arXiv:2602.07948v1 [physics.comp-ph] 8 Feb 2026

dewi-kadita：一款用于理想化鱼群模拟并提供基于熵的诊断指标的 Python 库

Sandy H. S. Herho[1, 2, *], Iwan P. Anwar[3,4], Faruq Khadami[3], Alfita P. Handayani[5], Karina A. Sujatmiko[3], Kamaluddin Kasim[6], Rusmawan Suwarman[7], 和 Dasapta E. Irawan[8]

[1]地球与行星科学系，加利福尼亚大学河滨分校，美国加利福尼亚州[2]系统科学与工业工程学院，纽约州立大学宾汉姆顿分校，美国纽约州[3]应用与环境海洋学研究组，万隆理工学院，印度尼西亚西爪哇省万隆[4]Samudera Sains Teknologi 有限公司，印度尼西亚西爪哇省万隆[5]空间系统与地籍研究组，万隆理工学院，印度尼西亚西爪哇省万隆[6]海洋事务与渔业部，印度尼西亚雅加达首都特区北雅加达[7]大气科学研究组，万隆理工学院，印度尼西亚西爪哇省万隆[8]应用地质研究组，万隆理工学院，印度尼西亚西爪哇省万隆

[*]电子邮箱：sandy.herho@email.ucr.edu

摘要

鱼群的集体运动是活性物质系统中涌现自组织的典型例证，但用于模拟和分析这类动力学的计算工具仍分散于各个研究团队。我们介绍 dewi-kadita，这是一个开源 Python 库，实现了三维 Couzin 分区模型，并提供专为海洋集体行为研究设计的全面熵诊断。该库引入了七种信息论度量——鱼群凝聚熵、极化熵、深度分层熵、角动量熵、最近邻熵、速度相关熵和鱼群形状熵——用于刻画经典序参量无法揭示的不同组织特征。这些度量共同构成海洋群游指数 (OSI)，提供一个衡量集体无序度的单一标量指标。在四种典型构型（群集、环面、动态平行、高度平行）中进行的验证证实，模型正确再现了已知相行为：群集保持无序，极化度为$P < 0.1$，OSI 为 ≈ 0.71；而高度平行状态的 $P = 0.998$，OSI 为 $= 0.24$，且速度相关熵趋于零。该熵框架能够有效区分环面和动态平行构型；尽管两者的序参量大小相近，其组织机制却各不相同。Numba 即时 (JIT) 编译可将两两相互作用计算速度提升 10–100× 倍，使得在标准工作站硬件上，能够在五分钟内模拟 150–250 个个体、运行 1000–2000 个时间步。NetCDF4 输出确保了与海洋学分析工具的互操作性。该库满足了集体行为建模对标准化、可复现基础设施的需求，类似于成熟的分子动力学代码所提供的基础设施。

关键词 词： 活性物质、集体运动、Couzin模型、熵度量、自推进粒子 s

1 引言

生物系统中的集体运动是涌现复杂性的典型例子：宏观时空有序会从组成个体之间的局部相互作用中自发产生 [1, 2]。鱼群、鸟群、昆虫群和哺乳动物群都表现出连贯的群体行为，而这些行为无法仅凭孤立个体的属性加以预测，因此这些现象明确属于统计物理学和复杂系统科学的研究范畴 [3]。过去三十年来，人们对这类集体状态的理论认识取得了显著进展；这一进展源于人们认识到，活性物质系统——由消耗能量以产生运动的自推进粒子构成——遵循的组织原理与平衡热力学系统截然不同 [4]。

鱼群集群或许是研究最广泛的生物集体运动实例，这得益于实验室实验的便利性、商业渔业的经济重要性，以及自然鱼群显著的视觉规律性 [5, 6]。实证观察表明，群游鱼类会保持特定的最近邻距离，使自身速度与附近同种个体的速度保持一致，并通过群体内快速的信息传递来应对扰动 [7, 8]。这些行为规律推动了基于主体的模型的发展；这类模型提炼出支配集体动力学的基本相互作用规则，同时仍便于进行解析和计算处理 [9, 10]。

Vicsek等人 [11] 的开创性工作提出了一个最简自推进粒子模型，通过受角噪声影响的速度对齐相互作用，捕捉了群集运动的基本物理特性。该模型表明，随着噪声幅度降低，活性粒子系统会经历从无序运动到有序集体运动的连续相变，这与自旋系统中的铁磁相变类似。后续理论分析揭示，Vicsek模型属于一个独特的普适类，其特征是平衡系统中不存在的巨大密度涨落和长程取向关联

。这项工作所确立的概念框架几乎影响了此后所有关于集体行为的建模工作 [12, 13]。

Couzin 等人 [14]通过引入一种基于区域的行为架构，扩展了 Vicsek范式，更忠实地体现了鱼类对不同距离邻居的渐进式反应。他们的模型将每个个体周围的空间划分为三个同心区域：负责避碰的排斥区（ZOR）、促成速度对齐的取向区（ZOO），以及产生长程凝聚的吸引区（ZOA）。这种层级结构结合字典序优先规则，确保避碰优先于社会协调，从而形成丰富的相图，涵盖群集、环面（旋转集群）、动态平行和高度平行的集体状态 [14, 15]。此后，Couzin模型已成为鱼群集群理论与计算研究的标准参考，其应用涵盖行为生态学、机器人学和网络科学 [16, 17]。

尽管理论框架已相当成熟，模拟和分析Couzin模型动力学的计算工具仍分散于各研究团队；大多数实现都是未发表的实验室代码，缺少标准化接口、全面诊断工具或归档数据格式 [18]。这种情况与分子动力学等相关领域形成鲜明对比：在这些领域，LAMMPS和GROMACS等社区代码提供经过验证、有文档记录且可扩展的平台，通过提高可重复性和互操作性来推动科学进步 [19, 20]。缺乏用于集体行为建模的类似基础设施，阻碍了系统性的参数探索、跨研究比较，以及与野外研究观测数据集的整合 [21]。

另一个相关的局限在于用于刻画集体状态的诊断指标。经典序参量——极化 P 用于量化速度对齐，旋转度 M 用于衡量旋转集群的环游相干性——虽为描述鱼群组织 [14, 22]提供了必要依据，却并不全面。即使两个构型具有相同的 (P, M) 值，其空间结构、速度关联或形态特征仍可能存在显著差异。基于香农熵的信息论度量提供了互补视角：它们量化相关分布的离散或集中程度，而非仅关注其一阶矩 [23, 24]。基于熵的诊断方法已被证明有助于刻画相变、检测临界减速的早期预警信号，并区分模拟和实验中表面相似的集体状态[25, 26]。

尽管熵度量有望从模拟和观测数据中提取更丰富的组织特征，但其在鱼群行为研究中的应用仍鲜受关注。海洋生物学家早已认识到，鱼群具有复杂的内部结构——包括密度梯度、位置偏好和形状变化——这些特征会影响捕食者规避、觅食效率和流体动力学性能 [6, 27]。要将这些生物学见解转化为定量诊断指标，所用度量必须能够反映相关可观测量的完整分布，而不能仅依赖汇总统计量。此外，海洋环境具有三维特性，会形成垂直分层和深度依赖行为，而这些现象在二维实验室研究中并不存在，因此需要能够捕捉这一额外维度的度量 [28]。

本文介绍 dewi-kadita，这是一款开源 Python 库，为三维 Couzin 模型模拟提供完整的计算框架，并配备专为海洋集体行为研究设计的全面基于熵的诊断指标。该库实现了完整的基于区域的交互架构，包括视野约束、有界转向速率和随机扰动，同时引入了七种专门的熵度量，用于刻画鱼群组织的不同方面：基于最近邻距离分布的凝聚熵、用于量化速度方向分散度的极化熵、用于测量垂直位置均匀性的深度分层熵、用于刻画环游行为的角动量熵、用于捕捉局部密度结构的最近邻熵、用于描述成对对齐分布的速度相关熵，以及根据位置协方差的主成分分析得出的鱼群形状熵。这些度量汇总为海洋群游指数（OSI），提供单一标量来衡量集体无序度，适用于时间序列分析和相位分类。该软件架构利用 Numba 即时（JIT）编译 [29] 提升计算效率，并生成符合气候与预报（CF）规范的网络通用数据格式（NetCDF4）输出 [30]，确保与标准海洋学分析工具的互操作性，并遵循可查找、可访问、可互操作和可复用（FAIR）数据原则 [31]。

Python 在科学计算领域的主导地位带来了成熟的数值库和广泛的生态系统集成，这些对研究成果的传播至关重要 [32, 33]。Numba 即时编译消除了性能方面的顾虑，使成对交互内核达到接近原生代码的速度，同时保留了快速原型开发和协作开发的便捷性。这种方法借鉴了相邻计算领域中行之有效的策略，使 dewi-kadita 既可作为生产级基础设施，也可作为集体行为研究的教学工具。

2 模型描述

鱼群的集体运动是生物系统中自组织行为的典型范例，宏观空间秩序会从个体间局部的微观相互作用中自发涌现 [14, 1]。这一现象属于更广泛的活性物质系统范畴，其特征是个体消耗能量以产生定向运动，并通过行为规则而非保守力相互作用 [2]。本文提出的理论框架推导了基于区域的

集体动力学控制方程，沿用 Couzin等人 [14], 的开创性表述，将每条鱼视为一个取向自由度受限的自推进粒子。

考虑一组被限制在具有环面拓扑的三维周期域 $\Omega = [0, L]^3$ 中的 N 自推进个体。施加周期性边界条件后，即可在有限计算域内模拟实际上无限广阔的海洋环境，这也反映了一个观察结果：自然界中的鱼群通常占据的空间尺度远小于其所处水体的尺度[5]。每个个体 $i \in \{1, 2, \ldots, N\}$ 在离散时间 t 的状态完全由有序对 $(\mathbf{r}_i(t), \mathbf{v}_i(t))$ 确定，其中位置向量 $\mathbf{r}_i \in \mathbb{R}^3$ 位于三维环面 $\mathbb{T}^3 \cong \mathbb{R}^3/(L\mathbb{Z})^3$ 上，而速度向量 $\mathbf{v}_i \in \mathbb{R}^3$ 则决定运动的方向和大小。因此，整个系统状态位于乘积流形 $\mathcal{M} = (\mathbb{T}^3)^N \times (\mathbb{R}^3)^N$上。

支配鱼类运动的一项基本运动学约束是保持近似恒定的游泳速度，这反映了将速度控制与方向调整相分离的生理调节机制 [34]。因此，我们施加恒定速度约束

$$\|\mathbf{v}_i(t)\| = v_0, \tag{1}$$

其中， $v_0 > 0$ 表示恒定的巡航速度。定义单位速度向量

$$\hat{\mathbf{v}}_i = \frac{\mathbf{v}_i}{\|\mathbf{v}_i\|}, \tag{2}$$

约束 (1) 将速度的自由度从 $\mathbb{R}^3$ 降至单位二球面 $S^2 = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3 : \|\mathbf{x}\| = 1\}$，从根本上改变了系统相较于被动布朗粒子的动力学特性，并使其归入自推进粒子模型 [11]这一类。

环面几何要求谨慎处理粒子间距离。对于位置为$\mathbf{r}_i = (x_i, y_i, z_i)^\top$ 和 $\mathbf{r}j = (x_j, y_j, z_j)^\top$的个体 i和 j ，遵循周期性边界的位移向量由最小映像约定给出：

$$\boldsymbol{\Delta}_{ij} = \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i - L \cdot \mathrm{round}\left(\frac{\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i}{L}\right), \tag{3}$$

其中，取整 运算 round(·) 逐分量进行，并将每个分量映射到最接近的整数 ger.
粒子间 间距因此定义为

$$d_{ij} = \|\boldsymbol{\Delta}_{ij}\| = \sqrt{\Delta_{ij,x}^2 + \Delta_{ij,y}^2 + \Delta_{ij,z}^2}, \tag{4}$$

该距离满足 $d_{ij} \le L\sqrt{3/2}$，对应于基本域内可能的最大距离。此构造确保每个个体都通过拓扑最短路径感知其邻居，这是正确模拟周期性系统的关键要求。

Couzin 等人 [14] 提出的行为响应架构包含三个围绕每个焦点个体的同心球形区域，反映了经验观测到的鱼类对不同距离邻居的响应梯度 [6, 9]。最内侧区域称为 ZOR，其定义为

$$\mathrm{ZOR}_i = \{j \neq i : 0 < d_{ij} < r_r\}, \tag{5}$$

并控制避碰行为。当同种个体进入临界半径 r_r范围内时，焦点个体会受到排斥刺激，该刺激优先于所有其他社会相互作用。称为 ZOO 的中间壳层范围为

$$\mathrm{ZOO}_i = \{j \neq i : r_r \le d_{ij} < r_o\}, \tag{6}$$

并介导速度对齐相互作用，类似于凝聚态系统中的铁磁自旋耦合 [11]。最外侧区域 ZOA 的范围为

$$\mathrm{ZOA}_i = \{j \neq i : r_o \le d_{ij} < r_a\}, \tag{7}$$

并产生内聚倾向，使鱼群在更大空间尺度上保持完整。区域半径满足严格的层级关系 $0 < r_r < r_o \le r_a$，从而确保所有成对相互作用都能得到明确分类。

眼位的解剖学约束使鱼类存在后方盲区，这一特征必须纳入相互作用模型 [6]。我们用半角为 $\alpha \in [0^\circ, 180^\circ]$ 的锥形盲区对这一限制进行参数化；该盲区沿着每个个体的负速度方向向后延伸。仅当满足角度准则时，邻居 j 才位于个体 i 的视野内：

$$\cos\theta_{ij} = \frac{\hat{\mathbf{v}}_i \cdot \boldsymbol{\Delta}_{ij}}{\|\boldsymbol{\Delta}_{ij}\|} > -\cos\alpha \tag{8}$$

其中， θ_{ij} 表示焦点个体的航向与指向邻居 j的方向之间的夹角。可见邻居的集合

$$\mathcal{V}_i = \left\{ j \neq i : \frac{\hat{\mathbf{v}}_i \cdot \boldsymbol{\Delta}_{ij}}{\|\boldsymbol{\Delta}_{ij}\|} > -\cos\alpha \right\} \tag{9}$$

因此不包括位于后方盲锥内的个体，从而在个体间的相互作用拓扑中引入了重要的不对称性。极限情况 $\alpha = 0^\circ$ 和 $\alpha = 180^\circ$ 分别对应完全的全向视觉和仅前向半球视野。

每个行为区的有效邻域都同时考虑距离和可见性约束。

排斥邻域定义为

$$\mathcal{R}_i = \{j \neq i : d_{ij} < r_r \text{ and } j \in \mathcal{V}_i\}, \tag{10}$$

将定向邻域定义为

$$\mathcal{O}_i = \{j \neq i : r_r \leq d_{ij} < r_o \text{ and } j \in \mathcal{V}_i\}, \tag{11}$$

将吸引邻域定义为

$$\mathcal{A}_i = \{j \neq i : r_o \leq d_{ij} < r_a \text{ and } j \in \mathcal{V}_i\}. \tag{12}$$

每个行为区的响应向量均源自支配鱼类行为的优化原则。在 ZOR 内，个体 i 力求最大化其与闯入邻居之间的距离。定义单位位移向量

$$\hat{\mathbf{\Delta}}_{ij} = \frac{\mathbf{\Delta}_{ij}}{\|\mathbf{\Delta}_{ij}\|}, \tag{13}$$

排斥响应向量的计算方式为

$$\mathbf{d}_i^{(r)} = -\sum_{j \in \mathcal{R}_i} \hat{\mathbf{\Delta}}_{ij}. \tag{14}$$

负号确保运动方向背离邻居，而使用单位向量则可避免远处的闯入者对总体响应产生过大影响。

对于 ZOO 内的邻居，焦点个体力求将其航向与局部共识航向之间的角度偏差降至最小。这种对齐倾向产生定向响应向量

$$\mathbf{d}_i^{(o)} = \sum_{j \in \mathcal{O}_i} \hat{\mathbf{v}}_j, \tag{15}$$

其中，$\hat{\mathbf{v}}_j$ 是邻居 j 的单位速度，如式 (2) 所定义。对单位速度向量求和的方式与自旋系统中磁化的计算相似，其合成方向表示局部平均航向。

吸引反 应描述了个体对远处可见邻居的行为，其依据是凝聚优化：

$$\mathbf{d}_i^{(a)} = \sum_{j \in \mathcal{A}_i} \hat{\mathbf{\Delta}}_{ij}. \tag{16}$$

该向量指向远处邻居的角质心，从而产生维持鱼群完整性所必需的长程凝聚力。

各区域的响应按照字典序优先规则进行组合，体现了避碰的生物学优先性 [14, 35]。决定个体 i 行为的期望方向 $\mathbf{d}_i$ 形式如下

$$\mathbf{d}_i = \begin{cases} \mathbf{d}_i^{(r)} & \text{if } \|\mathbf{d}_i^{(r)}\| > 0, \\ w_o \mathbf{d}_i^{(o)} + \mathbf{d}_i^{(a)} & \text{if } \|\mathbf{d}_i^{(r)}\| = 0 \text{ and } (|\mathcal{O}_i| > 0 \text{ or } |\mathcal{A}_i| > 0), \\ \hat{\mathbf{v}}_i & \text{otherwise,} \end{cases} \tag{17}$$

其中，$w_o \in [0, 1]$ 表示定向权重参数，$|\cdot|$ 表示集合基数。该权重因子调节无排斥作用时对齐与凝聚力的相对影响，使系统能够在低 w_o 时的旋转主导动力学与高 w_o时的对齐主导行为之间连续过渡。该优先结构确保避碰始终优先于社会协调，这符合生存要求。当任何区域内都没有邻居时，个体保持当前航向。

每个个体的取向动力学都受到角速度方面生物约束的限制。鱼类无法瞬间重新定向；其转向率受到由流体动力学和生理因素决定的最大值约束 [36]。令 $\theta_{\max} > 0$ 表示每个时间步长内可实现的最大角位移 Δt。从当前方向 $\hat{\mathbf{v}}_i$ 向归一化期望方向进行约束旋转

$$\hat{\mathbf{d}}_i = \frac{\mathbf{d}_i}{\|\mathbf{d}_i\|} \tag{18}$$

过程如下。首先，计算当前取向与目标取向之间的角间距：

$$\phi_i = \arccos\Big(\text{clip}(\hat{\mathbf{v}}_i \cdot \hat{\mathbf{d}}_i, -1, 1)\Big), \tag{19}$$

其中，$\text{clip}(x, a, b) = \max(a, \min(x, b))$ 可确保数值稳定性。随后，更新后的方向的确定性分量可表示为

$$\tilde{\mathbf{v}}_i = \begin{cases} \hat{\mathbf{d}}_i & \text{if } \phi_i \leq \theta_{\max}, \\ \dfrac{(1-\tau_i)\hat{\mathbf{v}}_i + \tau_i \hat{\mathbf{d}}_i}{\|(1-\tau_i)\hat{\mathbf{v}}_i + \tau_i \hat{\mathbf{d}}_i\|} & \text{otherwise,} \end{cases} \tag{20}$$

其中，插值参数

$$\tau_i = \frac{\theta_{\max}}{\phi_i} \tag{21}$$

用于参数化朝目标方向的部分旋转度。这种归一化线性插值（NLERP）方案近似球面线性插值（SLERP），对于较小的转向角，误差为 $\mathcal{O}(\theta_{\max}^3)$；对于生物参数范围内的典型转向率而言，这一误差可以忽略不计。

环境湍流、感知不确定性和内在行为变异性，要求在取向动力学中引入随机扰动 [14]。我们通过振幅为 σ 的加性高斯噪声来模拟这些涨落：

$$\hat{\mathbf{v}}_i' = \frac{\tilde{\mathbf{v}}_i + \sigma \boldsymbol{\xi}_i}{\|\tilde{\mathbf{v}}_i + \sigma \boldsymbol{\xi}_i\|}, \tag{22}$$

其中，$\boldsymbol{\xi}_i = (\xi_{i,\,x},\ \xi_{i,\,y},\ \xi_{i,\,z})^\top$ 表示一个由相互独立的标准正态分量构成的三维随机向量：$\xi_{i,\,k} \sim \mathcal{N}(0,\ 1)$，其中 $k \in \{x, y, z\}$。归一化操作将扰动后的向量投影回S^2，从而保持单位速率约束 (1)。在小噪声极限 $\sigma \ll 1$ 下，这种构造近似于单位球面上的各向同性扩散。

位置动力学　　遵循简单的欧拉积分，以恒定速率沿瞬时速度　　ity 方向：

$$\mathbf{r}_i(t + \Delta t) = [\mathbf{r}_i(t) + v_0 \hat{\mathbf{v}}_i' \Delta t] \mod L, \tag{23}$$

其中，模运算逐分量地实现周期性边界条件。随后，更新后的速度为

$$\mathbf{v}_i(t + \Delta t) = v_0 \hat{\mathbf{v}}_i'. \tag{24}$$

完整动力　　系统的控制方程因此由耦合演化规则（20）–（24）构成，所有个体的取向、速 度和位置。

要描述涌现集体状态，需要使用能够量化全局组织结构的宏观观测量 [14, 1]。该系统在速度空间中具有连续旋转对称性：若不存在外部场或边界，则没有任何方向具有优先地位。这种对称性的自发破缺表现为集体对齐，并由极化序参量刻画

$$P = \frac{1}{N} \left\| \sum_{i=1}^{N} \hat{\mathbf{v}}_i \right\|. \tag{25}$$

该量满足 $P \in [0, 1]$，其中 $P \to 0$ 表示各向同性速度分布，类似于顺磁相；$P \to 1$ 则表示完全对齐，对应于铁磁序。因此，极化在经典自旋系统中直接类似于磁化 [11]。

该系统还表现出关于集体质心的旋转对称性。这一对称性的破缺对应于相干角动量的出现，这是旋转集群或环面构型的特征。设群体质心为

$$\mathbf{r}_{\mathrm{cm}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \mathbf{r}_i, \tag{26}$$

并定义从质心指向个体 i 的单位向量为

$$\hat{\mathbf{r}}_i^{\,c} = \frac{\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{\mathrm{cm}}}{\|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{\mathrm{cm}}\|}. \tag{27}$$

则旋转序参量为

$$M = \left\| \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \hat{\mathbf{r}}_i^{\,c} \times \hat{\mathbf{v}}_i \right\|, \tag{28}$$

它量化绕群体中心的旋转运动相干性。当 $M \to 1$时，所有个体围绕共同轴同相环绕。

二维序参量空间（P, M）包含由Couzin等人 [14]识别出的四个定性不同的集体相。群集相以 $P \approx 0$ 和 $M \approx 0$为特征，表现为既无平移相干性也无旋转相干性的无序聚集，类似于高温顺磁态。环面相具有中等极化但较高的旋转度（$M \gtrsim 0.5$），呈现出一致性群游，其中个体围绕共同中心执行圆形轨道，破缺旋转对称性但不破缺平移对称性。动态平行相以高极化（$P \gtrsim 0.7$）并伴有残余涨落为特征，代表具有显著方向变异性的对齐集体运动，类似于接近临界性的铁磁体。高度平行相以 $P \gtrsim 0.9$ 和可忽略的旋转度为特征，构成以对齐为主导的体系的基态，具有稳定的定向运动。

除了经典序参量之外，信息论度量还能为集体系统中的组织复杂性提供补充性刻画 [15]。对于通过将连续可观测量划分为 n 个区间进行直方图统计而得到的离散概率分布 $\{p_k\}_{k=1}^{n}$，香农熵

$$H = -\sum_{k=1}^{n} p_k \ln p_k \tag{29}$$

量化分布中存在的不确定性或无序程度，其中我们采用约定 $0 \ln 0 = 0$。最大熵 $H_{\max} = \ln n$ 对应于均匀分布，除以该最大值进行归一化可得到

无量纲归一化熵

$$\tilde{H} = \frac{H}{\ln n} \in [0, 1]. \tag{30}$$

现在，我们定义七种专门用于表征海洋集体行为的熵度量，分别刻画鱼群组织的不同方面。

凝聚熵用于表征最近邻距离（NND）的分布，反映鱼群紧密度和捕食者防御效率 [6]。对于每个个体 i，最近邻距离为

$$d_i^{\mathrm{NN}} = \min_{j \neq i} d_{ij}, \tag{31}$$

通过式 (3)–(4) 在周期性边界条件下计算。将最近邻距离值 $\{d_i^{\mathrm{NN}}\}_{i=1}^{N}$ 在区间 $[0, L/2]$内划分为n_c 个区间并进行直方图统计，得到计数 $\{c_k\}_{k=1}^{n_c}$和概率 $p_k = c_k/N$。鱼群凝聚熵为

$$H_{\mathrm{coh}} = \frac{-\sum_{k=1}^{n_c} p_k \ln p_k}{\ln n_c}. \tag{32}$$

紧密鱼群的最近邻距离分布较窄，因此 H_{coh}较低；而分散聚集群的分布较宽， H_{coh}较高。

极化熵量化单位球面上速度方向的分散程度，刻画不同于式 (25) 中标量极化度 P 的排列无序度。将单位速度向量转换为球坐标:

$$\theta_i = \arccos(\hat{v}_{i,z}), \quad \varphi_i = \arctan 2(\hat{v}_{i,y}, \hat{v}_{i,x}) + \pi, \tag{33}$$

其中， $\theta_i \in [0, \pi]$ 为极角， $\varphi_i \in [0, 2\pi]$ 为方位角。采用包含n_θ 个极角区间和n_φ 个方位角区间的二维直方图，得到计数 h_{jk}。为考虑非均匀的立体角微元 $\sin\theta\, d\theta\, d\varphi$，直方图按 $\sin\theta_j$ 加权，其中 θ_j 为区间中心:

$$\tilde{h}_{jk} = h_{jk} \sin\theta_j, \tag{34}$$

~ ~归一化为概率 $p_{jk} = h_{jk} / \sum_{j,\ k} h_{jk}$ 并展平为一维分布后，极化熵为

$$H_{\mathrm{pol}} = \frac{-\sum_{j,k} p_{jk} \ln p_{jk}}{\ln(n_\theta n_\varphi)}. \tag{35}$$

定向鱼群的角度分布集中（ H_{pol}较低），而各向同性速度场的熵则趋近于最大值。

鱼群通常会根据温跃层、氧梯度或光照水平形成深度分层。深度分层熵用于描述垂直位置分布的均匀程度。将 z坐标$\{z_i\}_{i=1}^{N}$ 在 $[0, L]$ 范围内划分为 n_z 个区间进行直方图统计，可得到概率 $\{p_k\}$，归一化熵为

$$H_{\mathrm{depth}} = \frac{-\sum_{k=1}^{n_z} p_k \ln p_k}{\ln n_z}. \tag{36}$$

集中在单一深度的鱼群具有较低的 H_{depth}；垂直分布范围均匀时， H_{depth}则较高。

角动量熵描述个体对集体旋转的贡献分布，可补充式（28）中的标量旋转参数 M 。对于每个个体，其径向位置（相对于质心）与速度方向的叉积的大小，量化了该个体对瞬时旋转运动的贡献:

$$L_i = \|\hat{\mathbf{r}}_i^{\,c} \times \hat{\mathbf{v}}_i\| \in [0, 1]. \tag{37}$$

将 $\{L_i\}_{i=1}^{N}$ 划分为 n_L 个区间，并在 $[0, 1]$ 范围内进行直方图统计，计算归一化香农熵，得到

$$H_{\mathrm{ang}} = \frac{-\sum_{k=1}^{n_L} p_k \ln p_k}{\ln n_L}. \tag{38}$$

一致性群游会产生均匀的角动量贡献（高 H_{ang} 集中在 $L_i \approx 1$附近），而混合旋转状态则表现出不同的贡献。

除了第一近邻距离外，到多个邻居的距离变化情况也能表征局部密度结构和社交网络拓扑。对于每个个体 i，计算其到 k 个最近邻（不包括自身）的距离： $\{d_i^{(1)}, d_i^{(2)}, \ldots, d_i^{(k)}\}$。个体 i的变异系数为

$$\mathrm{CV}_i = \frac{\sigma_i}{\mu_i}, \tag{39}$$

其中， $\mu_i = k^{-1} \sum_{m=1}^{k} d_i^{(m)}$ 和 $\sigma_i = \sqrt{k^{-1} \sum_{m=1}^{k} (d_i^{(m)} - \mu_i)^{\,2}}$ 分别为 k近邻距离的均值和标准差。将 {变异系数$_i\}_{i=1}^{N}$ 划分为 n_{NN} 个区间，并在 $[0, 2]$ 范围内进行直方图统计，得到熵

$$H_{\mathrm{NN}} = \frac{-\sum_{k=1}^{n_{\mathrm{NN}}} p_k \ln p_k}{\ln n_{\mathrm{NN}}}. \tag{40}$$

规则间距模式会产生较低的 CV 值，且分布较为集中（低 H_{NN}），而不规则局部结构则会产生可变的 CV。

速度相关熵刻画成对速度对齐的分布，捕捉

极化所捕捉的均值之外的完整相关结构。对于所有满足 $i < j$ 的唯一成对组合（i、j），计算速度点积：

$$\rho_{ij} = \hat{\mathbf{v}}_i \cdot \hat{\mathbf{v}}_j \in [-1, 1]. \tag{41}$$

转向相 关值 $[0,1]$ 经由 $\tilde{\rho}_{ij} = (\rho_{ij} + 1)/2$，并将所有 $N(N-1)/2$ 相关值统计到 n_ρ 区间后即可得到熵 py

$$H_{\mathrm{vel}} = \frac{-\sum_{k=1}^{n_\rho} p_k \ln p_k}{\ln n_\rho}. \tag{42}$$

高度定向的鱼群，其所有相关值都接近 $\rho_{ij} \approx 1$（H_{vel}较低）；而无序鱼群的相关值则分布在 $[-1, 1]$（H_{vel}较高）。

鱼群会根据行为状态和环境条件呈现不同的形态（球形、细长形、圆盘形）[6]。形状熵通过主成分分析刻画这种形态变异性。将位置居中：

$$\tilde{\mathbf{r}}_i = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{\mathrm{cm}}, \tag{43}$$

并计算 3×3 协方差矩阵：

$$\mathbf{C} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \tilde{\mathbf{r}}_i \tilde{\mathbf{r}}_i^{\top}. \tag{44}$$

设 $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \lambda_3 \geq 0$ 为$\mathbf{C}$的特征值，表示沿主轴方向的方差。将其归一化为类概率分布：

$$q_m = \frac{\lambda_m}{\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3}, \quad m \in \{1, 2, 3\}, \tag{45}$$

形状熵为

$$H_{\mathrm{shape}} = \frac{-\sum_{m=1}^{3} q_m \ln q_m}{\ln 3}. \tag{46}$$

球形鱼群具有 $\lambda_1 \approx \lambda_2 \approx \lambda_3$，得到 $H_{\mathrm{shape}} \to 1$；而高度细长的鱼群具有 $\lambda_1 \gg \lambda_2$，λ_3，得到 $H_{\mathrm{shape}} \to 0$。

OSI 通过结合七种熵度量，并采用针对海洋集体行为评估优化的权重，为鱼群无序程度提供综合度量：

$$\mathrm{OSI} = \sum_{m=1}^{7} w_m H_m, \tag{47}$$

其中 $H_m \in \{H_{\mathrm{coh}}, H_{\mathrm{pol}}, H_{\mathrm{depth}}, H_{\mathrm{ang}}, H_{\mathrm{NN}}, H_{\mathrm{vel}}, H_{\mathrm{shape}}\}$，且权重满足 $\sum_m w_m = 1$。默认加权方案将对齐和内聚力作为主要群游指标：

$$(w_{\mathrm{coh}}, w_{\mathrm{pol}}, w_{\mathrm{depth}}, w_{\mathrm{ang}}, w_{\mathrm{NN}}, w_{\mathrm{vel}}, w_{\mathrm{shape}}) = (0.18, 0.28, 0.08, 0.08, 0.10, 0.18, 0.10). \tag{48}$$

OSI 满足 OSI $\in [0,1]$；OSI $\to 0$ 表示鱼群行为高度有序（所有指标的熵都较低），而 OSI $\to 1$ 则表示无序聚集（熵较高）。

一个互补的标量诊断指标是有序指数（OI），它从标准序参量中提取主要的有序行为：

$$\mathrm{OI} = \max(P, M). \tag{49}$$

该指标满足 OI $\in [0,1]$，较高的值表示强烈的对齐或相干旋转。

3 数值实现

上一节建立的理论框架为鱼群集群动态的计算模拟提供了数学基础。本节介绍 dewi-kadita 库中的数值实现。该库是一个基于 Python 的模拟软件包，旨在高性能地计算三维 Couzin 模型动力学，并提供全面的诊断功能。

该计算架构利用了 Python 生态系统中若干成熟的科学计算库，各自承担特定的功能。NumPy [37]提供了基础数据结构和数值运算：多维数组用于存储个体位置 $\mathbf{r}_i$ 和速度 $\mathbf{v}_i$；向量化函数则用于根据式 (4) 计算欧几里得范数、根据式 (19) 计算角分离所需的点积、根据式 (8) 进行视野检查、根据式 (28) 计算旋转序参量所需的叉积，以及根据式 (23) 实现周期性边界条件的模运算。初始条件和式 (22) 中随机扰动所需的随机数由 NumPy 的伪随机数功能生成。

SciPy [38] 通过其 cKDTree 类提供 k-d 树空间数据结构，可加速凝聚熵计算（式 (31)）和 k-NN 熵计算（式 (39)）所需的最近邻查询。boxsize 参数支持正确处理周期性边界条件，确保距离计算遵循式 (3) 中的最小映像约定。与穷举式成对搜索的算法复杂性 $\mathcal{O}(N^2)$ 相比，基于树的查询可将其降至 $\mathcal{O}(N \log N)$。

Matplotlib [39] 生成所有可视化图像，包括使用 Axes3D 投影和矢量场图展示个体构型的三维渲染图、序参量的时间序列 $P(t)$ 和 $M(t)$，以及

显示全部七项指标的熵诊断面板。该库既能渲染静态汇总图，也能为动画序列生成单独的帧。

数据序列化采用两个互补的库。pandas [40] 构建用于表格输出的 DataFrame 对象，从而能够将序参量时间序列、熵度量和最终智能体状态结构化导出为逗号分隔值（CSV）文件。NetCDF4 [30] 则写入符合 CF 惯例的自描述二进制文件，包含规范的维度定义（时间、鱼类索引、空间坐标）、坐标变量和全局属性，以保存完整的模拟元数据，便于存档并与标准海洋学分析工具互操作。

Pillow 提供动画生成所需的图像处理功能，可对渲染帧应用高斯模糊滤波器和亮度增强，以营造水下视觉效果。tqdm 会在长时间模拟运行和熵计算循环期间显示进度条，实时反馈计算进度。

每个时间步的计算瓶颈在于对成对相互作用进行 $\mathcal{O}(N^2)$ 求值，这是确定区域归属并累积响应向量所必需的，见式（14）–（16）。Numba [29] 通过即时编译将核心数值内核编译为优化的机器码，以解决这一问题。速度更新函数通过式（5）–（7）确定区域归属，依据式（14）–（16）累积响应向量，应用式（17）中的优先规则，并通过式（20）执行约束旋转度；该函数带有编译指令装饰器，用于指定三种运行模式。nopython=True 标志确保完全编译，不回退到 Python解释器，从而消除解释器开销。cache=True 标志会将编译后的内核持久化到磁盘，避免后续会话中重复编译。parallel=True 标志结合 prange 循环结构，可将个体外层循环自动分配到可用的处理器核心上。这种编译策略相较于纯 Python 实现，通常可带来 10–100$\times$ 倍的加速，使得在标准工作站硬件 [41]上模拟数百个个体切实可行。

约束旋转操作通过归一化线性插值（NLERP），实现式 (20) 所述的球面插值。给定式 (18) 中的当前方向 $\hat{\mathbf{v}}_i$ 和归一化期望方向 $\mathbf{d}_i$，算法首先根据式 (19) 计算角间距 ϕ_i。当 $\phi_i \le \theta_{\max}$ 时，个体直接达到期望取向；否则，通过式 (21) 中的插值参数 τ_i 进行部分旋转。根据式 (22)，随机扰动通过加性高斯涨落引入，随后将结果重新归一化至单位球面。位置更新则根据式 (23) 所述的平流动力学进行一阶欧拉积分。

基于熵的诊断指标需要高效计算空间统计量。式 (31) 中最近邻距离的计算采用 k-d 树，并支持周期边界。式 (42) 中的速度相关熵需要计算全部 $N(N-1)/2$ 个唯一的成对点积；通过矩阵乘法 $\mathbf{V}\mathbf{V}^\top$ 高效计算，其中 $\mathbf{V}$ 是由单位速度向量构成的 $N \times 3$ 矩阵，随后提取上三角元素。式 (35) 中的极化熵对二维角度直方图进行适当加权，乘以 $\sin\theta$，以计入式 (34) 所述的球坐标雅可比。式 (46) 中的鱼群形状熵由式 (44) 中位置协方差矩阵的特征值分解得出。

dewi-kadita 库包含四个典型测试案例，系统地探索集体行为的相空间。这些案例经过挑选，旨在展示 Couzin模型所呈现的不同动力学状态，并作为验证基准。这些配置对应于原始分析中确定的、特征明确的集体状态 [14]。

案例 1（群集）采用产生无序聚集的参数：$N = 150$ 个体，区域大小 $L = 25.0$，速度 $v_0 = 1.0$，区域半径（r_r，r_o，r_a）=（2.0，3.0，15.0），噪声幅度 $\sigma = 0.2$ 弧度，转向率 $\theta_{\max} = 0.4$ 弧度，盲区角度 $\alpha = 30°$。与取向区相比，较大的排斥区会阻止持续对齐，同时维持松散的内聚力，从而使两个序参量（$P \approx 0$、$M \approx 0$）的值都较低。此配置模拟摄食群集，其中避碰的重要性高于协调。

案例 2（环面）通过专门的初始化和参数选择实现旋转运动状态：$N = 200$个体，（r_r，r_o，r_a）=（1.0，3.0，10.0），降低定向权重 $w_o = 0.1$（式 17），较低噪声 $\sigma = 0.05$ rad，降低转向率 $\theta_{\max} = 0.2$ rad，以及较大的盲区角度 $\alpha = 150°$。个体起初排列成一个水平圆，并以切向速度运动，从而引发旋转运动。这些设置抑制全局对齐，同时保留局部吸引，产生持续旋转（$M \gtrsim 0.5$）和中等程度的极化。

案例 3（动态平行）产生具有方向波动的对齐集体运动：$N = 180$ 个体，$L = 28.0$，$v_0 = 1.2$，（r_r，r_o，r_a）=（1.0，10.0，18.0），$\sigma = 0.12$ rad，$\theta_{\max} = 0.35$ rad，$\alpha = 25°$，以及标准 $w_o = 1.0$。较大的定向区促进对齐，而适度的噪声允许方向波动，从而产生较高的极化（$P \gtrsim 0.7$），并伴有准周期性的重新定向事件，这是迁徙远洋鱼群的典型特征。

情形 4（高度平行）实现最大对齐：$N = 250$ 个体，$L = 35.0$，$v_0 = 1.5$，(r_r, r_o, r_a) =(1.0，12.0,20.0)，低噪声 $\sigma = 0.05$ rad，$\theta_{\max} = 0.2$ rad，以及较小的盲区角度 $\alpha = 20°$。这些设置产生稳定的定向运动，极化趋近于 1（$P \gtrsim 0.9$），旋转度极小，代表高度协调的流动行为。

虽然这四个测试用例系统地涵盖了主要集体相，但该库支持通过基于文本的配置文件或直接访问 Python API 来使用任意参数配置。用户可以为所有模型参数指定自定义值，包括区域半径（r_r，r_o，r_a）、运动学约束（v_0，$\theta_{\max}$）、噪声幅度 σ、盲区角度 α、定向权重 w_o、集群规模 N、区域范围 L 和时间离散化 Δt。除标准的随机配置和环面配置外，自定义初始化方案还支持

从指定的初始条件出发，调查瞬态动力学和弛豫行为 .

输出功能涵盖多种格式：序参量（25）–（28）和所有熵指标（32）–（46）的时间序列可导出为 CSV 文件；包含完整元数据的完整轨迹数据可写入符合 CF 标准的 NetCDF4 文件；静态可视化图像以 PNG 格式呈现；动画三维轨迹则生成为 GIF 序列。模块化架构将核心动力学、诊断计算、数据处理和可视化分别置于独立的子包中，便于针对特定研究应用进行扩展。

4 结果与讨论

dewi-kadita 库通过对四种典型集体状态进行系统模拟得到了验证。模拟在一台 ThinkPad P52s 工作站上执行，该工作站配备 Intel Core i7-8550U 处理器（4 个核心、8 个线程，主频 4.0 GHz），运行 Fedora Linux 39。每次模拟的实际运行时间均在 5–6 分钟以内，计算负载分配如下：主动力学积分（根据集群规模和持续时间不同，为 9–25 秒）、熵指标计算（10–17 秒），以及包括动画生成在内的可视化（260–296 秒）。Numba 即时编译实现了预期的加速效果，使得对包含 150–250 个个体、运行 1000–2000 个时间步的集群进行 $\mathcal{O}(N^2)$ 两两相互作用计算成为可行。

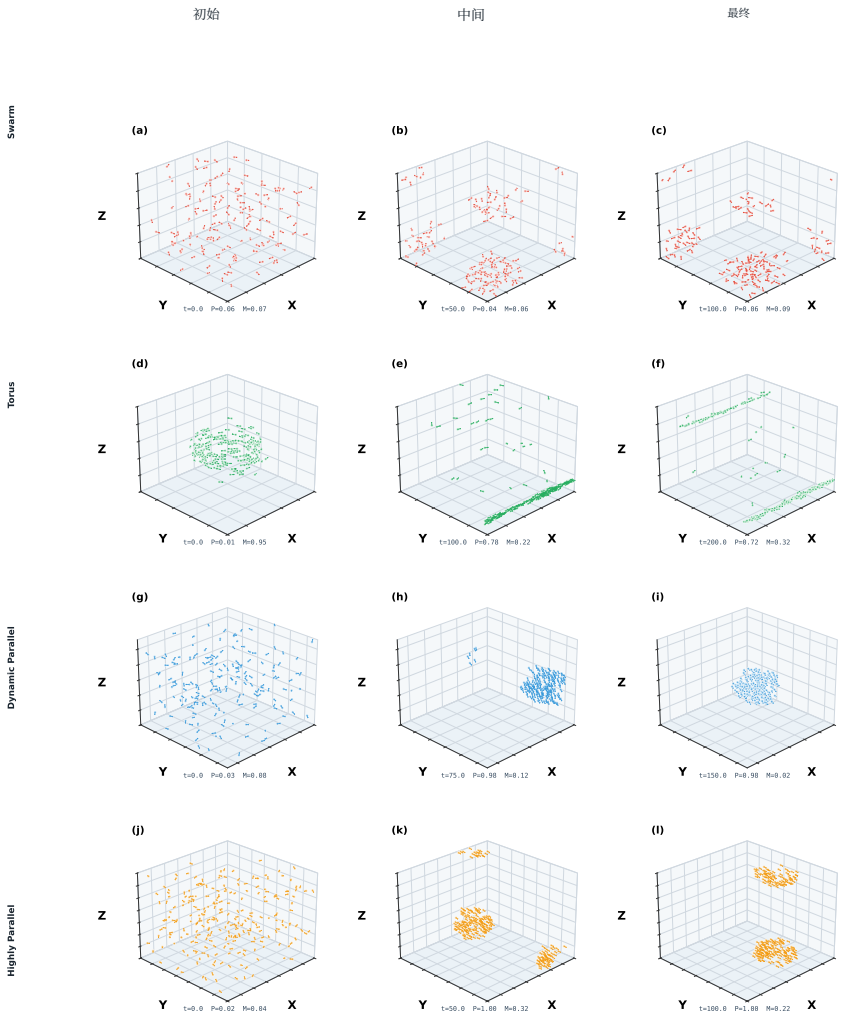


图1：四种Couzin模型情景下集体状态的时空演化。各行对应不同的行为模式：群集（a–c）、环面（d–f）、动态平行（g–i）和高度平行（j–l）。各列表示初始（$t = 0$）、中间（$t = T/2$）和最终（$t = T$）仿真时间的时间快照。三维矢量场图显示鱼的位置及速度向量；各面板标注了瞬时极化 P 和旋转度 M 值。群集构型始终保持无序聚集，而环面情形则从初始旋转集群（$M = 0.95$）过渡到部分对齐。动态平行和高度平行两种情形均表现出从随机初始条件到相干定向运动（$P > 0.98$）的快速有序化。

图 1 展示了四种情景下个体构型的时空演化。群集情景（面板 a–c）呈现出类顺磁相特有的持续无序状态，在整个 $T = 100$ 时间单位的模拟过程中，两个序参量始终低于 0.1。这种行为是以下因素共同作用的结果：

相对较大的排斥区（$r_r = 2.0$）主导了狭窄的定向区（$r_o - r_r = 1.0$），同时噪声幅度较高（$\sigma = 0.20$ rad），转向率也较高（$\theta_{\max} = 0.40$ rad）。由此产生的动力学阻碍了持续对齐，但通过吸引区维持了松散的内聚力，这与该参数范围的理论预测一致 [22]。空间统计表明，到最终状态时，最近邻距离稳定在约 1.73 ± 0.31 体长，说明避碰效果良好，且未形成晶体有序结构。

环面情景（面板 d–f）以排列成水平圆形且具有切向速度的个体作为初始状态，得到初始旋转参数 $M = 0.95$。然而，系统未能维持稳定的旋转集群，而是演变为混合态，最终值为 $P = 0.72$ 和 $M = 0.32$。这种转变反映了环面构型在所选参数下固有的不稳定性：尽管较大的盲区角度（$\alpha = 150°$）和较低的定向权重（$w_o = 0.1$）有利于跟随行为，但有限系统尺寸和周期性边界条件可能引发自发对称性破缺，使系统转向平移有序状态 [42]。极化熵从初始值 $H_{\text{pol}} = 0.67$ 降至平衡态的 $H_{\text{pol}} = 0.39$，量化了尽管参数设置旨在抑制对齐，系统仍出现的部分对齐。这一结果表明，Couzin模型的相界并非截然分明，有限尺寸效应可能导致名义上不同的集体状态之间发生转变 [43]。

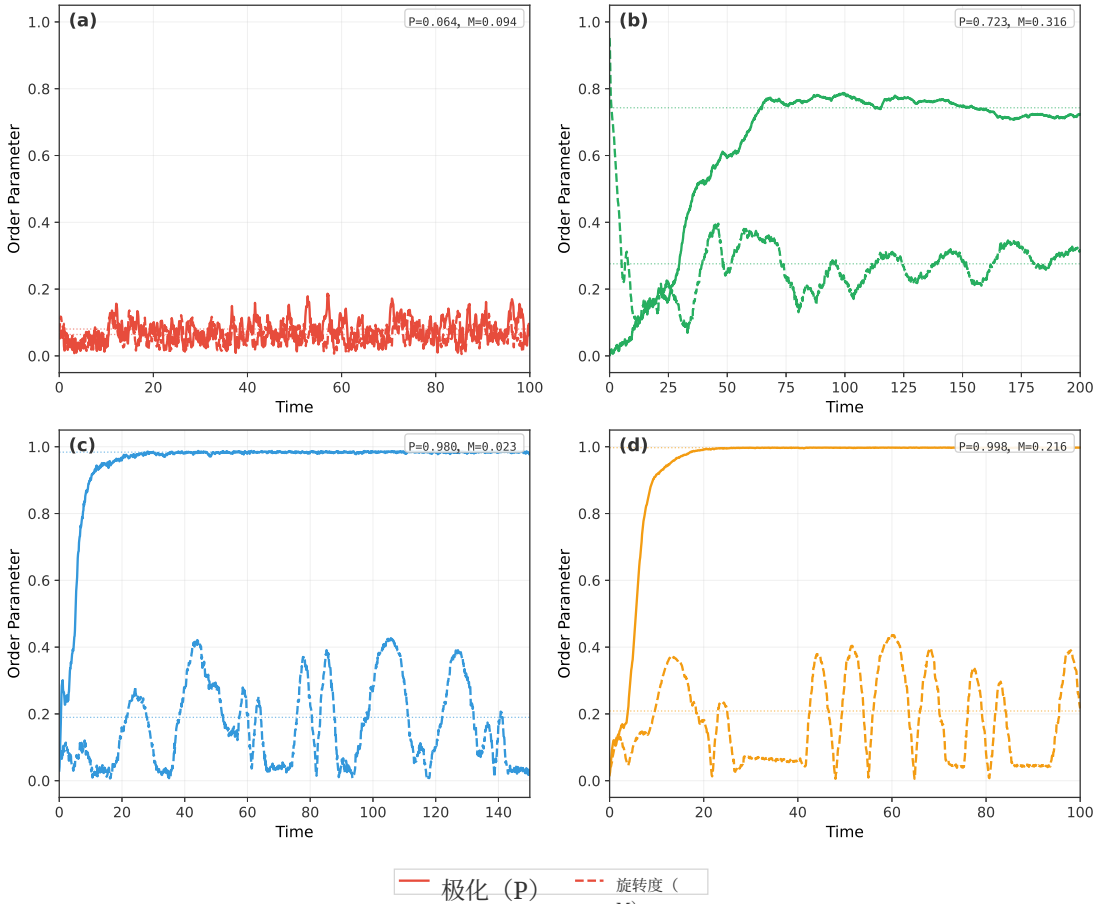


图2：四种情景下经典序参量的时间演化。每个面板均显示极化度 P（实线）和旋转度 M（虚线）随时间的变化，水平点线表示在每次模拟后半段计算得到的平衡均值。面板标注给出最终值。(a) 群集：两个参数均在零附近涨落，没有持续的有序状态。(b) 环面：初始较高的旋转度逐渐衰减，而极化度不断上升，表明系统从旋转集群转向部分对齐。(c) 动态平行：在 $t \approx 30$ 个时间单位内迅速收敛至 $P \approx 0.98$。(d) 高度平行：收敛速度最快，极化度接近 1（$P = 0.998$），且涨落极小（$\sigma_P = 0.0003$）。

动态平行和高度平行配置（图1，g–l 面板）均从随机初始条件出发实现了强烈的对齐，但其动力学特征各不相同，如图2所示。动态平行情形收敛至 $P = 0.98$，但仍存在涨落（$\sigma_P = 0.0018$）；而高度平行情形则达到$P = 0.998$，涨落幅度降低了一个数量级（$\sigma_P = 0.0003$）。这种差异主要源于噪声幅度不同：$\sigma = 0.12$ 弧度与 $\sigma = 0.05$ 弧度。两种情形中较大的定向区（分别为$r_o = 10$ 和 $r_o = 12$）确保每个个体在计算期望航向时都会对众多邻居的信息取平均，从而形成实现全局对齐所需的长程速度关联 [44]。高度平行情形中的鱼群形态（l 面板）显示，鱼群沿运动方向明显拉长，

其鱼群形状熵为 $H_{\text{shape}} = 0.28$，表明各向异性显著；相比之下，近球形动态平行群体的鱼群形状熵为 $H_{\text{shape}} = 0.99$。

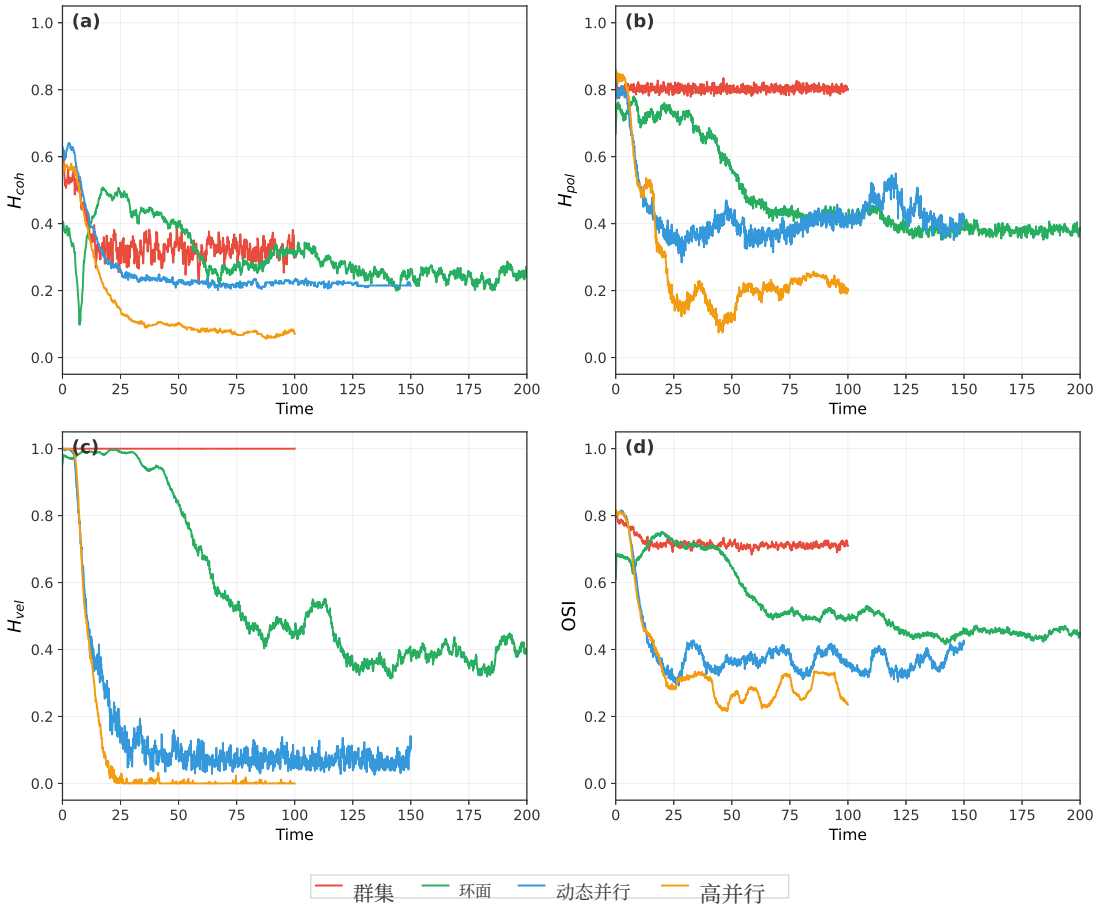


图 3：所有场景中海洋熵度量的时间演化。(a) 基于最近邻距离分布的鱼群凝聚熵 H_{coh}。(b) 量化单位球面上速度方向分散度的极化熵 H_{pol}。(c) 表征成对对齐分布的速度相关熵 H_{vel}。(d) OSI，即所有七项熵度量的加权综合指标。数值越低表示状态越有序。高度平行案例实现了最低的最终 OSI（0.24），而群集始终保持较高的不规则性（OSI ≈ 0.71）。

dewi-kadita 中实现的基于熵的诊断指标，在经典序参量之外，为集体组织提供了互补性表征。图 3 展示了四项关键度量的时间演化。速度相关熵 H_{vel} 尤其具有区分力：在高度平行案例中，该指标从接近 1（表示成对相关性在 $[-1, 1]$上呈均匀分布）下降至实际上为零，表明所有速度对都已实现完全相关（$\rho_{ij} \approx 1$）。该度量捕捉到了标量极化度 P所缺失的信息；即使两个构型具有相同的 P 值，如果其相关性分布的形状 [25]不同，它们也可能表现出不同的 H_{vel}。群集始终保持 $H_{\text{vel}} \approx 1.0$，证实除随机预期之外不存在速度相关性。

凝聚熵 H_{coh} 揭示了不同情景下截然不同的间距模式。群集在$H_{\text{coh}} = 0.31$达到平衡态，反映出最近邻距离分布较窄，且集中在排斥半径附近。高度平行情景达到 $H_{\text{coh}} = 0.07$，表明间距高度均匀——这是避碰与内聚吸引力垂直于集体运动方向作用所产生的压缩效应之间达到平衡的结果 [7]。有趣的是，环面情景的凝聚熵处于中等水平（$H_{\text{coh}} = 0.25$），而最近邻变异性较高（变异系数熵 $H_{\text{NN}} = 0.60$）；这反映了旋转构型中固有的密度梯度：外缘个体与中心附近个体所处的局部环境不同。

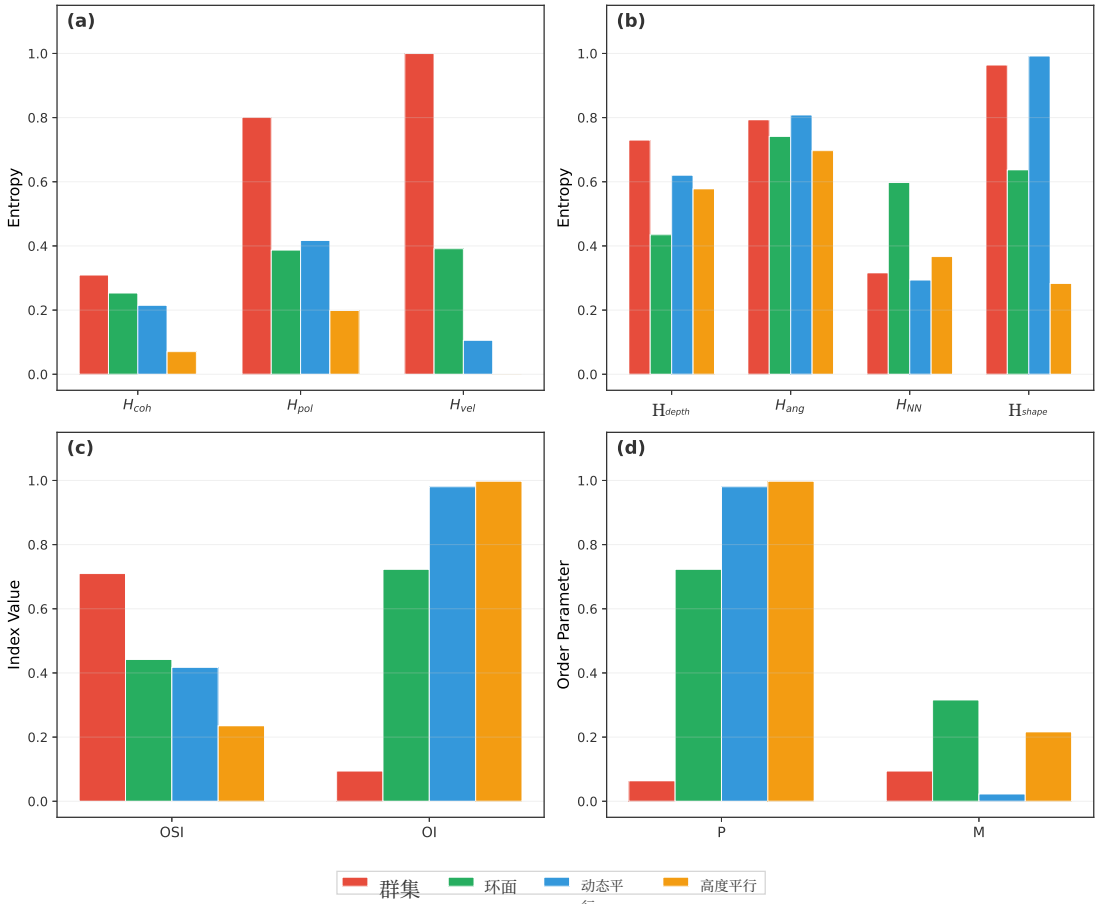


图4：各情景下所有指标的最终状态对比。(a) 主要熵度量：鱼群凝聚度（H_{coh}）、极化（H_{pol}）和速度相关性（H_{vel}）。(b) 次要熵度量：深度分层（H_{depth}）、角动量（H_{ang}）、最近邻变异性（H_{NN}）和鱼群形状（H_{shape}）。(c) 复合指数：OSI 和 OI。(d) 经典序参量：极化（P）和旋转度（M）。熵度量综合起来能够区分全部四个阶段，其中 OSI 从有序状态（高度平行，OSI $= 0.24$）到无序状态（群集，OSI $= 0.71$）呈现单调排序。

图4总结了平衡态熵分布，表明七指标框架能够成功区分全部四种集体相。OSI 按直观顺序排列各情景：高度平行（OSI$= 0.24$）$<$ 动态平行（OSI $= 0.42$）$<$ 环面（OSI $= 0.44$）$<$ 群集（OSI $= 0.71$）。这一排序与 OI 分类一致，但更为精细；OI 无法区分环面与动态平行情景，因为两者通过不同机制（旋转与极化）达到相近的最大序参量。深度分层熵 H_{depth} 在所有情景下均保持中等水平（0.43–0.73），这反映出我们的均质周期性区域中不存在垂直梯度；在纳入海底地形、温跃层或避开捕食者等因素的模拟中，这一指标将更具参考价值 [28]。

角动量熵 H_{ang} 揭示了鱼群内部旋转贡献的异质性。环面情景的数值为 $H_{\mathrm{ang}} = 0.74$，低于群集情景的 0.79，表明尽管全局绕圈运动有所衰减，个体对集体旋转的贡献仍更加均匀。这说明即使宏观环面结构逐渐消散，局部旋转相关性仍然存在。动态平行情景在平衡态时的 $H_{\mathrm{ang}} = 0.81$ 偏高，且时间变异性较高（$\sigma = 0.17$）；这与偶发的方向变化相符，这些变化会短暂地产生旋转运动，随后鱼群重新调整方向 [8]。

OSI 的默认加权方案（Equation48）将最高优先级赋予极化熵（w_{pol} =0.28），这体现了对齐在群游鱼类中的生物学优先性 [45]。不过，dewi-kadita 的模块化架构允许用户为其他组织特征占主导地位的应用场景指定权重。例如，垂直迁移研究可以提高 w_{depth} 的权重，而对环游行为的调查则可以提高 w_{ang} 的权重。该库会分别输出全部七种分量熵，因此无需重新运行模拟即可进行事后重新加权。

计算实验揭示了周期性边界条件下 Couzin模型动力学的若干显著特征。首先，不同阶段的收敛时间尺度差异很大：高度平行情形在 $t \approx 20$ 时间单位内即可达到其平衡极化的 99%，而环面情形由于旋转集群与对齐的趋势相互竞争，需要运行完整的$T = 200$ 模拟才能接近准平衡态。其次，周期性边界阻止了鱼群真正碎裂；实验观察到，在开放区域中，当噪声或扰动超过临界阈值 [22]时，鱼群会发生碎裂。第三，随机动力学引入了可测量的涨落，即使处于平衡态也是如此：群集情形的极化变异系数 CV 为 $t \approx 20$ ，而高度平行情形达到 CV$T = 200$ ，相对稳定性相差三个数量级。

即使处于平衡态，随机动力学也会引入可测量的涨落：群集情形的极化变异系数 $\mathrm{CV}_P = 0.45$，而高度平行情形达到 $\mathrm{CV}_P = 0.0003$，相对稳定性相差三个数量级。

符合 CF 标准的 NetCDF4 输出格式确保了与标准海洋学分析工具的互操作性，便于将 dewi-kadita 模拟与观测数据集整合。每个输出文件都包含完整的轨迹数据（所有已保存时间步长的位置和速度）、序参量和熵度量的时间序列，以及包括所有模型参数、随机种子和软件版本在内的完整元数据。这种归档完整性支持资助机构和期刊日益要求的可重复性标准 [46]。CSV 输出选项为不熟悉 NetCDF4 约定的用户提供了即时访问途径，而动画 GIF 序列则能够快速直观地评估模拟质量。

当前验证确认，dewi-kadita 能够正确复现原始 Couzin 公式中确定的四种经典集体相 [14], ，同时通过针对海洋应用定制的信息论度量扩展了诊断框架。该软件库经 Numba 加速的核心在标准工作站硬件上能够为参数扫描和敏感性分析提供足够的性能，不过研究更大规模集合（$N > 500$）或更长持续时间的用户，可能会受益于由 parallel=True 编译标志启用的并行循环结构。未来的开发重点包括纳入异质智能体群体 [47], 、代表海洋洋流的外部流场，以及用于研究集体逃逸反应的捕食者—猎物交互模块。

5 结论

dewi-kadita 库提供了一个经过验证的开源平台，用于三维 Couzin 模型模拟；该平台通过一套专为海洋集体行为研究量身打造的综合性基于熵的框架，扩展了经典的序参量诊断方法。针对四种典型集体状态——群集、环面、动态平行和高度平行——进行的系统验证，证实该平台能够正确再现已知的相行为，同时表明七种海洋熵度量能够成功区分仅凭极化和旋转度无法辨别的构型。OSI 提供了一个单一标量度量，可对不同相中的集体无序度进行单调排序，从而支持长时间序列中的自动状态分类和转变检测。经 Numba 加速的计算使得在标准工作站硬件上进行参数扫描切实可行；符合 CF 标准的 NetCDF4 输出则确保了与海洋学分析流程的互操作性，并符合当代数据共享标准。该模块化架构便于扩展至异质智能体群体、外部流场以及捕食者—猎物动力学，使该库成为连接统计物理学与海洋生态学的计算研究基础设施。

致谢

S.H.S.H. 感谢加州大学河滨分校院长杰出研究员奖学金 2023 提供的经费支持。F.K. 和 I.P.A. 感谢万隆理工学院通过研究、社区服务与创新计划（资助编号：FITB.PPMI-1-04-2025）以及由研究与创新局管理的青年研究人员计划（资助编号：2352/IT1.B07.1/TA.00/2025）提供的支持。

作者贡献

S.H.S.H.：概念化；形式分析；调查；方法学；软件；验证；可视化；经费获取；撰写——初稿；项目管理。I.P.A.：方法学；资源；经费获取；监督；撰写——审阅与编辑。F.K.：经费获取；监督；撰写——审阅与编辑。A.P.H.：经费获取；监督；撰写——审阅与编辑。K.A.S.：经费获取；监督；撰写——审阅与编辑。K.K.：资源；撰写——审阅与编辑。R.S.：经费获取；监督；撰写——审阅与编辑。D.E.I.：经费获取；监督；撰写——审阅与编辑。所有作者均已阅读并同意发表版本的稿件。

开放研究

dewi-kadita 库的源代码托管在 GitHub 上，网址为 https://github.com/sandyherho/dewi-kadita，并采用 MIT 许可证授权；该库也可通过 PyPI 安装，网址为 https://pypi.org/project/dewi-kadita/。补充材料（包括用于数据分析和图表生成的 Python 脚本）可在 https: //github.com/sandyherho/suppl-dewi-kadita 获取。所有模拟输出——包括 NetCDF4 轨迹文件、序参量时间序列、熵度量数据、静态图表、动画可视化、计算日志和统计报告——均永久存档于开放科学框架，网址为 https://doi.org/10.17605/ OSF.IO/GP2XU，并采用 MIT 许可证发布。

参考文献

[1] T. Vicsek 和 A. Zafeiris，《集体运动》，《物理报告》**517**，71（2012）。https://doi.org/10.1016/j.physrep.2012.03.004

[2] M. C. Marchetti 等人，《软活性物质的流体动力学》，现代物理评论 85，1143（2013）。https: //doi.org/10.1103/RevModPhys.85.1143[3] A. Cavagna 和 I. Giardina，《作为凝聚态物质的鸟群》，凝聚态物理年度评论 5，183（2014）。https://doi.org/10.1146/annurev-conmatphys-031113-133834[4] S. Ramaswamy，《活性物质的力学与统计学》，凝聚态物理年度评论 1，323（2010）。https://doi.org/10.1146/annurev-conmatphys-070909-104101[5] J. K. Parrish 和 L. Edelstein-Keshet，《动物聚集中的复杂性、模式与进化权衡》，科学 284，99（1999）。https://doi.org/10.1126/science.284.5411.99[6] B. L. Partridge，《鱼群的结构与功能》，《科学美国人》246，114（1982）。https://doi. org/10.1038/scientificamerican0682-114[7] Y. Katz 等人，《推断群游鱼类相互作用的结构与动力学》，美国国家科学院院刊 108，18720（2011）。https://doi.org/10.1073/pnas.1107583108[8] J. E. Herbert-Read 等人，《推断群游鱼类的相互作用规则》，美国国家科学院院刊 108，18726（2011）。https://doi.org/10.1073/pnas.1109355108[9] A. Huth 和 C. Wissel，《鱼群运动的模拟》，理论生物学杂志 156，365（1992）。https://doi.org/10.1016/S0022-5193(05)80681-2[10] I. Aoki，《鱼类群游机制的模拟研究》，《日本水产学会会报》48，1081（1982）。https://doi.org/10.2331/suisan.48.1081[11] T. Vicsek 等人，《自驱动粒子系统中的新型相变》，《物理评论快报》75，1226（1995）。https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.75.1226[12] J. Toner 和 Y. Tu，《鸟群、兽群与鱼群：群集运动的定量理论》，《物理评论 E》58，4828（1998）。https://doi.org/10.1103/PhysRevE.58.4828[13] H. Chat´e 等人，《无内聚力相互作用的自推进粒子的集体运动》，《物理评论 E》77，046113（2008）。https://doi.org/10.1103/PhysRevE.77.046113[14] I. D. Couzin 等人，《动物群体中的集体记忆与空间排序》，理论生物学杂志 218，1（2002）。https://doi.org/10.1006/jtbi.2002.3065[15] I. D. Couzin 等人，《移动中的动物群体中的有效领导与决策》，《自然》433，513（2005）。https://doi.org/10.1038/nature03236[16] D. J. T. Sumpter，《集体动物行为》（普林斯顿大学出版社，新泽西州普林斯顿，2010）。https: //doi.org/10.1515/9781400837106[17] M. Brambilla 等人，《群体机器人学：从群体工程视角出发的综述》，《群体智能》7，1（2013）。https://doi.org/10.1007/s11721-012-0075-2[18] P. Romanczuk 等人，《活性布朗粒子：从个体到集体随机动力学》，《欧洲物理学杂志专题》202，1（2012）。https://doi.org/10.1140/epjst/e2012-01529-y[19] A. P. Thompson 等人，《LAMMPS——用于原子、介观及连续介质尺度基于粒子的材料建模的灵活模拟工具》，《计算物理通讯》271，108171（2022）。https://doi.org/10. 1016/j.cpc.2021.108171[20] M. J. Abraham 等人，《GROMACS：通过从笔记本电脑到超级计算机的多级并行实现高性能分子模拟》，《SoftwareX》1–2，19（2015）。https://doi.org/10.1016/j.softx.2015. 06.001[21] J. Delcourt 等人，《鱼类行为的视频多目标跟踪：综述与未来展望》，《鱼类与渔业》14，186（2013）。https://doi.org/10.1111/j.1467-2979.2012.00462.x[22] K. Tunstrøm 等人，《鱼群中的集体状态、多稳态与过渡行为》，《PLoS计算生物学》9，e1002915（2013）。https://doi.org/10.1371/journal.pcbi.1002915[23] C. E. Shannon，《通信的数学理论》，贝尔系统技术杂志 27，379（1948）。https: //doi.org/10.1002/j.1538-7305.1948.tb01338.x[24] E. Crosato 等人，《鱼群中的信息性与误导性相互作用》，《群体智能》12，283（2018）。https://doi.org/10.1007/s11721-018-0157-x[25] A. Attanasi 等人，《椋鸟群中的信息传递与行为惯性》，《自然物理》10，691（2014）。https://doi.org/10.1038/nphys3035[26] A. Cavagna 等人，《自然群体中的动态标度》，《自然物理》13，914（2017）。https://doi.org/10. 1038/nphys4153[27] C. K. Hemelrijk 等人，《鱼类在鱼群中游泳的效率提升》，《鱼类与渔业》16，511（2015）。https://doi.org/10.1111/faf.12072[28] N. O. Handegard 等人，《群游猎物的协调性群体捕猎动力学与集体信息传递》，《当代生物学》22，1213（2012）。https://doi.org/10.1016/j.cub.2012.04.050[29] S. K. Lam、A. Pitrou 和 S. Seibert，《Numba：基于 LLVM 的 Python 即时编译器》，载于《第二届高性能计算中 LLVM 编译器基础设施研讨会论文集》（美国计算机协会，纽约，2015），第 1–6 页。https://doi.org/10.1145/2833157.2833162[30] R. Rew 和 G. Davis，《NetCDF：科学数据访问接口》，IEEE 计算机图形与应用 10，76（1990）。https://doi.org/10.1109/38.56302[31] M. D. Wilkinson 等人，《科学数据管理与托管的 FAIR 指导原则》，《科学数据》3，160018（2016）。https://doi.org/10.1038/sdata.2016.18[32] S. H. S. Herho 等人，《跨多个计算平台重新审视双摆动力学》，

CLEI电子期刊**28**, 10 (2025). https://doi.org/10.19153/cleiej.28.1.10[33] S. H. S. Herho, S. N. Kaban, and C. Nugraha, “OptionMC：用于欧式期权蒙特卡罗定价的 Python 软件包,” Int. J. Data Sci. **6**, 70 (2025). https://doi.org/10.18517/ijods.6.2.70-84.2025[34] J. J. Videler, 鱼类游泳 (Springer, Dordrecht, 1993). https://doi.org/10.1007/978-94-011-1580-3[35] J. Krause and G. D. Ruxton, 群体生活 (Oxford University Press, Oxford, 2002). https://doi.org/ 10.1093/oso/9780198508175.001.0001[36]P. Domenici, “捕食者—猎物相遇中的运动性能缩放：从鱼类到虎鲸,” Comp. Biochem. Physiol. A Mol. Integr. Physiol. **131**, 169 (2001). https://doi.org/10.1016/ S1095-6433(01)00465-2[37] C. R. Harris 等., “使用 NumPy 进行数组编程,” Nature **585**, 357 (2020). https://doi.org/10. 1038/s41586-020-2649-2[38] P. Virtanen 等., “SciPy 1.0：用于 Python 科学计算的基础算法,” Nat. Methods**17**, 261 (2020). https://doi.org/10.1038/s41592-019-0686-2[39] J. D. Hunter, “Matplotlib：二维图形环境,” Comput. Sci. Eng. **9**, 90 (2007). https://doi.org/10.1109/MCSE.2007.55[40] W. McKinney, “用于 Python 统计计算的数据结构,” 收录于 第九届 *Python* 科学会议论文集 (2010), pp. 56–61. https://doi.org/10.25080/Majora-92bf1922-00a[41] S. H. S. Herho 等., “kh2d-solver：用于理想化二维不可压缩 Kelvin-Helmholtz 不稳定性的 Python 库,” Appl. Comput. Mech. **19**, 125 (2025). https://doi.org/10.24132/acm.2025.1040[42] D. S. Calovi等., “群聚、鱼群行为与旋转集群：数据驱动鱼群模型的相图,” New J. Phys. **16**, 015026 (2014). https://doi.org/10.1088/1367-2630/16/1/015026 [43] L. Barberis and F. Peruani, “最简认知集群模型中的大尺度模式：偶然领导者、向列模式与聚集体,” Phys. Rev. Lett. **117**, 248001 (2016). https://doi.org/10. 1103/PhysRevLett.117.248001[44] F. Ginelli 等., “羊群中相互冲突的需求引发间歇性集体动力学,” 美国国家科学院院刊 **112**, 12729 (2015). https://doi.org/10.1073/pnas.1503749112[45] U. Lopez 等., “从行为分析到鱼群集体运动模型,” Interface Focus**2**, 693 (2012). https://doi.org/10.1098/rsfs.2012.0033[46] V. Stodden 等., “提升计算方法的可重复性,” 科学 **354**, 1240 (2016). https: //doi.org/10.1126/science.aah6168[47] J. W. Jolles 等., “稳定的个体差异推动鱼群行为与群体功能,” Curr. Biol.**27**, 2862 (2017). https://doi.org/10.1016/j.cub.2017.08.004