Analytic and numerical methods for active matter research

Jae Dong Noh

January 6, 2025

Preface

이 노트는 2025년 1월 6-9일 동안 Postech 캠퍼스의 APCTP에서 열린 제22차 통계물리 겨울학교 (22th KIAS-APCTP Winter School on Statistical Physics)의 5시간 짜리 강의에 쓰인 교재입니다.

능동적으로 움직이는 물체로 구성된 active matter systems에 대한 통계물리 분야의 연구는 Vicsek, Czirók, Ben-Jacob, Cohen, Shochet이 1995년에 발표한 Physical Review Letters 논문 [VCJ+95]에서 비롯되었습니다. 이 논문은 물체의 능동적인 운동성 (motility)이 다체계 집단현상의 보편성을 결정하는 핵심적인 역학을 담당한다는 교훈을 주고 있습니다. 단순하면서도 흥미로운 결과를 보여주는 toy model은 끊임없이 발표되고 잊혀집니다. 그 중의 하나가 아닐까 했던 Vicsek 등의 모형은 놀랍게도 발표된지 30년이 지난 오늘까지도 통계물리 연구자에게 새로운 연구에 대한 영감을 불러일으키고 있습니다. 통계물리 연구자들은 이론 연구를 통해서 혹은 생물 실험분야와의 협동 연구를 통해 능동적인 운동성이 만드는 새로운 동역학적 물질상태, 비평형 상전이, topological defects, pattern formations 등을 활발히 연구하고 있습니다.

이 강의는 다양한 대칭성을 갖는 active matters 가운데 polar order 대칭성을 갖는 계의 비평형 상전이 만을 다루고 있습니다. 이 주제를 입자 기반 연구에 기본이 되는 Vicsek 등의 모형과 active Brownian particles 모형을 통해 다룰 것입니다. GPU를 활용한 molecular dynamics 기법은 입자 기반 모형계의 상전이를 다루는 강력한 수치 연구 방법입니다. 한편 Boltzmann 방정식과 Smoluchowski 방정식은 입자 기반 모형계를 여러가지 이론적인 연구 방법을 적용할 수 있는 continuum 방정식으로 기술할 수 있게 해줍니다. 강의를 통해서 자세히 소개할 두 방법론이 active matters 뿐만 아니라 다른 연구 분야에서도 활용할 수 있길 기대합니다.

실습을 원하는 분들을 위해 `CUDA`로 작성된 molecular dynamic simulation 프로그램과 `python3`로 작성된 anima-

tion 프로그램을 공개하겠습니다. `CUDA` 프로그램을 사용하기 위해서는 `C` 혹은 `C++`언어에 대한 지식이 필요하며 Nvidia의 gpu가 필요합니다 [참고: https://sites.google.com/view/jdnoh-tcp/cuda-gpu]. Animation 프로그램을 사용하기 위해서는 `python3`와 `C/C++` compiler가 필요합니다. 네트워크를 통해 이들 전산 자원에 접근할 수 있는 환경을 미리 마련해 놓길 바랍니다.

이 강의 노트는 여러 review papers를 참조하여 작성했음을 밝힙니다 [MJR+13, PBGC14, Cha20].

Contents

1 서론 **1**

1.1 Active matter란? . . . 1

1.2 집단거동에 대한 통계물리 연구 흐름 . . . 2

2 Vicsek model **4**

2.1 Vicsek model . . . 4

2.2 Mermin-Wagner theorem . . . 6

2.3 Toner-Tu 이론 . . . 9

2.4 연속 상전이인가 불연속 상전이인가? . . . 10

3 수치적 연구 방법 **13**

3.1 Self-propelled particle 모형 . . . 13

3.1.1 Vicsek-type 모형 . . . 13

3.1.2 Active Brownian Particle (ABP) 모형 . . . 14

3.2 Molecular dynamics 알고리듬 . . . 15

3.2.1 Cell linked-list . . . 16

3.2.2 상호작용 짝 찾기 . . . 16

3.3 GPU를 활용한 병렬 계산 . . . 18
3.3.1 GPU의 구조와 작동원리 . . . 18
3.3.2 CUDA kernel . . . 19
3.4 CUDA를 활용한 분자동역학 병렬계산 pseudo code . . . 20
3.5 Python으로 애니메이션 . . . 22
3.6 참고 자료 . . . 22

4 해석적 연구 방법 24
4.1 Boltzmann 방정식 . . . 24
4.1.1 Time evolution . . . 25
4.1.2 Angular Fourier mode expansion . . . 27
4.1.3 균일한 무질서 상태 . . . 28
4.1.4 균일한 flocking ordered state . . . 29
4.1.5 Hydrodynamic equation . . . 31
4.2 Smoluchowski 방정식 . . . 33

5 전망 34
5.1 Beyond mean field theory . . . 34
5.2 Discrete symmetry flocking . . . 35
5.3 Chirality . . . 36
5.4 Multi-species system . . . 38

Bibliography 41

1

서론

1.1 Active matter란?

고전적인 다체계를 구성하는 입자의 동역학을 생각해보자. 고립된 계에서 입자의 운동은 결정론적인 운동방정식을 따른다. 계가 열적인 혹은 비열적인 외부 환경과 상호작용하고 있다면 입자의 운동은 확률적인 속성을 가진 Langevin 방정식으로 기술된다. 예를 들어 온도가 T이고 damping coefficient가 $1/\mu$인 유체에서 Brown 입자는 외력 말고도 매질을 구성하는 입자들과의 무작위적인 충돌의 영향을 받는다. Overdamped limit에서 Brown 입자 i의 위치 $\boldsymbol{r}_i$는 다음의 stochastic Langevin 방정식을 따른다:

$$\dot{\boldsymbol{r}}_i = \mu \boldsymbol{F}_i + \sqrt{2D}\boldsymbol{\eta}_i(t) \quad \left[\text{diffusion constant } D = \mu k_B T, \langle \eta_i(t) \rangle = 0, \langle \eta_i(t)\eta_j(t') \rangle = \delta_{ij}\delta(t-t')\right]. \tag{1.1}$$

만약 Brown 입자가 제3의 외부 환경으로부터 에너지를 흡수하여 이를 역학적 에너지로 전환할 수 있다면, 입자는 stochastic noise $\boldsymbol{\eta}$에 의한 피동적인 운동에 더해 자발적이고 능동적인 운동을 할 수 있게 된다. 능동운동의 속력을 v_0, 방향을 단위 벡터 $\boldsymbol{n}$로 나타내면 입자의 운동방정식은

$$\dot{\boldsymbol{r}}_i = v_0 \boldsymbol{n}(t) + \mu \boldsymbol{F}_i + \sqrt{2D}\boldsymbol{\eta}_i(t) \tag{1.2}$$

의 꼴을 갖게 되며, v_0와 $\boldsymbol{n}$ 또한 자체의 동역학을 갖게 된다. 자발적인 운동성 (motility)을 갖는 입자로 구성된 물질을 능동물질 (active matter)이라 부른다.

능동물질이 아닌 경우에도 입자들은 운동성을 가질 수 있다. 앞서 소개한 Brown 입자가 그 대표적인 예이며, 비평형 통계역학에서 흔히 다루는 driven lattice gas systems 역시 움직이는 입자로 이루어져 있다. Motility와 mobility를 완벽히 가를 수 있는 구분을 제시하기는 어렵지만, 대체적으로 능동물질은 persistence 속성이 있는 입자로 구성된 계를 지칭한다.

능동물질의 예는 자연계, 특히 생물학계에서 쉽게 찾을 수 있다. 세포 내의 active cytoskeleton부터 날아다니는 새에 이르는 생물학적인 능동물질계는 생화학 에너지를 motility의 원료로 삼는다. 상이한 화학적 조성을 갖는 양 면으로 이루어진 Janus particle, 자기장으로 구동되는 Quincke roller, 전기 에너지로 구동되는 로봇 등은 인공적으로 합성된 능동물질의 예로서 실험 연구에 활용되고 있다.

1.2 집단거동에 대한 통계물리 연구 흐름

거시계의 집단거동에 대한 통계물리 연구의 흐름을 단순화해서 기술해보자. 전통적인 통계물리학의 무대는 격자 (lattice)였다. 격자점에 고정되어 있거나 격자점 사이를 이동하는 입자 혹은 스핀들의 상전이와 동역학적 축척현상에 대한 연구가 활발하게 진행되었고, 그 결과로 공간의 차원, 대칭성, 보존법칙 등이 거시계 집단거동의 보편성을 결정하는 중요한 요소임을 알게 되었다.

복잡 연결망 특히 척도 없는 연결망의 발견은 통계물리학의 무대를 더욱 확장시켰다. 복잡 연결망의 노드 위에서 고정된 혹은 링크를 통해 운동하는 입자와 스핀들을 사용해 다양한 연구가 진행되었고, 이러한 시도는 통계물리학의 범주를 공학/인문/사회분야의 복잡계에까지 넓혔다.

능동물질계는 입자 혹은 스핀의 내부 상태와 더불어 위치까지 동역학적인 변수가 된다는 점에서 통계물리학 연구의 새로운 패러다임으로 자리잡고 있다. 능동물질계에서는 입자의 공간적인 자유도와 스핀 등의 내부 자유도가 강하게 결합되어있다. 이전에 고려되지 않았던 새로운 종류의 결합은 통계물리학 연구자에게 많은 연구 과제를 던져주고 있다.

2

Vicsek model

2.1 Vicsek model

Vicsek 등은 새 무리의 떼지음 현상을 설명하기위해 [1] “self-driven particles"로 이루어진 모형계를 도입하고 Monte Carlo simulation 연구를 수행하여 얻은 새로운 종류의 상전이를 보고하였다 [VCJ+95]. 해당 논문의 저자는 총 5명이지만, 모든 문헌에서 그렇듯이 논문에서 제시한 모형을 Vicsek 모형이라 부르겠다. Vicsek 모형의 특징을 정리해보자.

- L^2 크기의 2차원 평면 위에 $N = \rho N^2$ 개의 점입자로 구성
- 입자 i의 상태는 위치 $\boldsymbol{r}_i(t)$와 속도 $\boldsymbol{v}_i(t) = v_0(\cos\theta_i(t), \sin\theta_i(t))$로 정해지고, 속력은 $|\boldsymbol{v}_i| = v_0$로 일정하다.

[1] 떼지어 다니는 동물에 대한 artificial life 모형은 1986년에 전산 과학자인 Craig Reynolds가 도입한 바 있다. Boid = B(irds) + (andr)oid로 명명한 모형 및 관련자료는 https://www.red3d.com/cwr/boids에서 확인할 수 있다.

- $\Delta t = 1$의 시간 간격 동안 모든 입자의 위치와 속도가 동시에 업데이트 된다.

$$\boldsymbol{r}_i(t+1) = \boldsymbol{r}_i(t) + \boldsymbol{v}_i(t), \quad \theta_i(t+1) = \mathrm{Arg}\left[\sum_{j\in\mathcal{N}_i} e^{i\theta_j(t)}\right] + \xi_i(t) \tag{2.1}$$

  $\mathcal{N}_i$: 입자 i와의 거리가 $r_0 = 1$보다 작은 입자들의 집합

  $\xi_i(t)$: uncorrelated random noise uniformly distributed in the interval $[-\eta : \eta/2]$

- 각 입자는 자신의 속도 방향을 주위 입자의 평균 운동 방향과 정렬하고자 한다.

- 속도정렬 상호작용은 유한한 거리 $r_0 = 1$ 내에서만 작용하는 **short range interaction**이다.

- 속도정렬 상호작용은 속도 방향 각도 θ를 임의의 각도 ϕ만큼 더하는 ($\theta \to \theta + \phi$) **연속적인 회전변환에 대해 대칭적**이다.

- 입자의 motility를 제외하면 입자의 속도 방향 각도는 강자성 XY 모형과 같은 대칭성을 갖는다. 이러한 이유로 Vicsek 모형의 입자를 flying XY spin, Vicsek 모형을 active XY 모형이라고 부르기도 한다.

강자성 속성을 갖는 alignment 상호작용은 모든 입자가 같은 방향으로 움직이는 떼지음 (flocking) 집단거동을 일으킬 수 있다. 전체 입자의 평균 속도는 떼지음 현상의 order parameter 역할을 한다.

$$v_a = \frac{1}{Nv_0}\left\langle \left| \sum_{i=1}^{N} \boldsymbol{v}_i \right| \right\rangle_s \tag{2.2}$$

1995년의 논문에서 저자들은 입자 밀도 ρ와 aligning interaction을 방해하는 잡음의 크기 η를 바꿔가며 수치계산을 수행하여 다음과 같은 결론을 얻었다.

- 밀도가 낮고 잡음의 크기가 큰 영역에서 계는 $v_a = 0$인 disordered (gas) phase에 있다.
- 밀도가 높고 잡음의 크기가 작은 영역에서 계는 대칭성이 자발적으로 깨진 $v_a \neq 0$인 ordered (flocking) phase에 있다.
- gas phase와 flocking phase 사이에는 order-disorder 연속 상전이가 일어난다.

$$v_a \sim |\eta_c - \eta|^{0.45\pm0.07}, \quad v_a \sim |\rho - \rho_c|^{0.35\pm0.06} \tag{2.3}$$

이 결과는 커다란 논란을 촉발하며 active matters가 통계물리 분야의 중요 연구 주제로 부상하는데 결정적인 계기가 되었다.

2.2 Mermin-Wagner theorem

Mermin-Wagner (혹은 Hohenberg-Mermin-Wagner) 정리는 근거리 상호작용하고 연속 대칭성이 있는 열평형계에 대해 다음과 같이 주장한다: **"Continuous symmetries cannot be spontaneously broken at finite temperature in systems with sufficiently short-range interactions in dimension $d \leqslant 2$"** [Hoh67, MW66].

d차원 격자에서 정의된 XY 모형을 통해 정리의 의미를 이해해보자. XY 모형의 해밀토니안은

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j) \quad [\text{ferromagnetic coupling constant } J > 0] \tag{2.4}$$

이다. 이 해밀토니안은 nearest neighbor interaction만을 포함하고 있고 스핀 각도를 임의의 각도 ϕ로 회전 이동하는 연속 변환에 대해 불변인 $U(1)$ 대칭성을 갖고있다.

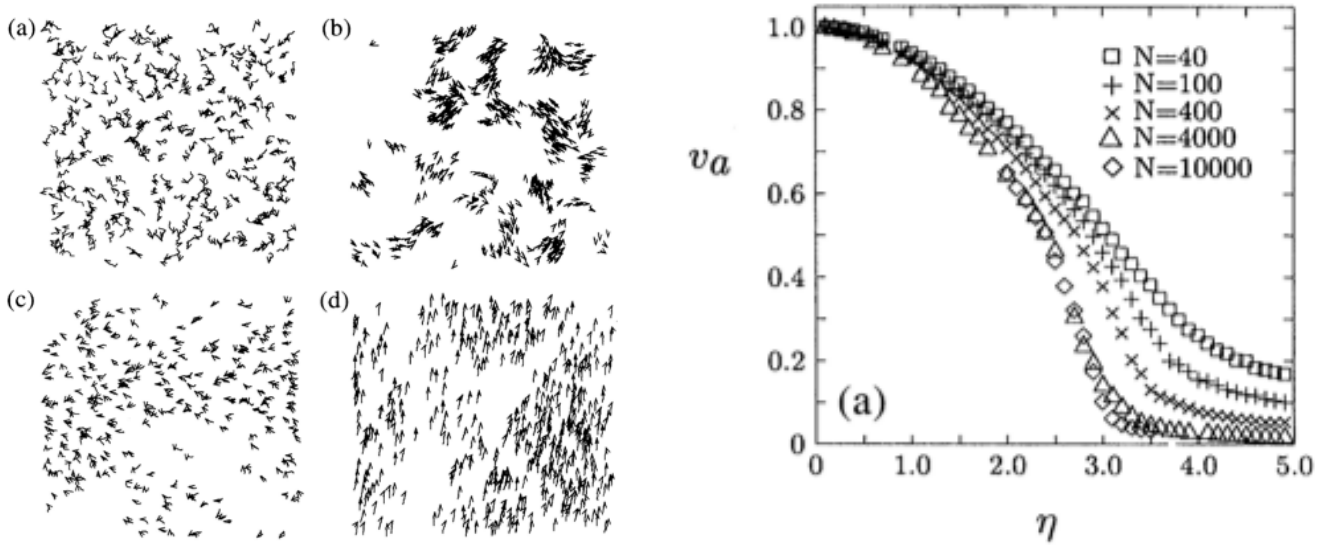


Figure 2.1: Vicsek 모형의 snapshot과 order parameter scaling. (참고문헌 [VCJ+95]에서 발췌함.)

XY 모형의 ground state는 모든 스핀이 일렬로 정렬된 ($\theta_i^g = \theta_0$) 강자성 상태, 즉 $U(1)$ 대칭성이 자발적으로 깨진 상태이다. 강자성 상태가 열적 요동에 살아남는지를 살펴보기 위해 거시적인 거리 L에 걸쳐서 스핀 각도가 2π만큼 어긋나는 spin wave excitation $\theta_i = \theta_i^g + 2\pi x_i/L$ 을 고려해보자. L이 큰 경우 spin wave excitation의 에너지는

$$\Delta E \simeq \frac{J}{2}\sum_{\langle i,j\rangle}(\theta_j - \theta_i)^2 \simeq Ja^2L^{d-2} \tag{2.5}$$

이다. $d \leqslant 2$일 때 이 값은 0으로 수렴하거나 유한한 값으로 수렴한다. 따라서 온도가 0이 아니면 열적요동으로 생성 확산된 spin wave excitations이 강자성 질서를 파괴한다. 경계에 있는 $d = 2$ 차원은 특별한 경우에 해당되어, long range ferromagnetic order는 파괴되지만 스핀-스핀 상관관계 함수가 power law를 따르는 quasi long range ordered 상태가 가능하다 [JKKN77].

앞서 살펴본 바와 같이 Vicsek 모형은 XY 모형과 같은 대칭성을 갖는 active XY 모형에 해당한다. Vicsek 모형에서 발견된 flocking phase는 Mermin-Wagner 정리에 의해 열평형계에서는 존재할 수 없은 새로운 물질 상태인 것이다. Mermin-Wagner 정리의 제한을 깨고 연속적인 회전 대칭성이 자발적으로 붕괴되는 근원은 무엇일까?

Tasaki는 Mermin-Wagner 정리를 flocking 모형으로 확장하려는 시도를 했다 [Tas20]. 위치 $\boldsymbol{r}_i$, 속도 $\boldsymbol{v}_i$의 속성을 갖는 N개의 입자가 면적이 L^2인 2차원 공간에 있다. 계의 해밀토니안은

$$H = \left[\sum_{j=1}^{N}\epsilon(|\boldsymbol{v}_j|) + \sum_{j\neq k}u(\boldsymbol{r}_j,\boldsymbol{r}_k)\right] - \sum_{j\neq k}J(\boldsymbol{r}_j,\boldsymbol{r}_k)\frac{\boldsymbol{v}_j}{|\boldsymbol{v_j}|}\cdot\frac{\boldsymbol{v}_k}{|\boldsymbol{v_k}|} \tag{2.6}$$

이고 (u: hard core repulsion, $J > 0$: short-range alignment interaction kernel), 속도 방향을 임의의 각도로 회전하는 연속 변환에 대해 불변인 대칭성을 갖는다. Tasaki는 McBryan-Spencer bound라는 수학적 테크닉을 사용하여

온도가 $1/\beta$인 열평형 상태에서 거리가 l만큼 떨어진 두 입자의 속도-속도 상관관계 함수가 만족하는 부등식

$$C_l(\beta) := \frac{1}{Z(\beta)} \int d\boldsymbol{R} d\boldsymbol{V} \left(\frac{\boldsymbol{v}_j}{|\boldsymbol{v}_j|} \cdot \frac{\boldsymbol{v}_k}{|\boldsymbol{v}_k|} \right) e^{-\beta H} \leqslant \left(\frac{l}{a_0} \right)^{-\eta} \tag{2.7}$$

을 얻었다 (η는 양의 상수). 이 결과는 입자의 운동성이 연속 대칭성을 필연적으로 붕괴시키지는 않다는 것을 의미한다. Tasaki의 결과는 flocking order를 갖는 Vicsek 모형의 결과와 양립할 수 있을까?

2.3 Toner-Tu 이론

Vicsek 모형 논문이 발표된 해에 Toner와 Tu는 현상론적인 장방정식을 제시하고 renormalization group (RG) 분석을 수행하여 2차원에서 long range flocking order가 존재할 수 있음을 주장하였다 [TT95, TT98]. 입자의 밀도 $\rho(\boldsymbol{r}, t)$와 속도 $\boldsymbol{v}(\boldsymbol{r}, t)$ field에 대한 Toner-Tu 방정식은 다음과 같다.

$$\partial_t \rho + \boldsymbol{\nabla} \cdot (\rho \boldsymbol{v}) = 0 \tag{2.8}$$

$$\begin{aligned} &\partial_t \boldsymbol{v} + \lambda_1 (\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{\nabla}) \boldsymbol{v} + \lambda_2 (\boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{v}) \boldsymbol{v} + \lambda_3 \boldsymbol{\nabla} |\boldsymbol{v}|^2 = \\ &\quad \left\{ \alpha - \beta |\boldsymbol{v}|^2 \right\} \boldsymbol{v} - \boldsymbol{\nabla} P + D_0 \boldsymbol{\nabla}^2 \boldsymbol{v} + D_1 \boldsymbol{\nabla} (\boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{v}) + D_2 (\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{\nabla})^2 \boldsymbol{v} + \boldsymbol{f}. \end{aligned} \tag{2.9}$$

$\alpha > 0$일 때 이 방정식은 homogeneous ordered state에 해당하는 해 $\rho(\boldsymbol{r}) = \rho_0$, $\boldsymbol{v} = v_0 \boldsymbol{e}_x$를 갖는다. Toner-Tu는 일련의 근사를 통해 homogeneous ordered state로부터의 요동 $\rho = \rho_0 + \delta\rho$, $\boldsymbol{v} = (v_0 + \delta v_\parallel) \boldsymbol{e}_x + \delta \boldsymbol{v}_\perp$의 상관관계 함수가 anisotropic power law scaling을 따름을 보였다.

$$C(\boldsymbol{R}) := \langle \boldsymbol{v}_\perp (\boldsymbol{r} + \boldsymbol{R}, t) \cdot \boldsymbol{v}_\perp (\boldsymbol{r}, t) \rangle = R_\perp^{2\chi} F_v \left(\frac{R_\parallel}{R_\perp^\zeta} \right) \tag{2.10}$$

또한 RG 계산을 통해 2차원에서 roughness exponent χ와 anisotropy exponent ζ의 정확한 값을 구했다.

$$\chi = -\frac{1}{5}, \quad \zeta = \frac{3}{5} \tag{2.11}$$

Roughness exponent가 음의 값을 갖기에 속도의 요동은 거리가 멀어질수록 줄어든다. 즉, 요동이 flocking ordered state를 파괴할 수 없음을 의미한다. Toner-Tu의 결과는 Mermin-Wagner 정리를 따르는 열평형계에서와는 달리 active matter에서 연속 대칭성이 자발적으로 붕괴될 수 있음을 해석적으로 보인 최초의 업적으로 간주되고 있다.

그러나, Toner-Tu의 이론은 지나치게 현상론적이고 구체적인 모형계화의 관계가 불분명하다는 단점을 갖고 있다. 더군다나 Toner는 2012년에 출판한 논문에서 Toner-Tu 모형에서 고려하지 않은 새로운 비선형항을 추가로 도입하면 Toner-Tu RG 계산의 엄밀성이 사라짐을 보였다 [Ton12]. 따라서 Toner-Tu의 이론은 Mermin-Wagner 정리와 같은 엄밀한 이론으로 받아들이기보다는 근사적인 이론으로 받아들이는 것이 타당하다.

2차원 Vicsek 모형의 ordered phase 영역에서 수치적으로 계산한 상관관계함수는 식 (2.10)과 같은 anisotropic power law scaling을 따른다 [MGC19]. 단, 임계지수의 값은 $\chi = -0.31(2), \zeta = 0.95(2)$이며 Toner-Tu의 값과 약간의 차이를 보인다.

2.4 연속 상전이인가 불연속 상전이인가?

자발적 연속 대칭성 붕괴와 더불어 flocking 상전이의 속성 또한 논란을 불러 일으켰다. Vicsek 그룹은 1995년의 논문 이래로 flocking 상전이가 연속 상전이라고 주장하였다 (식 (2.3) 참조). 그러나, 큰 크기에서 긴 시간동안 수행된 수치계산은 flocking 상전이가 불연속 상전이임을 보여주었다. 흥미롭게도 (ρ_0, η) 평면에서의 상평형 그림은 액체-기체 상전이를 겪는 유체의 상평형 그림과 유사하다 [Cha20].

- homogeneous disordered (gas) phase ($v_a = 0$): 밀도와 속도의 상관관계가 지수함수적으로 감소한다.
- polar ordered/homogeneous ordered/flocking (liquid) phase ($v_a > 0$): 입자들이 집단적으로 한 방향으로 운동한다. 입자들은 계에 균일하게 분포하지만 입자 밀도는 강하게 요동친다(giant number fluctuation). 즉, 면적이 ξ^2인 영역에 포함된 입자 수를 n_ξ라 할 때, 입자 수의 편차가 power law scaling $\langle (\delta n_\xi)^2 \rangle \sim \langle n_\xi \rangle^\alpha$을 따르며 2차원에서 임계지수는 $\alpha = 8/5$ (Toner-Tu), 1.67 (simulation)이다 [MGC19].
- band (coexistence) phase: 기체 상태와 액체 상태로 상분리(microphase separation)가 일어난다. 상분리된 액체는 횡으로 펼쳐진 띠(bands) 모양으로 기체상태를 배경으로 운동한다. 액체 띠의 폭과 간격은 유한하다.

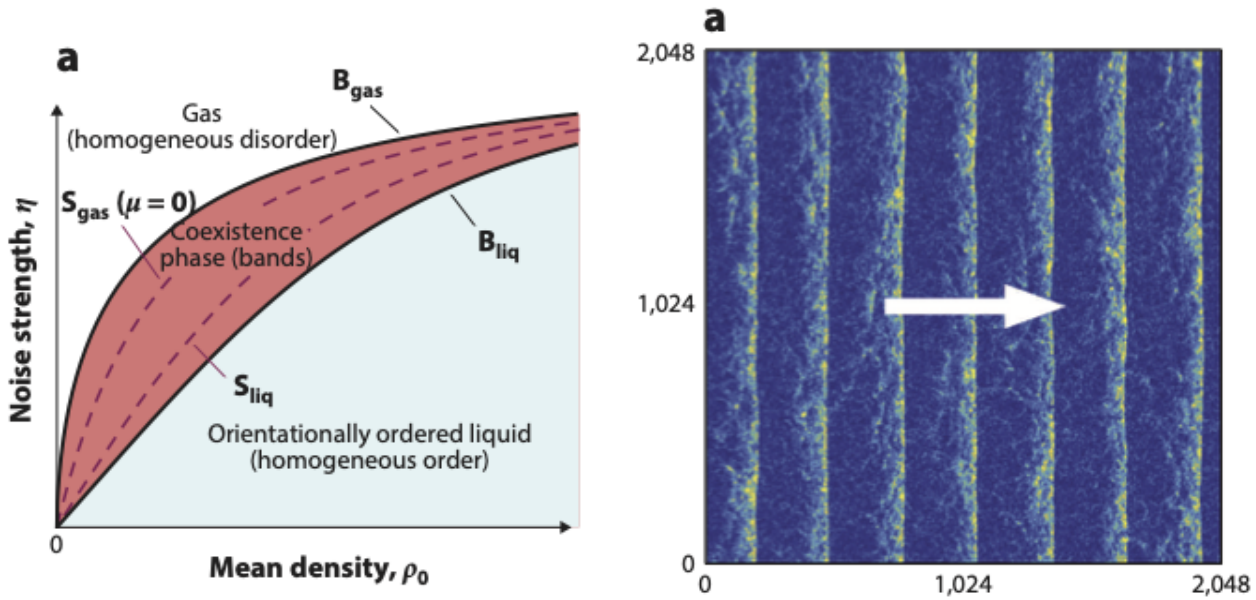


Figure 2.2: Vicsek 모형의 상평형 그림과 공존상에서의 띠 구조 ([Cha20]에서 발췌)

3

수치적 연구 방법

3.1 Self-propelled particle 모형

입자 기반의 active matter 모형 가운데 가장 대표적인 것이 self-propelled particles (SPP) 모형이다. 각 입자의 상태는 위치벡터와 속도벡터의 쌍 $(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{v})$으로 주어지고, 이들은 모형계의 특성을 반영하여 거리와 속도에 각각 혹은 함께 의존하는 상호작용을 주고 받으며 시간에 따라 변화한다. 입자의 속력은 흔히 상수 v_0로 취급하고, 속도의 방향은 polar angle $-\pi < \theta \leqslant \pi$로 표시한다. 즉, $\boldsymbol{v} = v_0 \boldsymbol{n}(\theta)$이고 $\boldsymbol{n}(\theta) = (\cos\theta, \sin\theta)$는 속도방향의 단위벡터이다.

3.1.1 Vicsek-type 모형

- discrete time $t = n \times \Delta t$, continuum space $\boldsymbol{r} \in \mathbb{R}^2$

- 단거리 속도정렬 상호작용을 포함한 운동 방정식

$$\boldsymbol{r}_i(t+1) = \boldsymbol{r}_i(t) + v_0\boldsymbol{n}(\theta_i(t)) \tag{3.1}$$

$$\theta_i(t+1) = \mathrm{Arg}\left[\sum_{j\in\mathcal{N}_i(r_0)} e^{i\theta_j(t)}\right] + \xi_i(t) \tag{3.2}$$

$\mathcal{N}_i(r_0)$는 입자 i로부터의 거리가 r_0 이하인 입자들 집합을 나타내고, $\xi_i(t)$는 구간 $[-\frac{\eta}{2} : \frac{\eta}{2}]$ 사이에 균일하게 분포하고 상관관계가 없는 잡음을 나타낸다.

3.1.2 Active Brownian Particle (ABP) 모형

- continuous time, continuum space $\boldsymbol{r} \in \mathbb{R}^2$

- 단거리 상호작용 포텐셜 W과 속도정렬 상호작용을 포함한 운동 방정식

$$\begin{aligned}\frac{d\boldsymbol{r}_i}{dt} &= v_0\boldsymbol{n}(\theta_i) - \boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{r}_i}W + \sqrt{2D_t}\boldsymbol{\zeta}_i(t)\\ \frac{d\theta_i}{dt} &= -\frac{J}{|\mathcal{N}_i(r_0)|}\sum_{j\in\mathcal{N}_i(r_0)}\sin(\theta_i-\theta_j) + \sqrt{2D_r}\xi_i(t)\end{aligned} \tag{3.3}$$

- 입자 사이에 단거리 척력이 작용하고 속도정렬 상호작용이 없을 때 ($J = 0$), ABP 모형은 motility-induced phase separation (MIPS) 현상을 일으킨다 [FM12].

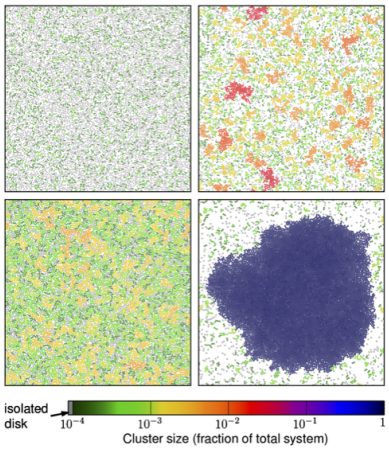


Figure 3.1: ABP에서 일어나는 MIPS ([FM12]에서 발췌).

3.2 Molecular dynamics 알고리듬

입자기반 모형에 대한 분자동역학 알고리듬을 알아보자. SPP의 운동방정식을 수치적분할 때 가장 어려운 일은 단거리 상호작용의 크기를 계산하는 것이다. 만약 각 입자의 상호작용 짝 $\mathcal{N}_i(r_0)$을 구하기 위해 모든 입자의 위치를 점검한다면 단위 시간간격 Δt 동안에 수행해야하는 계산양은 전체 입자 갯수의 제곱 N^2에 비례할 것이다. 이 계산을 효율적으로 수행하는 것이 분자동역학 계산의 핵심 과제이다.

3.2.1 Cell linked-list

Cell linked list 혹은 cell list를 사용하면 근거리 상호작용 계산에 필요한 계산양을 $O(N)$으로 획기적으로 줄일 수 있다 [1]. 그림 3.2의 2차원 예를 보며 cell linked-list를 만드는 과정을 살펴보자.

1. 4×4의 2차원 공간에 8개의 입자가 분포하고 있다.
2. 전체 공간을 $r_0 \times r_0$크기의 cell들로 분할한다. $r_0 = 1$인 경우 16개의 셀이 생긴다.
3. 각 입자의 셀 주소를 계산한다 (0번 입자 $\rightarrow$10번 셀, 1번 입자 $\rightarrow$4번 셀, ...).
4. 입자들을 셀 주소 기준으로 sorting하고, 입자의 인덱스를 셀 주소 순서대로 재설정한다.
5. 각 셀에 포함된 입자의 머리 번호와 꼬리 번호를 저장한다 (1번 셀에는 0 $\sim$ 0번 입자, ..., 10번 셀에는 4 $\sim$ 5번 입자, ...). 비어있는 셀의 머리 번호와 꼬리 번호는 `NULL`로 설정한다.

이 과정을 마치면 (i) 각 입자는 모든 속성을 보존한 채로 인덱스만 바뀌고 (ii) 각 셀은 자신에 포함된 입자들의 목록 (머리번호와 꼬리번호 사이)을 갖게된다.

3.2.2 상호작용 짝 찾기

Cell linked list를 사용해 입자 i의 상호작용 짝을 찾는 방법을 알아보자. 역시 그림 3.2의 2차원 예를 통해 설명하겠다.

[1] 필자는 cell list에 기반한 분자동역학 기법을 2012년 1월 30일에서 2월 3일동안 POSTECH에서 열린 제9차 통계물리 겨울학교에서 배웠다. 강력하고 유용한 수치계산법을 알려주신 KISTI의 정영균 박사께 진심으로 감사의 인사를 올린다.

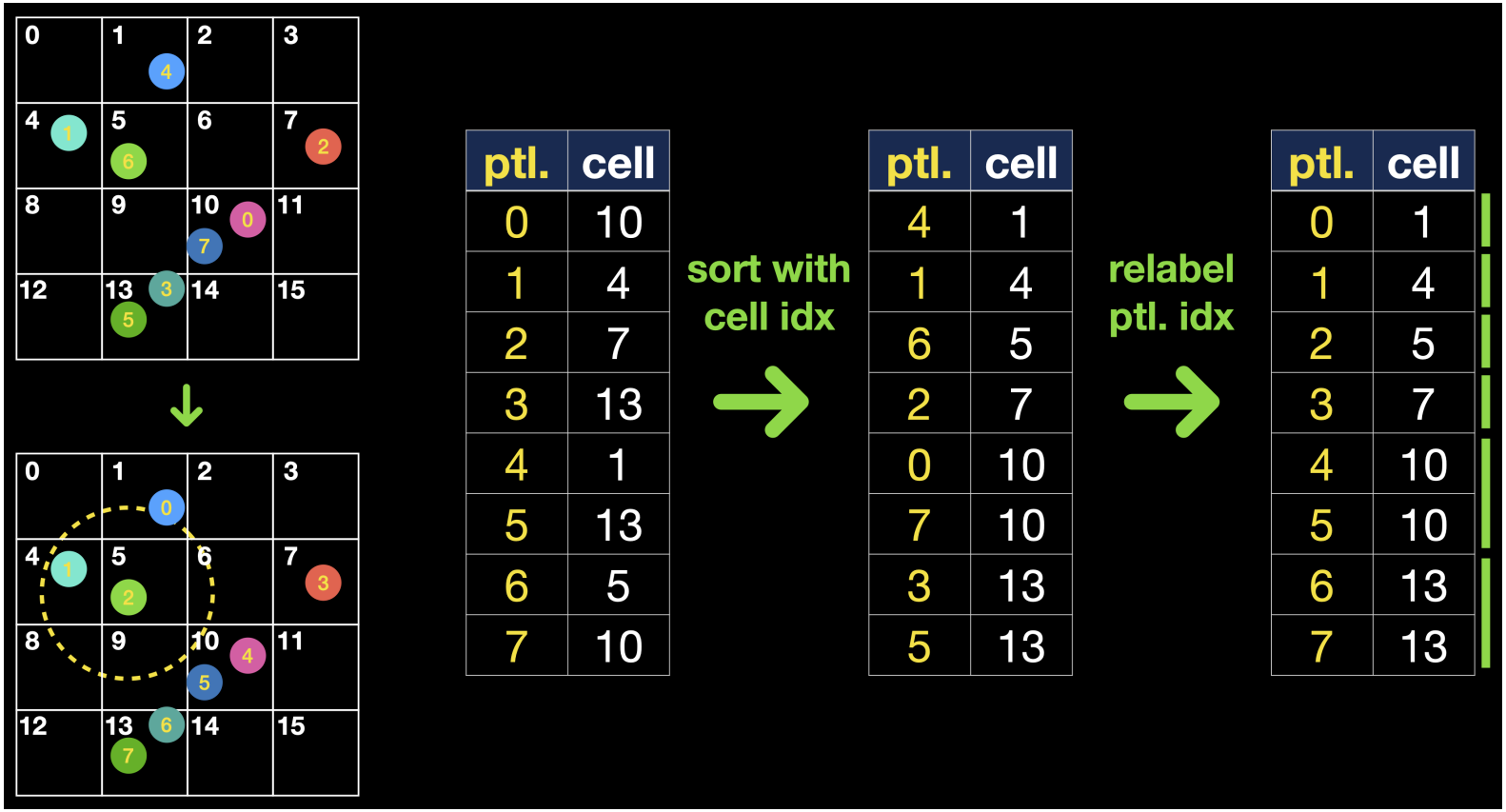


Figure 3.2: Cell linked-list 만들기.

- 입자 i가 속한 cell과 주위의 둘러싸고 있는 cell 총 9개를 고려한다. ($i = 2$이면 $\{0, 1, 2, 4, 5, 6, 8, 9, 10\}$)
- 셀에 저장된 입자의 머리, 꼬리 번호 정보를 사용하여 9개 셀에 포함된 모든 입자의 집합 A를 구한다. ($i = 2$ 이면면 $A = \{0, 1, 2, 4, 5\}$)
- A에 속한 입자 가운데 입자 i와의 거리가 상호작용 반경 r_0보다 작은 입자들 찾아 $\mathcal{N}_i(r_0)$에 저장한다. ($i = 2$이면 $\mathcal{N}_2(r_0) = \{1\}$)

한 입자당 9개의 셀에 포함된 입자와의 거리만을 비교하기 때문에 typical case에서 총 계산량은 $O(N)$이다.

3.3 GPU를 활용한 병렬 계산

GPU는 모든 입자의 자유도가 동시에 갱신되는 (parallel update) 분자동역학 계산을 병렬처리하는데 최적화된 연산장치이다. GPU가 가진 계산능력을 100퍼센트 활용하려면 gpu의 hardware 및 작동원리에 대한 깊은 이해가 필요하지만, 비전공 사용자의 입장에서 이는 매우 어려운 일이다. 이 강의에서는 Nvidia사의 GPU에서 CUDA (Compute Unified Device Architecture)를 사용해 병렬계산을 수행하는데 필요한 최소한의 정보만을 "*필자가 이해하는 방식으로*" 설명할 것이다 [2].

3.3.1 GPU의 구조와 작동원리

- GPU는 LED 모니터로 비유할 수 있다. 모니터의 grid 좌표점 (m, n)마다 픽셀이 심어져 있듯, Nvidia사의 GPU에는 연산을 수행할 수 있고 고유의 grid 좌표점 (m, n) 혹은 (l, m, n)을 지정할 수 있는 수천개의 `cuda cores`가

[2] 사이트 https://sites.google.com/view/jdnoh/lectures에서 tutorial에 사용된 cuda와 python source code를 다운로드할 수 있다.

심어져 심어져 있다.

- 그래픽 정보가 주어지면 모니터의 픽셀이 좌표값에 할당된 rgb 신호를 동시에 출력하듯이, cuda cores는 자신의 그리드 좌표값을 참조하며 함수계산을 독립적으로 동시에 수행한다.
- SPP 입자를 cuda core에 대응시켜주면 분자동역학 계산을 병렬로 수행할 수 있다.

3.3.2 CUDA kernel

cuda kernel은 cuda cores가 수행할 작업을 정의한 함수 혹은 서브루틴을 지칭한다. 2^{18} 차원의 두 벡터 $\boldsymbol{a}$, $\boldsymbol{b}$의 합 $\boldsymbol{c} = \boldsymbol{a} + \boldsymbol{b}$을 구하려면, cuda kernel은 아래와 같은 방식으로 정의하고

```
__global__ void a_plus_b_equal_c(int *a, int *b, int *c)
{
    unsigned int tid = threadIdx.x + blockIdx.x*blockDim.x;
    c[tid] = a[tid] + b[tid];
}
```

다음의 방식으로 호출한다.

```
int nBlock = 1024, nThread = 256;
a_plus_b_equal_c<<<nBlock, nThread>>>(a, b, c);
```

앞서 사용한 비유를 사용하여 설명을 이어가보자.

- <<<1024, 256>>>는 1024 × 256개의 픽셀 그리드를 가진 가상 모니터를 생성하라는 지시어다. (1 grid = 1024 blocks, 1 block = 256 threads)
- cuda kernel이 호출되면 각 픽셀 (cuda core)은 자신의 그리드 좌표값을 사전에 설정한 방식으로 변환해서 지정된 작업을 수행한다. (threadIdx.x = 0, ..., 255, blockIdx.x = 0, ..., 1023, blockDim.x = 256)
- blockDim.x(블록 한개에 포함된 쓰레드의 갯수)는 **32의 배수**로!

3.4 CUDA를 활용한 분자동역학 병렬계산 pseudo code

pseudo code

```
# Vicsek_Config.cu or Vicsek_Tseries.cu


initialize()


for t = 0, ..., T
    Xupdate<<<nBlock, nThread>>>()
    linked_cell()
    PolarAngleUpdat<<<nBlock, nThread>>>()
    Vupdata<<nBlock, nThread>>>()
    write_order_parameter()
```

```
        write_config()


    finalize()
```

package

```
    압축파일 vicsek_turorial.tgz 속에
        Vicsek_Config.cu (configuration을 출력하는 메인 프로그램)
        Vicsek_Tseries.cu (order parameter 시계열을 출력하는 메인 프로그램)
        VicsekKernel.cu (cuda kernel)
        VicsekModel.cu (class 정의)
```

compile and run (CUDA Version 11.6)

```
    nvcc -O2 Vicsek_Config.cu -o Vicsek_Config.exe -lm -lcurand_static -lculibos
        --extended-lambda


    Vicsek_Config.exe {lx} {ly} {rho} {v0} {eta} {seed} {tmax} {ic=gas or liq}
    => 파일출력Vicsek_Config_from_{ic}_state_Lx{lx}Ly{ly}Rho{rho}Eta{eta}V{v0}.dat


    Vicsek_Tseries.exe {lx} {ly} {rho} {v0} {eta} {seed} {tmax} {ic=gas or liq}
    => 파일출력Vicsek_Tseries_from_{ic}_state_Lx{lx}Ly{ly}Rho{rho}Eta{eta}V{v0}.dat
```

3.5 Python으로 애니메이션

Python의 matplotlib.pyplot package를 활용하여 Vicsek 모형의 동역학을 animation으로 확인할 수 있다. Python의 장점은 놀랄만한 유연성에 있지만, loop 계산이 지독하게 느리다. 이를 해결하는 여러가지 방법이 있지만, 필자는 핵심 loop를 C/C++로 작성하고 이를 컴파일하고 라이브러리로 변환한 후 python에서 불러 쓰는 방법을 사용하고 있다.

- package: 압축파일 `VicsekPython.pgz` 속에

  `anim.py, model.py`: Vicsek 모형과 애니메이션

  `sub_local_field.c`: 각 입자의 velocity angle을 업데이트하는 계산을 담당하는 C subroutine

  `SConstruct`: C 프로그램을 컴파일하여 라이브러리로 만드는데 필요한 스크립트 파일

  "scons" software tool을 설치한 후, `scons` 명령어를 입력하면 SConstruct 스크립트 파일이 지시하는대로 `sub_local_field.c` 를 컴파일 한 후 라이브러리 생성해준다.

- 실행 `python3 anim.py`

3.6 참고 자료

- CUDA 공식 홈페이지 https://developer.nvidia.com/cuda-zone

  CUDA quick start guide, tutorial, CUDA C/C++ programming guide, ...

- Thrust https://developer.nvidia.com/thrust

GPU에서 유용한 utilities의 모음: `sort_by_key`, `fill`, `reduce`, ...

- CuPy 홈페이지 https://cupy.dev/

  CUDA with python

4

해석적 연구 방법

입자 기반의 모형에 대한 정성적인 이해를 위해 밀도 및 속도 필드에 대한 장이론을 공부해보자. 장이론은 scalar field인 밀도 $\rho(\boldsymbol{r},t) = \sum_i \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_i(t))$와 vector field인 polarization $\boldsymbol{p}(\boldsymbol{r},t) = \frac{1}{\rho(\boldsymbol{r},t)}\sum_i \frac{\boldsymbol{v}_i(t)}{|\boldsymbol{v}_i(t)|}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_i(t))$, 혹은 운동량 밀도 (magnetic system에 비유해서 자화밀도라 칭하기도 한다) $\boldsymbol{m} = \rho\boldsymbol{p}$ 에 대한 연속 방정식을 유도하는 것으로 시작한다.

4.1 Boltzmann 방정식

볼츠만 방정식은 입자계의 성질을 one-particle distribution function

$$f(\boldsymbol{r},\theta,t) = \left\langle \sum_{i=1}^{N} \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_i(t))\delta(\theta-\theta_i(t)) \right\rangle \quad (\boldsymbol{r}_i,\theta_i : \text{position and polar angle of the } i\text{th ptl. }) \tag{4.1}$$

을 통해 기술한다 [BDG09]. $\langle()\rangle$은 확률적인 운동 경로에 대한 평균을 의미한다. f 함수는

$$\frac{1}{V}\int_V d\boldsymbol{r}\int_{-\pi}^{\pi} d\theta f(\boldsymbol{r},\theta,t) = \frac{N}{V} = \rho_0 \tag{4.2}$$

을 만족한다 (normalization 조건).

4.1.1 Time evolution

δt의 동안 f함수의 변화 $\delta f = f(\boldsymbol{r}, \theta, t+\delta t) - f(\boldsymbol{r}, \theta, t)$를 추적해보자.

- self-propulsion: $\boldsymbol{r} \to \boldsymbol{r} + v_0 \boldsymbol{n}_\theta \delta t$

$$\left.\frac{\delta f}{\delta t}\right|_{s.p.} = \frac{f(\boldsymbol{r} - v_0 \boldsymbol{n}_\theta \delta t, \theta, t) - f(\boldsymbol{r}, \theta, t)}{\delta t} = -v_0 \boldsymbol{n}_\theta \cdot \boldsymbol{\nabla} f \ . \tag{4.3}$$

- $\lambda \delta t$의 확률로 일어나는 운동 각도의 무작위적인 확산(self diffusion): $\theta \xrightarrow{\lambda \delta t} \theta + \zeta$ 이고 ζ의 확률분포함수는 $P_\eta(\zeta)$이다 (평균은 0, 분산은 η^2).

$$\left.\frac{\delta f}{\delta t}\right|_{s.d.} = -\lambda f(\boldsymbol{r}, \theta, t) + \lambda \int_{-\pi}^{\pi} d\theta' \int d\zeta f(\boldsymbol{r}, \theta', t) P_\eta(\zeta) \delta_{\,\mathrm{mod}\, 2\pi}(\theta - (\theta' + \zeta)) \tag{4.4}$$

$$= \lambda \left[-f(\boldsymbol{r}, \theta, t) + \int_{-\pi}^{\pi} d\theta' f(\boldsymbol{r}, \theta', t) P_\eta(\theta - \theta') \right] \tag{4.5}$$

- binary collision: 밀도가 낮다면 셋 이상의 입자가 동시에 충돌하여 상호작용하는 사건을 무시할 수 있다. 운동 각도가 (θ_1, θ_2)인 두 입자가 충돌해 속도정렬 상호작용을 겪었다고 하자. 속도정렬에도 P_η 분포를 따르는 잡음이 작용한다면 각 입자의 운동 각도는

$$\theta_1 \xrightarrow{\delta t K(\theta_2 - \theta_1)} \theta_1 + H(\theta_2 - \theta_1) + \zeta, \tag{4.6}$$

$$\theta_2 \xrightarrow{\delta t K(\theta_2 - \theta_1)} \theta_2 - H(\theta_2 - \theta_1) + \zeta'. \tag{4.7}$$

이 되고 $H(\phi = \theta_2 - \theta_1)$는 완전한 속도 정렬이 일어났을 때의 산란 각도이다. Vicsek-type의 경우에는

$$H(\phi) = \frac{\phi}{2}. \tag{4.8}$$

$K(\phi)$는 각도차이가 ϕ인 두 입자의 total scattering rate를 의미한다. 입자의 상호작용 거리가 r_0이고 상대속도의 크기가 $v_0|\boldsymbol{n}_\phi - \boldsymbol{n}_0| = 2v_0 \sin|\phi/2|$임을 고려하면 다음을 얻을 수 있다.

$$K(\phi) = 4r_0 v_0 K_0(\phi) \quad \left(K_0(\phi) := \sin\left|\frac{\phi}{2}\right|\right) \tag{4.9}$$

따라서,

$$\left.\frac{\delta f}{\delta t}\right|_{coll} = -4r_0 v_0 \int d\theta' K_0(\theta - \theta') f_2(\boldsymbol{r}, \theta; \boldsymbol{r}, \theta') \tag{4.10}$$

$$+ 4r_0 v_0 \iiint d\theta_1 d\theta_2 d\zeta K_0(\theta_2 - \theta_1) f_2(\boldsymbol{r}, \theta_1; \boldsymbol{r}, \theta_2) P_\eta(\zeta) \delta_{2\pi}(\theta - (\theta_1 + H(\theta_2 - \theta_1) + \zeta)) \tag{4.11}$$

$$= -4r_0 v_0 \int d\theta' K_0(\theta - \theta') f_2(\boldsymbol{r}, \theta; \boldsymbol{r}, \theta') \tag{4.12}$$

$$+ 4r_0 v_0 \iint d\theta_1 d\theta_2 K(\theta_2 - \theta_1) f_2(\boldsymbol{r}, \theta_1; \boldsymbol{r}, \theta_2) P_\eta(\theta - \theta_1 - H(\theta_2 - \theta_1)). \tag{4.13}$$

위의 식은 two-particles distribution function $f_2(\boldsymbol{r}_1, \theta_1; \boldsymbol{r}_2, \theta_2; t)$을 포함하고 있다. 일반적으로 n-particles distribution function의 운동방정식은 $(n+1)$-particles distribution function을 포함하고 있어서, 전체 방정식은 무한히 많은 분포함수들이 계층적으로 결합된 Bogoliubov–Born–Green–Kirkwood–Yvon (BBGKY) hierarchy 구조를 갖는다. 이 난관을 모면하기 위해 **평균장 근사** 혹은 **molecular chaos** 가정을 채택하자.

$$f_2(\boldsymbol{r}_1, \theta_1; \boldsymbol{r}_2, \theta_2; t) = f(\boldsymbol{r}_1, \theta_1, t) f(\boldsymbol{r}_2, \theta_2, t) \tag{4.14}$$

밀도가 낮고 입자-입자 상관관계를 무시할 수 있다는 가정을 통해 얻은 Boltzmann 방정식은 아래와 같다.

$$\begin{aligned}\partial_t f(\boldsymbol{r},\theta,t) + v_0 \boldsymbol{n}_\theta \cdot \boldsymbol{\nabla} f(\boldsymbol{r},\theta,t) =& \lambda \left[-f(\boldsymbol{r},\theta,t) + \int_{-\pi}^{\pi} d\theta' f(\boldsymbol{r},\theta',t) P_\eta(\theta-\theta') \right] \\ & - 4 r_0 v_0 \left[f(\boldsymbol{r},\theta,t) \int d\theta' K_0(\theta-\theta') f(\boldsymbol{r},\theta',t) \right. \\ & \left. + \iint d\theta_1 d\theta_2 K_0(\theta_2-\theta_1) f(\boldsymbol{r},\theta_1,t) f(\boldsymbol{r},\theta_2,t)) P_\eta(\theta-\theta_1-H(\theta_2-\theta_1)) \right]. \end{aligned} \tag{4.15}$$

척도변환 $t \to t/\lambda, \quad \boldsymbol{r} \to \frac{v_0}{\lambda}\boldsymbol{r}, \quad f \to \rho_0 f$ 을 통해 시간과 변위와 밀도를 무차원 변수로 표시하면 식 (4.15)에서 $\lambda = v_0 = 1$로 놓을 수 있고 식 (4.2)에서도 $\rho_0 = 1$로 놓을 수 있다. 무차원 방정식에서 식 (4.9)의 total scattering rate 함수는 $K(\phi) = 2\pi\kappa K_0(\phi)$이 되고, 속도정렬 상호작용의 세기는 무차원 결합상수 κ로 정해진다.

$$\kappa = \frac{2 r_0 v_0 \rho_0}{\pi \lambda} \tag{4.16}$$

4.1.2 Angular Fourier mode expansion

낮은 밀도에서 평균장 근사를 취했음에도 불구하고 Boltzmann 방정식은 여전히 복잡하다. 이론적인 접근을 위해 one-particle distribution function의 moments, 혹은 Fourier modes를 고려하자.

$$\hat{f}_k(\boldsymbol{r},t) = \int_{-\pi}^{\pi} d\theta f(\boldsymbol{r},\theta,t) e^{ik\theta} \quad \Leftrightarrow \quad f(\boldsymbol{r},\theta,t) = \frac{1}{2\pi} \sum_{k=-\infty}^{\infty} \hat{f}_k(\boldsymbol{r},t) e^{-ik\theta} \tag{4.17}$$

Fourier modes의 특성을 정리해보자.

- $\hat{f}_{-k}(\boldsymbol{r},t) = \hat{f}_k^*(\boldsymbol{r},t)$

- $\hat{f}_0(\boldsymbol{r},t) = \rho(\boldsymbol{r},t)$: 입자 밀도
- $\rho\boldsymbol{p}(\boldsymbol{r},t) = \begin{pmatrix} \mathrm{Re}\ \hat{f}_1 \\ \mathrm{Im}\ \hat{f}_1 \end{pmatrix}$: 운동량 밀도 (입자 밀도 × polarization) = local flocking order parameter
- $\rho\boldsymbol{Q} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} \mathrm{Re}\ \hat{f}_2 & \mathrm{Im}\ \hat{f}_2 \\ \mathrm{Im}\ \hat{f}_2 & -\mathrm{Re}\ \hat{f}_2 \end{pmatrix}$: nematic tensorial field (운동량 밀도의 비등방성)

Fourier 급수에 대한 convolution 정리 ($C(\theta) = \int d\theta' A(\theta-\theta')B(\theta')$의 Fourier modes는 $\hat{C}_k = \hat{A}_k\hat{B}_k$)를 활용하면 θ 공간에서의 Boltzmann 방정식 (4.15)을 Fourier 모드 사이의 결합된 방정식으로 손쉽게 바꿀 수 있다 [1].

$$\partial_t f_k(\boldsymbol{r},t) + \frac{1}{2}(\partial_x + i\partial_y)f_{k-1} + \frac{1}{2}(\partial_x - i\partial_y)f_{k+1} = -(1-P_k)f_k + \kappa \sum_{l=-\infty}^{\infty} \mathcal{J}_{kl}\ f_{k-l}(\boldsymbol{r},t)f_l(\boldsymbol{r},t), \text{where} \tag{4.18}$$

$$P_k = \int d\zeta P_\eta(\zeta)e^{-ik\zeta} = e^{-k^2\eta^2/2}, \mathcal{J}_{kl} = P_k I_{k/2-l} - I_l, I_u = \int_{-\pi}^{\pi} d\theta K_0(\theta)e^{iu\theta} = \begin{cases} \frac{4}{1-4u^2}, & u : \text{integer} \\ \frac{4}{1+2u\sin u\pi}, & u : \text{half-integer} \end{cases} \tag{4.19}$$

4.1.3 균일한 무질서 상태

균일한 무질서 상태 혹은 기체상태에 해당하는 상태

$$f_k(\boldsymbol{r},t) = f_{G,k} := \delta_{k0} \tag{4.20}$$

[1] 오해의 여지가 없을 경우 Fourier modes를 의미하는 ˆ 기호를 생략하겠다.

는 볼츠만 방정식 (4.18)의 뻔한 정상상태 해이다. 이 해가 균일한 섭동

$$f_k(\boldsymbol{r},t) = f_{G,k} + \epsilon_k(t) \quad (|\epsilon_k| \ll 1) \tag{4.21}$$

에 대해 안정한지 살펴보자 (linear stability analysis). 선형 근사에서 $k \neq 0$인 섭동항은 운동방정식

$$\dot{\epsilon}_k = \mu_k \epsilon_k + O(\epsilon^2) \quad (\mu_k := -(1-P_k)\kappa(\mathcal{J}_{k0} + \mathcal{J}_{kk})) \tag{4.22}$$

을 따른다. 모든 Fourier modes가 서로 독립적임을 알 수 있다. Order parameter에 해당하는 $k = 1$ 모드의 안정 조건 $\mu_1 = -(1+8\kappa/3) + (1+4\kappa)P_1 < 0$으로부터 균일한 무질서 상태가 불안정해지는 잡음 세기의 임계값을 구할 수 있다.

$$\eta_c(\kappa) = \sqrt{-2\log\left(\frac{1+8\kappa/3}{1+4\kappa}\right)} \tag{4.23}$$

4.1.4 균일한 flocking ordered state

높은 밀도 혹은 작은 잡음 ($\eta < \eta_c(\kappa)$) 영역에서 균일한 기체상태는 불안정해진다. 아래의 단계를 밟아가며 균일한 기체상태가 아닌 영역에서의 상평형 그림을 구해보자.

1. 균일한 ($\partial_x = \partial_y = 0$) 액체상태에 해당하는 정상상태 ($\partial_t = 0$) 해 $f_k(\boldsymbol{r},t) = f_{L,k} \neq 0$를 연립방정식

$$(1-P_k) f_{L,l} = \kappa \sum_l \mathcal{J}_{kl} f_{L,k-l} f_{L,l} \tag{4.24}$$

을 풀어 구한다. 수치적으로는 푸리에 모드를 $|k| < k_c$인 영역으로 제한한 후 iteration 방법으로 구할 수 있다.

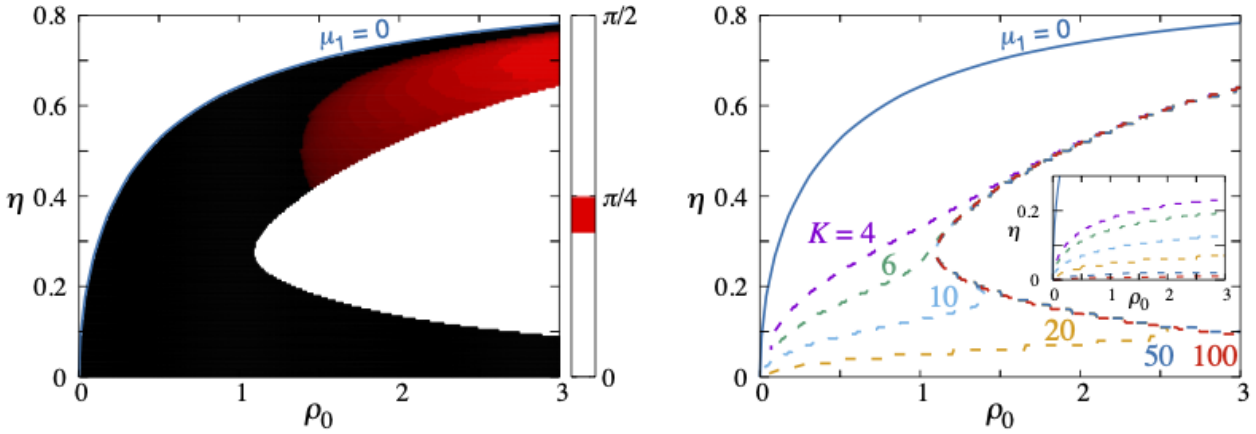


Figure 4.1: Boltzmann 방정식의 상평형 그림 ([Mah18]에서 발췌함. 그림의 ρ_0와 본문의 κ 사이에는 $\rho_0 = \pi\kappa$의 관계가 있다.)

2. 균일한 액체상태$f_{L,k}$에서 wave vector가 $\boldsymbol{q} = (q_x, q_y)$인 불균인한 평면파 요동의 linear stability를 조사한다.

$$f_k(\boldsymbol{r}, t) = f_{L,k} + \delta f_{k,\boldsymbol{q}}(t) e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}} \tag{4.25}$$

선형근사에서 요동의 운동방정식은

$$\frac{d}{dt}(\delta f_{k,\boldsymbol{q}}) = \mathcal{M}(\boldsymbol{q})_{kl}(\delta f_{l,\boldsymbol{q}}) \tag{4.26}$$

이고, 선형 안정성을 결정하는 행렬은

$$\mathcal{M}(\boldsymbol{q})_{k,l} = -(1-P_k)\delta_{kl}(1-P_k) - \frac{i}{2}\left((q_x+iq_y)\delta_{k,l+1} + (q_x-iq_y)\delta_{k,l-1}\right) + \kappa\left(\mathcal{J}_{k,l} + \mathcal{J}_{k,k-l}\right) f_{L,k-l} \tag{4.27}$$

이다.

3. 각각의 $\boldsymbol{q}$에서 안정성 행렬 $\mathcal{M}(\boldsymbol{q})$의 고유치를 구하고, 실부 파트가 양의 값을 갖는 고유치가 존재하는지 조사한다. 모든 $\boldsymbol{q}$에서 모든 고유치의 실수 파트가 음수인 영역에선, 균일한 액체상태가 안정적인 해가 된다. 만약, 실수 파트가 양수인 고유치가 하나라도 존재한다면, 그 영역에서 균일한 액체상태는 불안정하다.

그림 4.1에서 색깔로 칠해진 부분은 특정한 $\boldsymbol{q}$의 요동에 의해 균일한 액체상태가 불안정해지는 영역이다. 가장 불안정성이 높은 요동의 wave vector는 $\boldsymbol{q} \neq 0$임이 밝혀졌다 [Mah18]. 색깔이 칠해진 영역에서 계의 입자 및 polarization의 분포가 불균일함을 내포하고 있다. 이 영역에서 Boltzmann 방정식 (4.15)을 수치적분하면 횡으로 늘어선 여러 개의 band가 진행하는 것을 확인할 수 있다 [Mah18]. 이상으로 우리는 Boltzmann 방정식으로부터 균일한 기체상태 (disordered phase), 균일한 액체상태 (flocking phase), 불균일한 공존상태 (bands phase)로 구성된 상평형 그림 (4.1)을 얻었다. Vicsek 모형의 상평형 그림 (2.2) 사이의 유사성과 차이점을 확인해보길 바란다.

4.1.5 Hydrodynamic equation

Boltzmann 방정식으로부터 상평형 그림의 정성적인 특성을 이해했으나, 여전이 수치적 접근 방법에 지나치게 의존하고 있어 상전이 메커니즘을 이해하기가 어렵다. 해석적인 접근을 위해 좀더 과감한 가정을 도입하자. 불균일한 공존상태에서 기체상태 쪽 경계선 (식 (4.23))으로 다가갈수록 $f_{k\geqslant 1}(\boldsymbol{r}, t)$의 크기가 전체적으로 작아질 것이다. 또한 경계선으로 다가갈수록 계의 비등방성이 줄어들 것이다. 이러한 기대를 전제로 하여 전체 Fourier modes 가운데 $k = 0$ 모드 (입자 밀도), $k = 1$ 모드 (polarlization)만 남기고 나머지 모드들을 효과적으로 제거한 hydrodyanmic 방정식을 유도해보자 [BDG09]. $f_0 = \rho$, $f_1 = \rho(p_x + ip_y)$임을 상기하자.

식 (4.18)에 $k = 0, 1, 2$를 대입하여 hydrodynamic field ρ, $\boldsymbol{p}$와 leading correction term에 관한 운동방정식을 구해보자.

- particle density ($k = 0$)

$$\partial_t \rho + \frac{\partial_x}{2}(f_{-1} + f_1) + \frac{i\partial_y}{2}(f_{-1} - f_1) = 0 \quad \Rightarrow \quad \partial_t \rho + \boldsymbol{\nabla} \cdot (\rho \boldsymbol{p}) = 0. \tag{4.28}$$

- polarization ($k = 1$)

$$\partial_t f_1 + \frac{\partial_x}{2}(f_0 + f_2) + \frac{i\partial_y}{2}(f_0 - f_2) = -(1 - P_1) f_1 + \kappa(\mathcal{J}_{1,0} + \mathcal{J}_{1,1}) f_0 f_1 + \kappa(\mathcal{J}_{1,2} + \mathcal{J}_{1,-1}) f_2 f_{-1} + O(f_{|k|\geqslant 3}) \tag{4.29}$$

- nematic order parameter ($k = 2$)

$$\partial_t f_2 + \frac{\partial_x + i\partial_y}{2} f_1 = -(1 - P_2) f_2 + \kappa \left(\mathcal{J}_{20} f_2 f_0 + \mathcal{J}_{2,1} f_1^2 + \mathcal{J}_{22} f_0 f_2 \right) + O(f_{|k|\geqslant 3}) \tag{4.30}$$

f_2는 hydrodynamic fields보다 time scale이 짧아서 항상 quasi-steady state에 근접해 있다고 가정하면 식 (4.30)에서 $\partial_t f_2$항을 0으로 놓을 수 있고, f_2를 f_0과 f_1함수로 구할 수 있다. 이렇게 구한 f_2를 식 (4.29)에 대입하고 정리하면 입자 밀도와 운동량 밀도 $\boldsymbol{w} = \rho \boldsymbol{p}$로 이뤄진 닫힌 운동방정식을 얻을 수 있다. 정확한 꼴의 운동방정식은 참고문헌 ([BDG09]의 식 (27-32))에서 확인하기로 하고, 가장 중요한 역할을 하는 항만 살펴보자.

$$\partial_t \boldsymbol{w} + \gamma(\boldsymbol{w} \cdot \boldsymbol{\nabla})\boldsymbol{w} = \left\{ \mu(\rho) - \xi(\rho) \boldsymbol{w}^2 \right\} \boldsymbol{w} + \text{additional terms} \tag{4.31}$$

붉은 색으로 표시한 항은 vector order parameter를 갖는 계의 Landau-Ginzburg 이론에 등장하는 항이다. $\xi > 0$인 Landau-Ginzburg 이론에서, reduced temperature 역할을 담당하는 μ 값이 음수에서 양수로 변함에 따라 계는 disordered phase ($\boldsymbol{w} = 0$)와 ordered phase ($\boldsymbol{w} \neq 0$) 사이에서 상전이를 겪는다. 열평형계의 Landau-Ginzburg

이론과의 차이점은 effective reduced temperature μ가 local density에 의존한다는 점이다. 즉,

$$\mu(\rho(\boldsymbol{r})) = 4\kappa\frac{\rho(\boldsymbol{r})}{\rho_0}\left(e^{-\eta^2/2} - \frac{2}{3}\right) - \left(1 - e^{-\eta^2/2}\right). \tag{4.32}$$

입자의 밀도에 작은 요동이 발생하면 $\rho(\boldsymbol{r}) > \rho_0$인 영역과 $\rho(\boldsymbol{r}) < \rho_0$인 영역이 나뉘게 된다. 밀도가 높아진 영역에서는 μ 값이 양수가 되어 입자들이 집단적으로 한 방향으로 움직이고 따라서 입자의 local density는 더욱 더 높아진다. 반면에 반대의 영역에서는 μ 값이 음수과 되어 입자들이 마구잡이로 움직이며 주변에 흡수되어 local density는 더욱 더 낮아진다. 입자 밀도에 의존하는 effective reduced temperature가 Vicsek-type 모형에서 나타나는 bands에 의한 microphase separation의 메카니즘임을 알 수 있다. Hydrodynamic equation에 대한 자세하고 엄밀한 계산은 [BDG09]을 참고하라.

4.2 Smoluchowski 방정식

Bolzmann 방정식이 coarse-grain된 Vicsek-type 모형의 장방정식에 적합한 반면에, 식 (3.3)과 같은 연속 시간 운동방정식을 따르는 ABP 기반 모형의 장방정식은 Smoluchowski 방정식이 적합하다. 이 방법은 Langevin 동역학을 따르는 다체계의 장방정식을 유도한 Dean의 이론 [Dea99]을 ABP 모형에 적용하는 것이다 [GRBSG14]. 다체계의 확률밀도함수에서 출발해서 역식 molecular chaos 가정을 도입하면, one-particle distribution function이 만족하는 Smoluchowski 방정식을 유도할 수 있다. Boltzmann 방정식과의 달리 Smoluchowski 방정식은 multiplicative stochastic noise항을 포함하고 있다.

5 전망

5.1 Beyond mean field theory

Boltzmann 방정식과 Smoluchowski 방정식, 그리고 그로부터 유도된 hydrodynamic 방정식들은 모두 *molecular chaos*를 가정한 평균장 이론이다. 평균장 이론으로 Vicsek-type 모형에서 발생하는 무질서 기체상, 떼지음 액체상, 공존상이 존재는 상평형 그림, 그리고 각 상태에서의 물성을 이해할 수 있다. 상평형 그림뿐만이 아니라 임계현상의 보편성을 위해서는 평균장 이론을 뛰어넘는 이론적인 접근이 필요하다.

서로 밀어내는 상호작용을 교환하는 능동입자의 상분리 현상(MIPS, motility-induced phase separation)도 hydrodynamic 방정식을 통해 활발히 연구되고 있다. 열평형계에서 일어나는 기체-액체 상분리 현상은 model B의 범주로 분류되는 스칼라 장방정식으로 기술된다 [HH77].

$$\begin{aligned} \partial_t \phi &= -\boldsymbol{\nabla} \cdot \left(\boldsymbol{J} + \sqrt{2DM}\boldsymbol{\Lambda} \right) \\ \boldsymbol{J} &= -M\boldsymbol{\nabla}\mu_{eq} = -M\boldsymbol{\nabla}\frac{\delta F}{\delta \phi} \quad \text{with } F[\phi] = \int \left\{ \frac{a}{2}\phi^2 + \frac{b}{4}\phi^4 + \frac{K}{2}|\boldsymbol{\nabla}\phi|^2 \right\} \end{aligned} \tag{5.1}$$

위의 식에서 자유에너지항으로부터 유도되지 않는 항을 추가함으로써 열평형 이론을 능동물질계로 확장할 수 있다.

예를 들어

$$\boldsymbol{J}/M = -\boldsymbol{\nabla}\left[\frac{\partial F}{\partial F} + \lambda|\boldsymbol{\nabla}\phi|^2\right] + \zeta(\nabla^2\phi)\boldsymbol{\nabla}\phi \tag{5.2}$$

로 확장한 이론인 active model B+ (AMB+)가 있다 [TNC18]. 위의 식에서 잡음항을 0으로 놓은 평균장 이론만으로도 매우 흥미로운 상분리 현상을 보인다. 평균장 이론을 넘어서서 잡음항의 효과가 모두 고려된 stochastic field theory에 대한 연구가 필요한 시점이다.

5.2 Discrete symmetry flocking

Vicsek-type 및 ABP 모형의 내부 자유도에 해당하는 속도방향각도 θ는 연속변환 ($\theta \to \theta + \phi$)에 대해 대칭적이다. 연속 대칭성을 완화한 불연속 변환 대칭성을 갖는 능동물질계의 집단거동은 이론적으로 매우 흥미로운 연구주제이다. 속도방향벡터 $\boldsymbol{n} = (\cos\theta, \sin\theta)$의 방향각도가 p개의 불연속적인 값

$$\theta = \frac{2\pi s}{p}, \quad (s = 0, 1, \cdots, p-1) \tag{5.3}$$

으로 제한된 active p-state clock model을 생각해보자 [CMR22, SCTT22]. Vicsek 모형은 $p = \infty$인 극한에 해당하며, 가장 간단한 $p = 2$인 경우는 active Ising model (AIM)에 해당한다 [ST13].

순수한 이론적인 흥미를 넘어서서 AIM은 flocking 상전이가 기체-액체 상전이와 같은 현상임을 확립하는데 결정적인 기여를 했다 [SCT15]. 그러나, 최근에 새롭게 발표된 연구 결과는 작고 짧은 시간 동안에 수행되는 수치 시늉내기에서 얻은 결과와 평균장 이론 기반 비선형 hydrodynamic 방정식에서 얻은 결과가 얼마나 취약할 수 있는지를 여실히 보여주고있다 [BGR+23, WN24]. AIM의 연구의 흐름을 간단히 정리해보자.

1. AIM의 등장으로 flocking 상전이의 기체상 → 공존상 → 액체 상전이 이론의 정립되었다 [SCT15].

2. Droplet excitation이 새롭게 발견되어 장거리 질서를 갖는 액체상태가 metastable 상태라는 것이 밝혀졌다. 이로 인해 기체-액체 상전이 이론의 근거가 사라졌다 [BGR+23].

3. Motility-induced interface pinning (MIIP) 현상이 새롭게 발견되었다. MIIP로 인해 잡음의 세기가 작을 때 계의 상태가 액체상태가 아닌 disordered pinned state가 된다 [WN24].

4. 이것이 끝이 아니다.

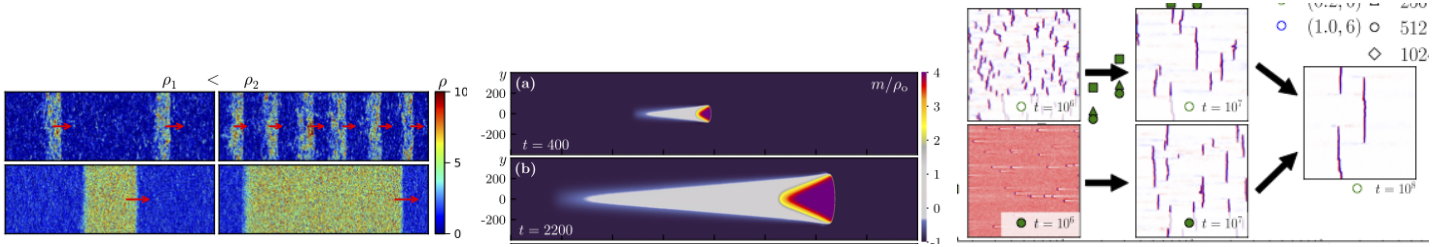


Figure 5.1: Band, droplet, and MIIP in the AIM (각각 [SCT15, BGR+23, WN24]에서 발췌).

5.3 Chirality

생물계의 다양성은 물리학자에게 끊임없이 새로운 영감을 제공하고 있다. *Paenibacillus vortex* 박테리아 집단은 계 전체의 경계를 따라 흐르는 edge current를 만들고 [LCS+24], molecular motor assay에 올려진 microtubles과 [SNS+12] 편모로 움직이는운동 박테리아 *Serratia marcescens*은 거시적인 크기 ($O(1mm)$)의 vortex array를 생성하고 [SNS+12,

XW24], 밀도가 높은 *E. coli*는 서로의 운동을 동기화해서 원운동 파동을 만든다 [CLS+17]. 이들 계를 이루는 입자들은 chirality를 갖고 있어서, 속도정렬 상호작용이 Vicsek-type 모형보다 다양한 협동현상을 보인다.

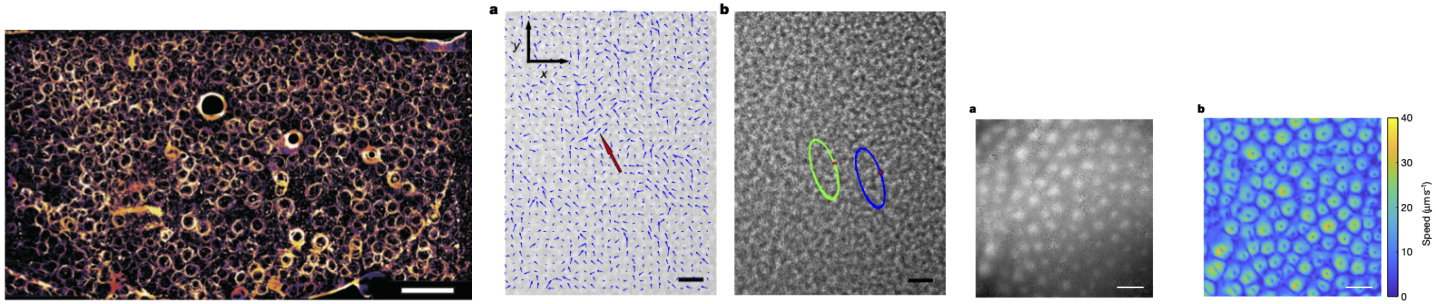


Figure 5.2: vortices in bacteria (각각 [SNS+12, CLS+17, XW24]에서 발췌).

Vortex array 패턴을 설명하기 위해 Sumino 등은 명시적인 chirality를 포함한 모형계를 제시하였다 [SNS+12]

$$\begin{aligned} \boldsymbol{r}_i &= v_0 \boldsymbol{n}_\theta \\ \dot{\theta}_i &= \omega_i + \frac{\alpha}{|\mathcal{N}_i(r_0)|} \sum_{j \in \mathcal{N}_i(r_0)} \sin(\theta_j - \theta_i) \\ \dot{\omega}_i &= -\frac{1}{\tau}(\omega_i - \omega_0) + \xi_i(t) \end{aligned} \tag{5.4}$$

Chirality를 명시적으로 도입했기 때문에 이 모형이 vortex array 패턴을 보여주는 것은 놀라운 일이 아니다. 한편 Xu

와 Wu는 그들의 실험 결과를 다음의 모형으로 재현할 수 있다고 보고하였다:

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{r}_i &= v_0 \mu_i f_i \boldsymbol{n}_\theta + \sqrt{2D_r}\boldsymbol{x}\boldsymbol{i}_{r,i} \\
\dot{\theta}_i &= \omega_i + \frac{k_\theta}{|\mathcal{N}_i(r_0)|} \sum_{j \in \mathcal{N}_i(r_0)} \sin(\theta_j - \theta_i) + \sqrt{2D_\theta}\xi_{\theta,i} \\
\dot{\omega}_i &= -\frac{\omega_i}{\tau} + \frac{k_\omega}{|\mathcal{N}_i(r_0)|} \sum_{j \in \mathcal{N}_i(r_0)} (\omega_j - \omega_i) + \mathrm{sign}(\omega_i) e^{-|\omega_i|\omega_0} + \sqrt{2D_\omega}\xi_{\omega,i}(t)
\end{aligned} \tag{5.5}$$

$\omega \leftrightarrow -\omega$의 대칭성이 유지되고 명시적인 chirality를 도입하지 않았음에도 vortex cell이 구현됐다는 것은 상호작용에 의해 $\omega \leftrightarrow -\omega$의 대칭성이 자발적으로 붕괴되었음을 의미한다. Chiral active 입자의 pattern formation은 흥미로운 연구주제가 될 것이다.

5.4 Multi-species system

여러 종의 능동 입자가 혼합된 계는 active matter 연구의 새로운 장을 열고 있다. A, B 두 종으로 이루어진 계에서 입자 사이의 속도정렬 상호작용의 속성을 2×2행렬 $J_{\alpha\beta}$로 나타내자 $(\alpha, \beta = A, B)$.

- Chatterjee와 공동연구자들은 $J_{AA} = J_{BB} > 0$ 이고 $J_{AB} = J_{BA} < 0$인 경우, 즉 같은 종 입자끼리는 속도를 같은 방향으로 정렬하고 다른 종 입자끼리는 반대 방향으로 정렬하는 경우를 연구하였다 [CMW+23]. 두 종의 입자는 antiparallel flocking state와 parallel flocking state를 형성하며 서로를 배척하려는 상호작용을 활용 혹은 회피하는 방식으로 집단 거동을 보인다.

- $J_{AB} \neq J_{BA}$인 경우 두 종 사이의 상호작용은 nonreciprocal 성질을 갖으며 [FHLV21], 특히 $J_{AB} \times J_{BA} < 0$

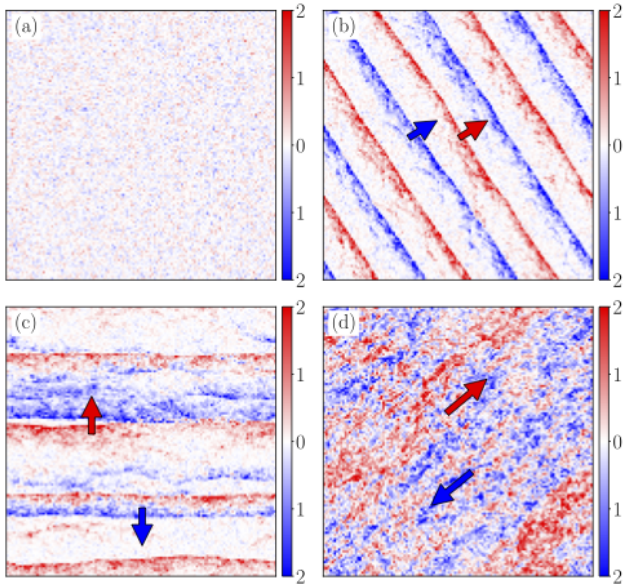


Figure 5.3: Two-species Vicsek 모형의 antiparallel flocking and parallel flocking states ([CMW+23]에서 발췌).

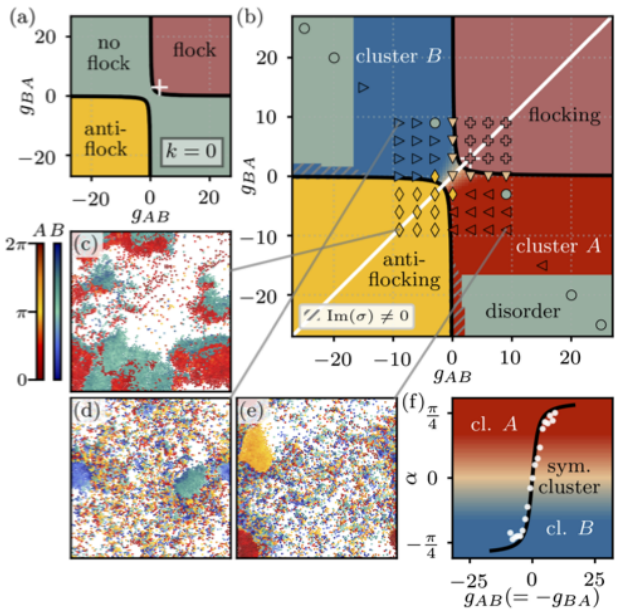


Figure 5.4: Non-reciprocal Vicsek model ([KK24]에서 발췌).

인 경우, 입자들이 서로 쫓고 쫓기며 chiral 상태 혹은 술래잡기 상태, clustering 등 흥미로운 동역학적 상태를 보인다 [MSA+23, MCNR24, KK24].

Bibliography

[BDG09] Eric Bertin, Michel Droz, and Guillaume Grégoire. Hydrodynamic equations for self-propelled particles: microscopic derivation and stability analysis. *J. Phys. A*, 42(44):445001, 2009.

[BGR+23] Brieuc Benvegnen, Omer Granek, Sunghan Ro, Ran Yaacoby, Hugues Chaté, Yariv Kafri, David Mukamel, Alexandre Solon, and Julien Tailleur. Metastability of Discrete-Symmetry Flocks. *Phys. Rev. Lett.*, 131(21):218301, 2023.

[Cha20] Hugues Chaté. Dry Aligning Dilute Active Matter. *Ann. Rev. Condens. Matter Phys.*, 11:189–212, 2020.

[CLS+17] Chong Chen, Song Liu, Xia-qing Shi, Hugues Chaté, and Yilin Wu. Weak synchronization and large-scale collective oscillation in dense bacterial suspensions. *Nature*, 542(7640):210–214, 2017.

[CMR22] Swarnajit Chatterjee, Matthieu Mangeat, and Heiko Rieger. Polar flocks with discretized directions: The active clock model approaching the Vicsek model. *EPL*, 138(4):41001, 2022.

[CMW+23] Swarnajit Chatterjee, Matthieu Mangeat, Chul-Ung Woo, Heiko Rieger, and Jae Dong Noh. Flocking of two unfriendly species: The two-species Vicsek model. *Phys. Rev. E*, 107(2):024607, 2023.

[Dea99] David S Dean. Langevin equation for the density of a system of interacting Langevin processes. *J. Phys. A*, 29(24):L613, 1999.

[FHLV21] Michel Fruchart, Ryo Hanai, Peter B. Littlewood, and Vincenzo Vitelli. Non-reciprocal phase transitions. *Nature*, 592(7854):363–369, 04 2021.

[FM12] Yaouen Fily and M. Cristina Marchetti. Athermal Phase Separation of Self-Propelled Particles with No Alignment. *Phys. Rev. Lett.*, 108(23):235702, 2012.

[GRBSG14] Robert Großmann, Pawel Romanczuk, Markus Bär, and Lutz Schimansky-Geier. Vortex Arrays and Mesoscale Turbulence of Self-Propelled Particles. *Phys. Rev. Lett.*, 113(25):258104, 2014.

[HH77] P. C. Hohenberg and B. I. Halperin. Theory of dynamic critical phenomena. *Rev. of Mod. Phys.*, 49(3):435–479, 1977.

[Hoh67] P. C. Hohenberg. Existence of Long-Range Order in One and Two Dimensions. *Phys. Rev.*, 158(2):383–386, 1967.

[JKKN77] Jorge V. José, Leo P. Kadanoff, Scott Kirkpatrick, and David R. Nelson. Renormalization, vortices, and symmetry-breaking perturbations in the two-dimensional planar model. *Phys. Rev. B*, 16(3):1217–1241, 1977.

[KK24] Kim L. Kreienkamp and Sabine H. L. Klapp. Nonreciprocal Alignment Induces Asymmetric Clustering in Active Mixtures. *Phys. Rev. Lett.*, 133(25):258303, 2024.

[LCS+24] He Li, Hugues Chaté, Masaki Sano, Xia-qing Shi, and H. P. Zhang. Robust Edge Flows in Swarming Bacterial Colonies. *Phys. Rev. X*, 14(4):041006, 2024.

[Mah18] Benoît Mahault. *Outstanding problems in the statistical physics of active matter*. Theses, Université Paris Saclay (COmUE), August 2018.

[MCNR24] Matthieu Mangeat, Swarnajit Chatterjee, Jae Dong Noh, and Heiko Rieger. Emergent complex phases in a discrete flocking model with reciprocal and non-reciprocal interactions. *arXiv*, 2024.

[MGC19] Benoît Mahault, Francesco Ginelli, and Hugues Chaté. Quantitative Assessment of the Toner and Tu Theory of Polar Flocks. *Phys. Rev. Lett.*, 123(21):218001, 2019.

[MJR+13] M C Marchetti, J F Joanny, S Ramaswamy, T B Liverpool, J Prost, Madan Rao, and R Aditi Simha. Hydrodynamics of soft active matter. *Rev. Mod. Phys.*, 85(3):1143 – 1189, 07 2013.

[MSA+23] David Martin, Daniel Seara, Yael Avni, Michel Fruchart, and Vincenzo Vitelli. The transition to collective motion in nonreciprocal active matter: coarse graining agent-based models into fluctuating hydrodynamics. *arXiv*, 2023.

[MW66] N. D. Mermin and H. Wagner. Absence of Ferromagnetism or Antiferromagnetism in One- or Two-Dimensional Isotropic Heisenberg Models. *Phys. Rev. Lett.*, 17(22):1133–1136, 1966.

[PBGC14] A . Peshkov, E . Bertin, F . Ginelli, and H Chaté. Boltzmann-Ginzburg-Landau approach for continuous descriptions of generic Vicsek-like models. *Eur. Phys. J. Spec. Top.*, 223(7):1315 – 1344, 06 2014.

[SCT15] Alexandre P Solon, Hugues Chaté, and Julien Tailleur. From Phase to Microphase Separation in Flocking Models: The Essential Role of Nonequilibrium Fluctuations. *Phys. Rev. Lett.*, 114(6):068101 – 5, 02 2015.

[SCTT22] Alexandre Solon, Hugues Chat\é, John Toner, and Julien Tailleur. Susceptibility of Polar Flocks to Spatial Anisotropy. *Phys. Rev. Lett.*, 128(20):208004, 2022.

[SNS+12] Yutaka Sumino, Ken H. Nagai, Yuji Shitaka, Dan Tanaka, Kenichi Yoshikawa, Hugues Chaté, and Kazuhiro Oiwa. Large-scale vortex lattice emerging from collectively moving microtubules. *Nature*, 483(7390):448–452, 2012.

[ST13] A. P. Solon and J. Tailleur. Revisiting the Flocking Transition Using Active Spins. *Phys. Rev. Lett.*, 111(7):078101, 2013.

[Tas20] Hal Tasaki. Hohenberg-Mermin-Wagner-Type Theorems for Equilibrium Models of Flocking. *Phys. Rev. Lett.*, 125(22):220601, 2020.

[TNC18] Elsen Tjhung, Cesare Nardini, and Michael E. Cates. Cluster Phases and Bubbly Phase Separation in Active Fluids: Reversal of the Ostwald Process. *Phys. Rev. X*, 8(3):031080, 2018.

[Ton12] John Toner. Reanalysis of the hydrodynamic theory of fluid, polar-ordered flocks. *Phys. Rev. E*, 86(3):031918, 2012.

[TT95] John Toner and Yuhai Tu. Long-Range Order in a Two-Dimensional Dynamical XY Model: How Birds Fly Together. *Phys. Rev. Lett.*, 75(23):4326–4329, 1995.

[TT98] John Toner and Yuhai Tu. Flocks, herds, and schools: A quantitative theory of flocking. *Phys. Rev. E*, 58(4):4828–4858, 1998.

[VCJ+95] Tamás Vicsek, András Czirók, Eshel Ben Jacob, Inon Cohen, and Ofer Shochet. Novel Type of Phase Transition in a System of Self-Driven Particles. *Phys. Rev. Lett.*, 75(6):1226 – 1229, 1995.

[WN24] Chul-Ung Woo and Jae Dong Noh. Motility-Induced Pinning in Flocking System with Discrete Symmetry. *Phys. Rev. Lett.*, 133(18):188301, 2024.

[XW24] Haoran Xu and Yilin Wu. Self-enhanced mobility enables vortex pattern formation in living matter. *Nature*, 627(8004):553–558, 2024.