 $n \to \infty$，而是使用较大但有限的 $n = 10^5$。

数值结果。我们数值分析了 $\omega = 0$ 时 A 的特征模，以及 $\omega > 0$ 时 $\mathbb{A}_T$ 的特征模。对于 Γ 和 ω 的不同取值，我们采用系统尺寸 $L = 100$（对应于 $N = 10^5$），以便与模拟进行定量比较（见下文）。不过，我们也使用不同的系统尺寸检验了结果的一致性。

对于均匀无序态，我们在任何情况下都没有发现不稳定模态。对于 $\omega = 0$，在均匀

向列有序相中，我们始终在长波长 $\lambda = L$和有限波长处都发现空间不稳定性，因此预计会形成大尺度空间结构。在手性情形下，对于 $\omega > 0$，在均匀集群态中，我们只发现频率足够高时才会出现有限波长不稳定性 ω，而在更低频率下则没有不稳定性。

角向傅里叶空间中的不稳定本征模主要由两个分量构成：对于 $k = 0$，最大的分量会在由空间波矢 l, m 确定的空间尺度上引发质量输运；对于 $k = \pm 2$，另一个重要分量会引起向列序的变化：在密度增加的位置，向列序增强；而在密度增加的位置，向列序减弱。根据线性稳定性分析，我们无法预测存在不稳定性时稳态的确切特征，因为长时间行为由非线性效应决定。不过，我们预计空间非均匀性会出现在由 l, m 确定的大致长度尺度上。

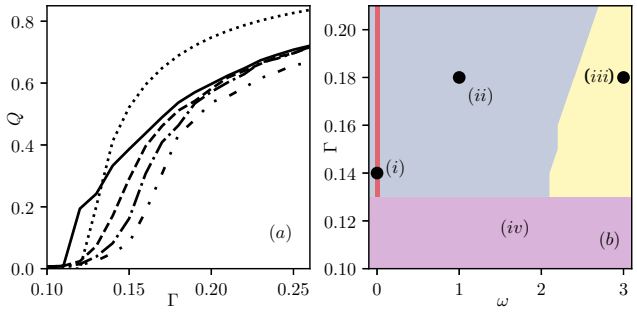

图 2：(*a*) 来自基于主体的模拟，耦合强度的函数关系下向列序的起始点，对应于 $\omega = 0$ （实线）、 $\omega = 0.4$ （虚线）、 $\omega = 1$ （点划线）、$\omega = 2$ （双点划线）。均匀平均场理论与 ω 无关（点线）。（*b*）包含以下各相的平均场相图：(*i*) 非手性向列带。(*ii*) 均匀平均场中的向列序。(*iii*) 向列有序的异步液滴。(*iv*) 无序。黑色圆点标记了图 1 所示快照的参数。详见 S M [24] 数值细节。

我们在图 2(*b*) 中总结了平均场理论的相行为。非手性情形 $\omega = 0$ 具有非均匀集群态（i），其特征是向列带的出现；参见 [23, 31], 。在平均场理论中，该状态的特征是方程 (11) 存在非零解，且方程 (16) 存在长波长不稳定性。对于较小的 ω 和足够大的耦合强度，系统处于均匀（向列）集群态（ii），其特征是方程 (11) 存在非零解，且方程 (16) 不存在不稳定性。对于较大的 ω 和足够大的耦合强度，方程 (11) 仍有非零解，而方程 (16) 则表现出有限波长不稳定性，这表明会形成具有有限特征尺度的图样（iii）。根据线性化层面的平均场理论，我们无法断定该状态是否具有向列序。最后，对于较小的耦合强度，方程 (11) 仅有解 $Q = 0$，因此系统处于无序态（iv）。

基于粒子的模拟。– 我们使用三种不同的尺寸进行基于主体的模拟： $N = 10^3$，10_4，10_5，使系统从均匀且各向同性的随机初始条件演化至稳态。在无序相中采用步长为$\Delta t = 0.01$的标准 Euler-Maruyama 方法时，我们观察到极性有序伪影；而使用更小的步长进行模拟时则不存在这些伪影。为避免这些伪影，我们采用一种非标准的二阶积分

格式 [32]。通常，这种方法的代价是需要计算邻居的邻居之间的相互作用，在高密度下尤其缓慢。然而，对于方程（1）中的特定相互作用形式，可以优化该方法，使其运行复杂度与 Euler-Maruyama 格式相同，详见补充材料 [24]。本文展示的所有模拟均采用二阶格式。模拟数据可在线获取 [33, 34]。模拟结果在定性上证实了平均场相图，图 2(*b*)；下文将对此作更详细的讨论。

可观测量。 我们测量极性序和向列序参量 $P = \frac{1}{N}|\sum_{j=1}^{N} \exp(\phi_j)|$，$Q = \frac{1}{N}|\sum_{j=1}^{N} \exp(2\phi_j)|$，以及平均邻居数$\bar{n} = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} \theta_{ij}$。在任何情况下，我们都未发现全局极性序，这意味着 $P \approx 0$ 在所有测量中均成立。我们可以通过 Q 区分向列有序态与无序态，并利用 $\bar{n} - M$ 区分空间均匀态与存在局部粒子聚集的态（$M \approx 31.4$，见方程（6））。

非手性。对于 $\omega = 0$，我们重现了具有向列型、Vicsek 式对齐 [23]的点状自驱动粒子类似模型的整体现象学。随着耦合强度超过平均场理论给出的阈值 $\Gamma_c = 4D/M \approx 0.127$，系统发生集群转变：由无序均匀态（$iv$）转变为具有净向列取向的状态（$i$）。向列序的出现伴随着相分离，形成无序低密度气体与高密度、向列有序条带；见图 1（i）中的快照。这与上述平均场理论所描述的均匀向列态存在长波长不稳定性相一致。图 2（a）比较了测得的向列序与均匀平均场理论的预测。与均匀平均场理论相比，集群的出现被推移至较低的耦合强度。这种偏移很可能由相分离造成。由于向列条带中的局部密度有所增加，而较高密度有利于有序，因此向列序会更早出现。

手性。对于较小到中等的 ω 值，我们观察到与 $\omega = 0$ 类似的向列序参量。在耦合较弱时，系统处于无序状态；当 Γ 超过某个临界值后，则出现全局向列序。与平均场理论相比，集群转变向更高耦合方向偏移。在非手性系统中也观察到了类似效应

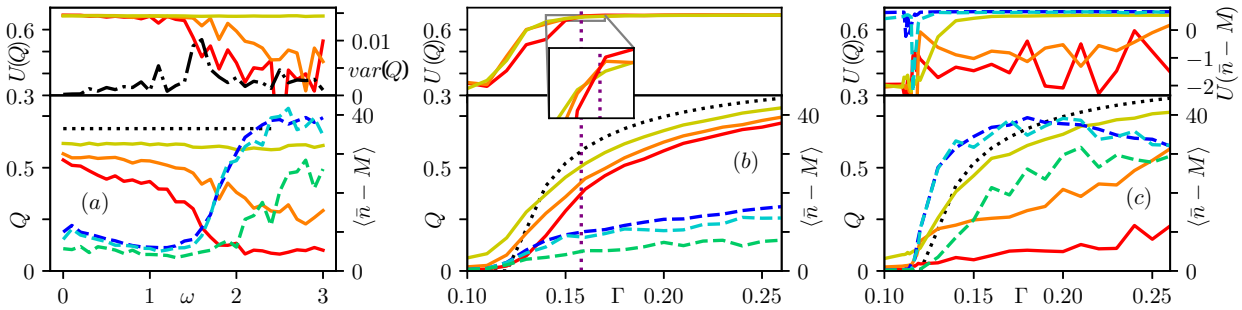

图 3：不同相之间的相变（a）：在 $\Gamma = 0.18$ 处，(*ii*)（均匀向列相）$\leftrightarrow$ (*iii*)（向列液滴）。实线表示全局向列序参量 Q（下图）及其 Binder累积量（上图），对应 $N = 10^3$（黄色）、$N = 10^4$（橙色）和 $N = 10^5$ 个粒子（红色）。虚线（下图）表示 $\langle \bar{n} \rangle$ 的平均邻居数，其相对于平均场期望值 M 平移后的结果；对应 $N = 10^3$（绿色）、$N = 10^4$（青绿色）和 $N = 10^5$（蓝色）。黑色点划线（上图）表示 Q 的涨落。在 $\omega = 0.1$ 处，($N = 10^5$)、(*b*)：(*iv*)（无序）$\leftrightarrow$ (*ii*)（均匀向列相）。线型和颜色同 (*a*)。黑色点线表示平均场结果。紫色水平线表示根据 Binder 累积量交点得到的 $N \to \infty$ 转变点估计值。在 $\omega = 3$ 处，(*c*)：(*iv*)（无序）$\leftrightarrow$ (*iii*)（向列液滴）。线型和颜色同 (*a*)。上图中的虚线表示 $N = 10^4$ 和 $N = 10^5$ 的平移平均邻居数的 Binder 累积量。所有数据均取自十次实现的平均值。数值细节见补充材料 [24] 。

；该系统具有极性排列相互作用 [35], ，转变的偏移由取向关联导致：随机选取一个粒子时，它的典型碰撞伙伴更可能具有相似的取向。因此，由于关联的作用，粒子在局部排列得更紧密，但在整体上排列得较弱。较大的手性似乎会增强局部关联，因为有效扩散系数会随着 ω 增大而降低。这样一来，同一批粒子会彼此碰撞更长时间，从而形成更强的取向关联。这一解释似乎说明了为何随着 ω 增大，转变会向更高耦合方向偏移，如图 2（a）所示。

在向列有序相（ii）内，我们没有像极性情形中那样观察到手性相分离，这与平均场理论的预测不同。相反，在大尺度上，向列有序相是均匀的，见图 1（ii）。在小尺度上，粒子聚集成团簇，这可能是由关联效应导致的，因为平均场理论无法显示出这一现象。在图 3（b）中，我们展示了向列序参量 Q、Q 的 Binder累积量，以及三个不同系统尺寸下平均邻居数随耦合强度的变化，其中涉及相（iv）与相（ii）之间的相变。向列序参量表明这是一个连续相变；我们根据不同系统尺寸的 Binder累积量交点，粗略估计了无限系统尺寸下相变的位置。在相（ii）内，平均邻居数随耦合强度适度增加，这与上述小尺度上的聚集现象一致。

在耦合强度和手性都较大时，我们观察到微观相分离：高密度、向列有序但不同步的液滴被无序的低密度气体包围，参见图 1（iii）；这与极性情形 [6] 中观察到的现象类似。该相对应于我们在第 节讨论的均匀集群态的有限波长不稳定性。对于大型系统，不存在全局向列序，因为各个液滴并不同步。

在图 3（a）中，我们展示了相（ii）与相（iii）之间的相变，其特征是全局向列序参量下降，同时平均邻居数显著增加。向列序参量的 Binder累积量呈现出连续相变的特征性形状：随着系统尺寸增大，从2/3 下降到越来越小的数值。然而，这里的数据噪声过大，无法准确确定无限系统尺寸下的相变。因此，我们还展示了所考虑的最大系统尺寸下向列序参量的涨落，其在约 $\omega = 1.6$ 处呈现出特征性峰值，参见图 3（a）顶部。

最后，我们在图 3（c）中展示了相（iv）与相（iii）之间的转变。对于所考虑的最小系统尺寸，转变看起来是从无序态到向列序的连续相变。然而，如上所述，对于较大的系统尺寸，即使在相（iii）中也不存在全局向列序，参见图 3（c）（下图）。因此，向列序参量无法用于区分相（iv）和相（iii）。不过，我们在图 3（c）中看到，邻居数平移平均值 $\langle \bar{n} - M \rangle$ 显著增加，表明发生了从（iv）到（iii）的转变。对于大系统，邻居数平移平均值的 Binder累积量呈现明显的凹谷，表明发生了不连续相变。对于有限系统，该转变是不连续的，因为会形成一个（耦合更高时则会形成多个）高密度液滴。然而，单个液滴对全局序参量的贡献会随着系统尺寸增大而减小。因此，较小系统的 Binder累积量凹谷更深；我们预期在热力学极限下，该转变实际上是连续的。

讨论与结论。– 总之，我们通过

二维点粒子来模拟活性手性杆。粒子以恒定速度运动，并根据过阻尼朗之万动力学调整其运动方向，其中包含向列对齐相互作用和固有频率 ω。我们通过动力学平均场理论研究该模型的相行为。在假设空间分布均匀的前提下，我们发现，相变由耦合强度决定，且与 ω 无关：系统会从无序态连续转变为向列序。为明确这一假设的有效性，我们研究均匀解对空间延展扰动的线性稳定性。该线性稳定性分析超越了通常的流体力学处理 [6, 36] ，因为它将均匀背景解的所有（无限多个）角模态以及扰动的任意多个模态都纳入考量（尽管在实际计算中只取有限个模态，此处为 $k = -10,$ ....., 10）。

我们在无序相（iv）中未发现不稳定性。在向列有序相中，对于 $\omega = 0$ 存在长波长不稳定性，这一点已由模拟中出现的宏观条带（i）所证实；这种条带早已为人熟知 [23,31]。对于小到中等的手性，在平均场理论（ii）中，我们未发现均匀集群态的不稳定性。在模拟中，我们观察到由关联效应导致的轻微不均匀性，但没有明显的聚集。对于较大的手性，存在有限波长不稳定性，表现为形成异步向列有序液滴，周围环绕着无序气体；模拟中观察到了这一现象（iii）。模拟结果表明，转变（ii）$\leftrightarrow$（iv）和（ii）$\leftrightarrow$（iii）是连续的，而转变（iii）$\leftrightarrow$（iv）是不连续的。（iii）$\leftrightarrow$（iv）转变中的不连续性源于单个向列有序液滴的形成。因此，我们预计该转变在热力学极限下会有效地变为连续转变 $N \to \infty$ ，因为随着系统尺寸增大，单个液滴对序参量的影响会减弱。不过，要得出这一结论仍需进一步研究。

致谢。– R.K. 感谢格赖夫斯瓦尔德大学计算中心通过提供计算资源支持本研究，并感谢 MICINN 和欧盟（ Next Generation EU/PRTR）通过“Mar´ıa Zambrano” 奖学金提供资助。D. L. 感谢 MCIU/AEI/FEDER 根据资助协议 No.RTI2018-099032-J-I00 提供经费支持。

参考文献

[1] Bechinger C., Di Leonardo R., Löwen H., Reichhardt C. Volpe G. Volpe G. *Rev. Mod. Phys.* ，和，，**88** 2016 045006 ( )。[2] Bialek W., Cavagna A., Giardina I., Mora T., vestri E. Viale M. Walczak A. M. *PNAS* **109** ，和，，(2012) 4786。[3] Bricard A., Caussin J.-B., Desreumaux N., chot O. Bartolo D. *Nature* **503** 2013 95 和，，( )。

[4] Vicsek T. 和 Zafeiris A., *Phys. Rep.*, **517** (2012)71。[5] Ginelli F., *Eur. Phys. J. Spec. Top.*, **225** (2016)2099。

[6] Liebchen B. 和 Levis D., *Phys. Rev. Lett.*, 119 (2017) 058002.

[7] Levis D., Pagonabarraga I. Liebchen B. *Phys.* 和，*Rev. Res.* **1** 2019 023026 ，( ) .[8] Ventejou B., Chaté H., Montagne R. 和 Shi X.-q., *Phys. Rev. Lett.* **127** 2021 238001 ，( ) .

[9] Liebchen B. 和 Levis D., *EPL*, 139 (2022) 67001.[10] Afroze F., *Biochem. Biophys. Res. Commun.*, 563 (2021) 73.[11] Denk J., Huber L. Reithmann E. Frey E. *Phys.* ，和，，( ) . *Rev. Lett.* **116** 2016 178301

[12] Dunajova Z., Mateu B., Radler P., Lim K., Velicky P. Danzl J. G. Wong R. W. Elgeti J. Hannezo ，，，，E. Loose M. *bioRxiv 10.1101* 2022 520425 和，，( ) .

[13] Riedel I. H., Kruse K. 和 Howard J., *Science*, 309 (2005) 300.

[14] Kümmel F., Ten Hagen B., Wittkowski R., Buttinoni I. Eichhorn R. Volpe G. Löwen H. ，，，和 Bechinger C., *Phys. Rev. Lett.*, 110 (2013) 198302.[15] Zhang B., Sokolov A. Snezhko A. *Nat. Com-* 和，，( ) . *mun.* **11** 2020 4401

[16] Alvarez L., Fernandez-Rodriguez M. A., Allegria A. Arrese-Igor S. Zhao K. Kröger M. Isa L. ，，，和， *Nat. Commun.* **12** 2021 4762 ，( ) .

[17] Barois T., Boudet J.-F., Lintuvuori J. S. 和 Kellay H. *Phys. Rev. Lett.* **125** 2020 238003 ，，( ) .

[18] Arora P., Sood A. 和 Ganapathy R., *Sci. Adv.*, 7 (2021) eabd0331.[19] Peruani F., Deutsch A. 和 Bär M., *Phys. Rev. E*, 74 (2006) 030904.[20] Bär M., Grossmann R., Heidenreich S. 和 Peruani F. *Annu. Rev. of Condens. Matter Phys.* **11** 2020 441 ，，( ) .

[21] Baskaran A. 和 Marchetti M. C., *J. Stat. Mech.*, 2010 2010 04019 ( ) P .[22] Chaté H., Ginelli F., Grégoire G., Peruani F. 和 Raynaud F., *Eur. Phys. J. B*, 64 (2008) 451.[23] Ginelli F., Peruani F. Bär M. Chaté H. *Phys.* ，和，，( ) . *Rev. Lett.* **104** 2010 184502

[24] *See supplemental material at pages 7-10.*[25] Sesé-Sansa E., Levis D. Pagonabarraga I. *Phys.* 和，，( ) . *Rev. E* **104** 2021 054611

[26] Frank T. D., *Nonlinear Fokker-Planck equations: fundamentals and applications* (施普林格科学与商业媒体) 2005.

[27] Dawson D. A., *J. Stat. Phys.*, 31 (1983) 29.[28] Bertin E., Droz M. 和 Grégoire G., *Phys. Rev. E*, 74 2006 022101 ( ) .

[29] Mishra S., Baskaran A. Marchetti M. C. *Phys. Rev. E* **81** 2010 061916 和，，( ) .[30] Ihle T., *Phys. Rev. E*, 83 (2011) 030901.[31] Peruani F., *Eur. Phys. J. Spec. Top.*, 225 (2016) 2301.[32] Kloeden P. E. 和 Platen E., *Stochastic differential equations* 1992 (施普林格) .[33] Kürsten R., *Chiral active rods simulation data i* (2023). https://doi.org/ 10 5281 7409120 ./zenodo. , (2023). https://doi.org/ 10 5281 7501822 ./zenodo. 和，，104

[34] Kürsten R. *Chiral active rods simulation data ii*

[35] Kürsten R. Ihle T. *Phys. Rev. E* (2021) 034604.[36] Bertin E., Baskaran A., Chaté H. 和 Marchetti M. C. *Phys. Rev. E* **92** 2015 042141 ，，( ) .

非均匀平均场理论。– 在本节中，我们明确推导式（5）的空间依赖等价形式。为此，我们定义若干位置依赖量。首先，我们引入位置依赖的密度

$$p_{\mathbf{r}}(\mathbf{r}) := \int_0^{2\pi} P_1(\mathbf{r},\phi)d\phi. \tag{17}$$

显然， $p_{\mathbf{r}}$ 已归一化

$$\int p_{\mathbf{r}}(\mathbf{r})d\mathbf{r} = 1, \tag{18}$$

因此它是一个空间概率密度函数。类比式（6），我们引入

$$M(\mathbf{r}) := N\int p_{\mathbf{r}}(\mathbf{r}+\tilde{\mathbf{r}})\theta(R-|\tilde{\mathbf{r}}|)d\tilde{\mathbf{r}}. \tag{19}$$

此外，我们引入两个局部角概率密度函数，定义如下

$$p_\phi(\mathbf{r},\phi) := \frac{P_1(\mathbf{r},\phi)}{p_{\mathbf{r}}(\mathbf{r})}, \qquad \bar{p}_\phi(\mathbf{r},\phi) := \frac{N}{M(\mathbf{r})}\int P_1(\mathbf{r}+\tilde{\mathbf{r}},\phi)\theta(R-|\tilde{\mathbf{r}}|)d\tilde{\mathbf{r}}. \tag{20}$$

我们可以将这些表达式解释为角概率分布，其中空间坐标$\mathbf{r}$ 仅仅是一个索引。式（20）中的第一个表达式给出了位置$\mathbf{r}$处的分布，而第二个表达式则给出了$\mathbf{r}$周围半径为 R 的圆周上的角分布平均值。容易验证，这两个分布均已归一化

$$\int_0^{2\pi} p_\phi(\mathbf{r},\phi)d\phi = \int_0^{2\pi}\bar{p}_\phi(\mathbf{r},\phi)d\phi = 1. \tag{21}$$

F对于依赖空间的分布，采用上述记号后，式（5）的对应形式为

$$\begin{aligned}
&\partial_t P_1(\mathbf{r}_1,\phi_1) = \partial_t[p_{\mathbf{r}}(\mathbf{r}_1)p_\phi(\mathbf{r}_1,\phi_1)]\\
&= -p_{\mathbf{r}}(\mathbf{r}_1)\partial_{\phi_1}\Big\{M(\mathbf{r}_1)\Gamma\big[(\langle\sin(2\phi)\rangle_{\bar{p}_\phi(\mathbf{r}_1,\phi)}\cos(2\phi_1) - \langle\cos(2\phi)\rangle_{\bar{p}_\phi(\mathbf{r}_1,\phi_1)}\sin(2\phi_1))\big]p_\phi(\mathbf{r}_1,\phi_1)\Big\}\\
&\quad - \omega p_{\mathbf{r}}(\mathbf{r}_1)\partial_{\phi_1}p_\phi(\mathbf{r}_1,\phi_1) + Dp_{\mathbf{r}}(\mathbf{r}_1)\partial^2_{\phi_1}p_\phi(\mathbf{r}_1,\phi) - v\cos(\phi_1)\partial_{x_1}p_{\mathbf{r}}(\mathbf{r}_1)p_\phi(\mathbf{r}_1,\phi_1) - v\sin(\phi_1)\partial_{y_1}p_{\mathbf{r}}(\mathbf{r}_1)p_\phi(\mathbf{r}_1,\phi_1).
\end{aligned} \tag{22}$$

利用式（22），我们得到式（12）中定义的傅里叶模态 $F_{klm}(t)$ 的时间演化方程。忽略 F 中的二次项，并假设 $\phi_0 = 0$，可得

$$\begin{aligned}
\partial_t F_{klm} =& \frac{\rho_0\Gamma K_{l,m}}{I_0\left(\frac{M\Gamma Q}{2D}\right)}F_{2,l,m}\exp[i(2-k)\omega t]\left[\tilde{I}_{1-k/2}\left(\frac{M\Gamma Q}{2D}\right) + \frac{M\Gamma Q}{4D}\left\{\tilde{I}_{2-k/2}\left(\frac{M\Gamma Q}{2D}\right) - \tilde{I}_{-k/2}\left(\frac{M\Gamma Q}{2D}\right)\right\}\right]\\
&+ \frac{\rho_0\Gamma K_{l,m}}{I_0\left(\frac{M\Gamma Q}{2D}\right)}F_{-2,l,m}\exp[i(-2-k)\omega t]\left[\tilde{I}_{-1-k/2}\left(\frac{M\Gamma Q}{2D}\right) + \frac{M\Gamma Q}{4D}\left\{\tilde{I}_{-2-k/2}\left(\frac{M\Gamma Q}{2D}\right) - \tilde{I}_{-k/2}\left(\frac{M\Gamma Q}{2D}\right)\right\}\right]\\
&+ F_{k-2,l,m}\frac{M\Gamma Qk}{2}[\cos(2\omega t) - i\sin(2\omega t)] + F_{k+2,l,m}\frac{M\Gamma Qk}{2}[-\cos(2\omega t) - i\sin(2\omega t)] - (i\omega k + Dk^2)F_{klm}\\
&- vi\frac{2\pi}{L}l\frac{1}{2}[F_{k-1,l,m} + F_{k+1,l,m}] - vi\frac{2\pi}{L}m\frac{1}{2i}[F_{k-1,l,m} - F_{k+1,l,m}],
\end{aligned} \tag{23}$$

其中

$$\begin{aligned}
K_{l,m} :=& \int_{-L/2}^{L/2}dx\int_{-L/2}^{L/2}dy\exp(il2\pi x/L)\exp(im2\pi y/L)\theta(R-|\mathbf{r}|)\\
=& \begin{cases}\pi R^2 \text{ if } m = l = 0\\ \frac{RL}{\sqrt{l^2+m^2}}J_1\left(\frac{2\pi}{L}R\sqrt{l^2+m^2}\right) \text{ else}\end{cases}
\end{aligned} \tag{24}$$

and

$$\tilde{I}_\nu(z) := \begin{cases} I_{|\nu|}(z) \text{ if } \nu \text{ is integer} \\ 0 \text{ else.} \end{cases} \tag{25}$$

请注意，从均匀态出发的扰动的线性化时间演化方程（式（23））不会耦合不同的空间模态。因此，可以分别针对空间波矢 l, m 的所有取值进行分析。

在数值计算特征值时，我们考虑了角波矢分量 $k = -10, \ldots, 10$。我们检查了纳入更多模态后，最不稳定的特征值几乎没有变化。空间均匀长时间解 (9) 并不唯一，因为 ϕ_0 的选择是任意的。因此，我们预计空间均匀模态 $l = 0$, $m = 0$ 具有一个特征值为 1 的特征模态，它对应于均匀解的无穷小旋转。实际上，由于式 (15) 中引入的离散化误差，我们发现该特征值略大于 1。若特征值的绝对值大于无穷小旋转对应的特征值，我们便将该特征模态视为不稳定。

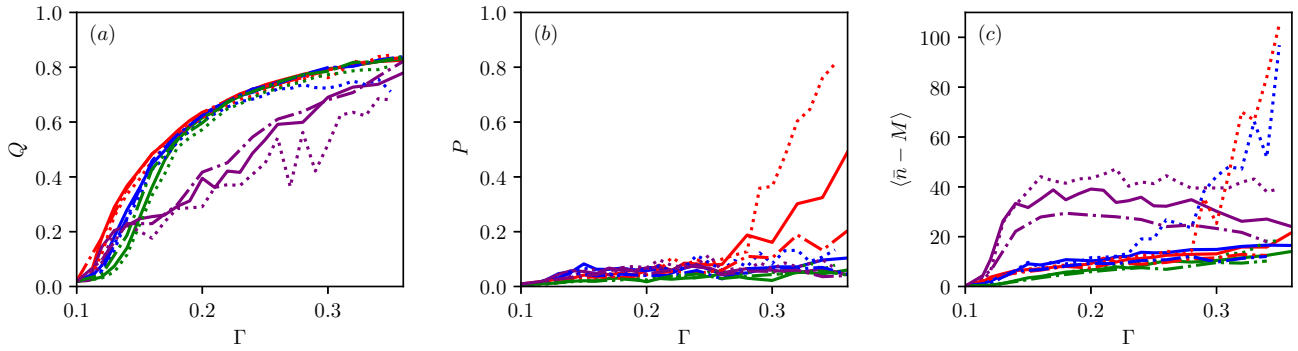

图 4：不同积分方案的比较。针对 $N = 10^4$, $\omega = 0$ (红色)、 $\omega = 0.1$ (蓝色)、 $\omega = 1.0$ (绿色) 和 $\omega = 3.0$ (紫色) 进行模拟。我们采用 Euler-Maruyama 方法，使用 $\Delta t = 10^{-2}$ (点线)、 $\Delta t = 10^{-3}$ (点划线)，并采用二阶积分方案，使用 $\Delta t = 10^{-2}$ (实线)。图中展示了全局向列序参量 (*a*)、全局极性序参量 (*b*) 以及平均邻近粒子数 (*c*)。

积分方案。– 随机微分方程 (1) 最简单的数值离散化方案之一是众所周知的 Euler-Mayurama 格式

$$\begin{aligned} x_i(t+\Delta t) =& x_i + \Delta t v \cos(\phi_i), \qquad y_i(t+\Delta t) = y_i + \Delta t v \sin(\phi_i), \\ \phi_i(t+\Delta t) =& \phi_i + \Delta t\{\omega + \Gamma \sum_{j\in\partial_i} \sin[2(\phi_j - \phi_i)]\} + \sqrt{\Delta t}\sqrt{2D}\eta_i, \end{aligned} \tag{26}$$

其中，右侧所有项的时间参数均为 t，为简洁起见我们省略了该参数。我们用 Δt 表示步长，而 $\eta_i(t)$ 是相互独立、均值为零的标准高斯随机变量。

作为另一种选择，我们 考虑一种遵循 [32] 的弱二阶格式。对于所考虑的系统，该格式 e

如下

$$x_i(t+\Delta t) = x_i + \Delta t v\cos(\phi_i) - \frac{1}{4}\sigma^2 v\cos(\phi_i)(\Delta t)^2 - \frac{1}{2}v\Gamma\sin(\phi_i)\sum_{j\in\partial_i}\sin[2(\phi_j-\phi_i)](\Delta t)^2$$
$$- \frac{1}{2}v\sin(\phi_i)\omega(\Delta t)^2 - \frac{1}{2}(\Delta t)^{3/2}\sigma v\sin(\phi_i)\eta_i, \tag{27}$$

$$y_i(t+\Delta t) = y_i + \Delta t v\sin(\phi_i) - \frac{1}{4}\sigma^2 v\sin(\phi_i)(\Delta t)^2 + \frac{1}{2}v\Gamma\cos(\phi_i)\sum_{j\in\partial_i}\sin[2(\phi_j-\phi_i)](\Delta t)^2$$
$$+ \frac{1}{2}v\cos\phi_i\omega(\Delta t)^2 + \frac{1}{2}(\Delta t)^{3/2}\sigma v\cos(\phi_i)\eta_i, \tag{28}$$

$$\phi_i(t+\Delta t) = \phi_i + \Delta t\omega + \Delta t\Gamma\sum_{j\in\partial_i}\sin[2(\phi_j-\phi_i)] - 2\sigma^2(\Delta t)^2\Gamma\sum_{j\in\partial_i}\sin[2(\phi_j-\phi_i)]$$
$$+ (\Delta t)^2\Gamma^2\sum_{j\in\partial_i}\Big\{\sum_{k\in\partial_j}\sin[2(\phi_k-\phi_j)] + \frac{\omega}{\Gamma}\Big\}\cos[2(\phi_j-\phi_i)] - (\Delta t)^2\Gamma^2\Big\{\sum_{k\in\partial_i}\sin[2(\phi_k-\phi_i)] + \frac{\omega}{\Gamma}\Big\}$$
$$\times\sum_{j\in\partial_i}\cos[2(\phi_j-\phi_i)] + \sigma\sqrt{\Delta t}\eta_i + \sigma(\Delta t)^{3/2}\Gamma\sum_{j\in\partial_i}\cos[2(\phi_j-\phi_i)](\eta_j-\eta_i). \tag{29}$$

这里，我们同样省略了右侧所有项中的时间变量 t 。请注意，只要指标 i 取值相同，三个方程中出现的随机变量η_i就相同。二阶格式系统地考虑了所有不超过 $(\Delta t)^2$ 阶的项。对于均匀态，利用细胞列表，格式 (26) 的复杂度为 $N\cdot max(9\rho,\ 1)$，因为对每个粒子都需要找到其所有邻居（为此需要检查长度为 3 的盒子中的所有粒子）。原则上，二阶格式的复杂度为 $N\cdot[max(9\rho,\ 1)]^2$ ，因为需要找到每个粒子的所有邻居的邻居。本研究特别关注高密度情形。此外，一旦粒子开始聚集，有效密度就会更高，从而形成非均匀密度分布。因此，二阶格式似乎尤其低效，人们可能会倾向于改用时间步长更小的 Euler-Mayurama 格式。然而，由于相邻粒子之间相互作用的谐性，我们可以简化二阶格式，即式 (29)，使其复杂度与 Euler-Mayurama 格式相同。利用基本的三角关系，我们得到

$$\phi_i(t+\Delta t) = \phi_i + \Delta t\omega + \Delta t\Gamma(1-2\sigma^2\Delta t)\sum_{j\in\partial_i}\sin[2(\phi_j-\phi_i)]$$
$$+ \sum_{j\in\partial_i}\cos(2(\phi_j-\phi_i))\big\{(\Delta t)^2\Gamma^2[S_j\cos(2\phi_j) - C_j\sin(2\phi_j) - S_i\cos(\phi_i) + C_i\sin(2\phi_i)]$$
$$+ \sigma(\Delta t)^{3/2}\Gamma(\eta_j-\eta_i)\big\} + \sigma\sqrt{\Delta t}\eta_i, \tag{30}$$

其中

$$S_i := \sum_{k\in\partial_i}\sin(2\phi_k), \qquad C_i := \sum_{k\in\partial_i}\cos(2\phi_k). \tag{31}$$

实际操作中，首先遍历所有粒子及其邻居，计算向量 S_i、C_i，并选择噪声实现 η_i；然后再次遍历所有粒子，根据方程（27）、（28）更新位置，并根据方程（30）更新角度。

我们比较了两种格式的模拟：Euler-Mayurama 格式采用步长 $\Delta t = 10^{-2}$ （方法 1）和 $\Delta t = 10^{-3}$ （方法 2），二阶格式采用步长 $\Delta t = 10^{-2}$ （方法 3）。图 4 比较了不同格式在不同 ω 值下测得的全局向列序参量 Q、全局极性序参量 P，以及 $N = 10^4$ 的邻居数平移平均值 $\langle\bar{n} - M\rangle$ 。

我们没有发现积分方案或所选时间步长对全局向列序参量有显著影响，参见图 4（a）。不过，尤其是对于 $\Delta t = 10^{-2}$，在耦合强度较大时会观察到伪影。从 $\omega = 0$ 的极性序参量中最容易看出这一点，参见图 4（b）。在实际情况下，或者使用较小的时间步长时，该模型中不存在极性序。然而，如果时间步长选得过大，结果看起来就仿佛存在极性序。这种表观的极性序伴随着巨大团簇的形成；从平均邻居数中可以看出这一点，参见图 4（c），其中 $\Delta t = 10^{-2}$ 使用方法 1，$\omega = 0$，0。1。我们认为，由于相互作用（1）具有可加性，当局部聚集的粒子过多时，离散化误差会变得显著。显然，这种效应会自我放大，因为在不准确的方案下，粒子会聚集得更加严重。

采用较小的时间步长（方法 2）或二阶积分方案（方法 3），似乎都能避免这些不理想的伪影。使用方法 3 可以完全避免严重的粒子聚集，见图 4（c）；与方法 1 相比，人工极性群集仅在耦合强度更高时才会出现，见图 4（b）。方法 2 的表现甚至优于方法 3，但计算成本更高。因此，对于本文的所有模拟，我们仅采用方法 3，并将耦合强度控制在不过大的范围内，即 $\Gamma \leq 0.26$，从而避免出现模拟伪影。

总之，需要指出的是，对于我们在此考虑的具有加性相互作用的模型 (1)，选择积分方案和时间步长时必须格外谨慎。时间步长过大时，可能会观察到非物理伪影。使用高阶积分方案或减小时间步长可以避免这一问题。由于相互作用 (1) 具有谐性，二阶（原则上也包括更高阶）方案的计算复杂度与 Euler-Mayurama 格式相同。因此，对于所考虑的这类相互作用，高阶方案似乎更具优势。

数值细节。– 图 1：物理参数：$R, v, D = 1$, $N = 10^5$, $L_x, L_y = 100$，积分方案：方法 3，采用 $\Delta t = 10^{-2}$，初始条件：随机、均匀且各向同性，热化：1009999 个时间步长。图 2（a）：物理参数：$R, v, D = 1$, $N = 10^5$, $L_x, L_y = 100$，积分方案：方法 3，采用 $\Delta t = 10^{-2}$，初始条件：随机、均匀且各向同性，热化：999999 个时间步长；测量值取 10 次实现的平均值，每次实现包含 10^4 个时间步长。图 3：物理参数：$R, v, D = 1$, $N = 10^3$, 104, 105,$L_x, L_y = 10, \sqrt{10} \times 10$, 100，积分方案:—方法 3，采用 $\Delta t = 10^{-2}$，初始条件：随机、均匀且各向同性，热化：999999 个时间步长；测量值取 10 次实现的平均值，每次实现包含 10^4 个时间步长。方法 3 的模拟数据可在 [33]，获取；方法 1、2 的模拟数据可在 [34] 获取。