アクティブマター乱流のメゾスケール連続体モデル

荒木 亮

2020 年 9 月 6 日

目次

1　連続体モデル方程式の導出

本節では，先行研究 [1]（とその supplemental material [2]）および同じ著者らによる論文 [3] に基づいて，高密度なバクテリア懸濁液などのアクティブマターをよく記述する連続体モデルを導出する．

1.1　仮定とその正当化

連続体モデルを導出するために次を仮定する．

仮定 1. 十分に高密度なバクテリア懸濁液（や自己推進ロッド（*SPR*, ***S****elf* ***P****ropelled* ***R****ods*）の集合）は，非圧縮アクティブ流体としてよく近似できる．

仮定 2. バクテリア流体の本質的なダイナミクスは平均流速 $\boldsymbol{v}(t, \boldsymbol{x})$ で捉えられる [1]．

仮定 1 はバクテリア乱流の実験や SPR の数値計算において密度ゆらぎが小さいことから正当化できる．仮定 2 には議論の余地がある．アクティブマターはしばしば長距離相互作用をもち，このとき平均流速と平均の向きは decouple されているためである．しかし，十分に高密度な環境下ではこれらはよく couple する．そのため，仮定 2 は十分に高密度な環境で妥当としてよい．

[1] ここでの「平均」は粗視化して連続場として捉えるという意味か？

1.2 場の方程式

仮定 1 の非圧縮性は

$$\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{v}=\frac{\partial v_i}{\partial x_i}=0 \qquad i=1,\dots,d \tag{1}$$

で定義できる．ただし d は空間次元である．

平均流速 $\boldsymbol{v}$ は一般化された d 次元 Navier–Stokes 方程式

$$\frac{\partial\boldsymbol{v}}{\partial t}+\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{v}=-\boldsymbol{\nabla}p-(\alpha+\beta|\boldsymbol{v}|^2)\boldsymbol{v}+\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{E} \tag{2}$$

で記述される．p は圧力，α と β はパラメータで，$\boldsymbol{v}$ に依存するひずみ率テンソル（rate-of-strain tensor）$\boldsymbol{E}$ は以降で定義する．

$(\alpha+\beta|\boldsymbol{v}|^2)\boldsymbol{v}$ は Toner-Tu モデルでの局所駆動項である．安定性より $\beta\geq 0$ が要求されるが，α は正負どちらでも良い．$\alpha>0$ のときこの項は系を $\boldsymbol{v}=0$ の等方平衡状態へ駆動する．$\alpha<0$ かつ $\beta>0$ のとき，速度ポテンシャルは双安定となり

$$v_0=\sqrt{\frac{|a|}{\beta}} \tag{3}$$

なる特徴速さで決まる大域極秩序状態となる．

最後に対称かつトレースなしテンソル $\boldsymbol{E}$ について議論する．これを，active nematics の理論を元にして

$$E_{ij}=\Gamma_0\left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j}+\frac{\partial v_j}{\partial x_i}\right)-\Gamma_2\nabla^2\left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j}+\frac{\partial v_j}{\partial x_i}\right)+Sq_{ij} \tag{4}$$

と表現する．

$$q_{ij}=v_iv_j-\frac{\delta_{ij}}{d}|\boldsymbol{v}|^2 \tag{5}$$

は $\boldsymbol{Q}$ テンソルの平均場近似であり，アクティブ応力（active stress）の寄与を表す．$\gamma_0>0$ のとき $S=\Gamma_2=0$ ととれば，式 5 は通常の粘度 Γ_0 の rate-of-strain テンソルとなる．

安定性解析から，$\Gamma_0<0$ を許すとき $\Gamma_2>0$ である必要がある．また，$S>0$ は puller で $S<0$ は pusher なアクティブマターを表現する．

直感的には，Γ の項は応力テンソルの（$\boldsymbol{v}$ に対し線形な）機械的な展開から生じ，Γ_2 は長距離多粒子相関に対応すると理解できる．

式 4 を式 2 に代入して閉じた方程式が得られる．

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{E})_j&=\frac{\partial E_{ij}}{\partial x_i}=\Gamma_0\left(\frac{\partial v_i}{\partial x_ix_j}+\frac{\partial v_j}{\partial x_ix_i}\right)-\Gamma_2\nabla^2\left(\frac{\partial v_i}{\partial x_ix_j}+\frac{\partial v_j}{\partial x_ix_i}\right)+S\left(\frac{\partial v_iv_j}{\partial x_i}-\frac{\partial}{\partial x_i}\frac{\delta_{ij}}{d}|\boldsymbol{v}|^2\right)\\&=\Gamma_0\frac{\partial v_j}{\partial x_ix_i}-\Gamma_2\nabla^2\frac{\partial v_j}{\partial x_ix_i}+S\left(\frac{\partial v_iv_j}{\partial x_i}-\frac{\partial}{\partial x_j}\frac{1}{d}|\boldsymbol{v}|^2\right)\\\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{E}&=\Gamma_0\nabla^2\boldsymbol{v}-\Gamma_2\left(\nabla^2\right)^2\boldsymbol{v}+S(\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{\nabla})\boldsymbol{v}-\frac{S}{d}\boldsymbol{\nabla}|\boldsymbol{v}|^2\end{aligned}$$

ここで

$$\lambda_0=1-S \qquad \lambda_1=-\frac{S}{d} \tag{6}$$

とおけば,

$$\frac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial t} + \lambda_0 \boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{v} = -\boldsymbol{\nabla} p + \lambda_1 \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{v}^2 - (\alpha + \beta |\boldsymbol{v}|^2) \boldsymbol{v} + \Gamma_0 \nabla^2 \boldsymbol{v} - \Gamma_2 \big(\nabla^2\big)^2 \boldsymbol{v} \tag{7}$$

をえる.

Γ の項は Swift–Hohenberg 理論における高次微分項と似ており，このモデルにおいて準カオス的な流れパターンを作り出すために不可欠な項である.

2　2 次元安定性解析

3　方程式の無次元化

4　渦度方程式の導出

5　Fourier スペクトル法を用いた数値計算に向けて

参考文献

[1] Henricus H Wensink et al. Meso-scale turbulence in living fluids. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* 109.36 (2012).

[2] Henricus H Wensink, Julia M Yeomans, and Raymond E Goldstein. Supporting Information Appendix : Meso-scale turbulence in living fluids. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* (2012), pp. 1–9.

[3] Jörn Dunkel et al. Minimal continuum theories of structure formation in dense active fluids. *New J. Phys.* 15.22pp (2013), p. 45016.