

On nonequilibrium statistical physics of self-propelled particles

– from single-particle transport to emergent macroscopic patterns –

Hans Robert Großmann

Abstract

Pattern formation in active matter is a paradigm for self-organization far from thermodynamic equilibrium. The term active matter refers to complex systems composed of self-propelled particles which are characterized by the ability to convert energy of their surroundings into kinetic energy. This thesis contributes to the theoretical description of active matter. A central concern is the relation of single-particle transport properties and the collective dynamics resulting from inter-particle interactions. Equations for measurable observables are therefore analytically derived from particle-based models thereby allowing to link the dynamics on different length- and timescales as well as several levels of complexity.

In the first part, diffusion properties of individual self-propelled particles are analyzed. Based on a geometric perspective on self-propelled motion, a model is derived within which the dynamics of active particles in isotropic as well as anisotropic environments is described in a unified framework. In this context, the mathematical apparatus used in this work, which is based on the theory of stochastic processes and nonlinear dynamics, is illustrated. Furthermore, a stochastic clock model for the intra-particle processes that control changes in the direction of motion is proposed. Resulting predictions are compared to experimental data from observations of microorganisms and, in particular, the existence of optimal parameter values – in the sense of a maximization of the diffusivity – is reported.

The second part of this thesis is concerned with kinetic and hydrodynamic theories for the description of emergent structures in self-propelled particle systems interacting via a velocity-alignment mechanism. Throughout, the focus of the investigation is thereby on the identification of essential interaction mechanisms that lead to certain large-scale structures. Along these lines, the turbulent-like vortex dynamics as observed in dense bacterial suspensions is traced back to the interplay of competing velocity-alignment interactions. Further, the alignment-induced aggregation of particles which in turn leads to the formation of ordered, large-scale density bands is interpreted physically as a nonequilibrium phase-separation process. Potential control mechanisms for these pattern-formation phenomena are discussed.

Finally, the general question how the motion of locally interacting individual entities, in turn implying a dynamic interaction network, affects the emergence of order in nonequilibrium systems is addressed. For this purpose, an ensemble of random walkers is studied each of which carries an internal degree of freedom (a phase oscillator or a classical spin vector) that adopts to the neighboring walkers. Notably, superdiffusive transport – in contrast to normal diffusion, in which case a defect-mediated Berezinskii-Kosterlitz-Thouless transition to quasi long-range order is observed – may cause a phase transition to long-range order in two dimensions. This is a genuine nonequilibrium phenomenon as the emergence of long-range order is impossible according to the Mermin-Wagner theorem in corresponding systems at thermodynamic equilibrium.

Zur Nichtgleichgewichtsstatistik selbst-angetriebener Teilchen

– vom Einzelteilchentransport zu emergenten, makroskopischen Strukturen –

Hans Robert Großmann

Kurzfassung

Die Strukturbildung von aktiver Materie ist ein Musterbeispiel für Selbstorganisation fernab des thermodynamischen Gleichgewichts. Unter aktiver Materie versteht man komplexe Systeme, welche aus selbst-angetriebenen Teilchen bestehen, die über die Fähigkeit verfügen Energie aus ihrer Umgebung in Bewegungsenergie umzuwandeln. Die vorliegende Arbeit trägt zur theoretischen Beschreibung von aktiver Materie bei. Das Hauptanliegen ist die Verbindung der Transporteigenschaften von Einzelteilchen mit dem kollektiven Verhalten, welches aus deren Interaktion resultiert. Dazu werden Gleichungen für Observablen ausgehend von teilchenbasierten Modellen abgeleitet, wodurch die Verknüpfung der Dynamik auf verschiedenen Längen- und Zeitskalen sowie unterschiedlichen Komplexitätsstufen ermöglicht wird.

Gegenstand des ersten Teils der Arbeit sind Diffusionseigenschaften einzelner selbst-angetriebener Teilchen. Ausgehend von einer geometrischen Betrachtungsweise wird ein Modell formuliert, welches die Bewegung dieser Teilchen in isotropen sowie anisotropen Umgebungen beschreibt. In diesem Zusammenhang werden mathematische Methoden der Theorie stochastischer Prozesse und der nichtlinearen Dynamik, die in der gesamten Arbeit Verwendung finden, illustriert. Weiterhin wird ein stochastisches Uhrenmodell vorgeschlagen, um z.B. zelluläre Prozesse, die Änderungen der Bewegungsrichtung kontrollieren, zu erfassen. Aus diesem Modell resultierende Vorhersagen werden mit Daten experimenteller Beobachtungen von Mikroorganismen verglichen und insbesondere die Existenz optimaler Parameterwerte im Sinne einer Maximierung des Diffusionskoeffizienten dargelegt.

Der zweite Teil der Arbeit befasst sich mit kinetischen und hydrodynamischen Theorien zur Beschreibung emergenter Strukturen in Systemen selbst-angetriebener Teilchen, deren Wechselwirkung durch Geschwindigkeitsgleichrichtung modelliert wird. Das Hauptaugenmerk dieser Untersuchungen liegt auf der Identifikation wesentlicher Interaktionsmechanismen, die zur Ausbildung raum-zeitlicher Strukturen führen. So wird die Entstehung der turbulenzähnlichen Wirbeldynamik, wie sie in Bakteriensuspensionen beobachtet wird, auf konkurrierende Ausrichtungswechselwirkungen bezüglich der Geschwindigkeit zurückgeführt. Ferner wird die durch Geschwindigkeitsgleichrichtung induzierte Aggregation von Teilchen, die zur Formation großskaliger, geordneter Dichtebänder führt, physikalisch als Nichtgleichgewichtsphasenseparation interpretiert. Mögliche Kontrollmechanismen dieser Musterbildung werden diskutiert.

Abschließend wird die generelle Frage besprochen, wie die Bewegung von lokal wechselwirkenden Entitäten, welche ein dynamisches Interaktionsnetzwerk hervorruft, die Stabilität von Orientierungsordnung in Nichtgleichgewichtssystemen beeinflusst. Zu diesem Zweck wird ein Ensemble von sich zufällig bewegenden Teilchen studiert, von denen jedes einen internen Freiheitsgrad trägt (Phasenoszillator bzw. klassischen Spinvektor), der sich den Teilchen der unmittelbaren Nachbarschaft angleicht. Bemerkenswerterweise vermag superdiffusiver Transport, im Gegensatz zur normalen Diffusion, für die ein Berezinskii-Kosterlitz-Thouless-Übergang vermittelt durch topologische Defekte beobachtet wird, einen Phasenübergang zu langreichweitiger Ordnung in zwei Raumdimensionen zu induzieren – ein reines Nichtgleichgewichtsphänomen, das gemäß dem Mermin-Wagner Theorem im thermodynamischen Gleichgewicht unmöglich wäre.