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].

[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？

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．

1.2　場の方程式

仮定 1 の非圧縮性は

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

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

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

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

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

と表現する．

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

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．

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

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

本節では，このモデルを二次元で解いて乱流パターン形成について調べた先行研究 [2] [4, 脚注 28] を参考に，連続モデル方程式 7 の無次元化をおこなう．

まず，λ_1 の項を圧力項にくりこむ．つまり，$p - \lambda_1\boldsymbol{v}^2 \to p$ とすれば $-\boldsymbol{\nabla}p + \lambda_1\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{v}^2 \to \boldsymbol{\nabla}p$ となる．これにより，式 7 は

$$\frac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial t} + \lambda_0 \boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{v} = -\boldsymbol{\nabla}p - (\alpha+\beta|\boldsymbol{v}|^2)\boldsymbol{v} + \Gamma_0\nabla^2\boldsymbol{v} - \Gamma_2\big(\nabla^2\big)^2\boldsymbol{v} \tag{8}$$

となる．

続いて，時間スケール $T = 4\Gamma_2/\Gamma_0^2$ と長さスケール $L = \sqrt{-2\Gamma_2/\Gamma_0}$ を導入し，方程式を無次元化する [3]．

$$\frac{\partial}{\partial t} \to \frac{1}{T}\frac{\partial}{\partial t}, \qquad \boldsymbol{v} \to \frac{L}{T}\boldsymbol{v}, \qquad \boldsymbol{\nabla} \to \frac{1}{L}\boldsymbol{\nabla}, \qquad p \to \frac{L^2}{T^2}p \tag{9}$$

これによって式 8 を無次元化していく．

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial t} \to \dfrac{L}{T^2}\dfrac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial t} \\ \lambda_0\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{v} \to \lambda_0\dfrac{L}{T^2}\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{v} \\ \boldsymbol{\nabla}p \to \dfrac{L}{T^2}\boldsymbol{\nabla}p \\ (\alpha+\beta|\boldsymbol{v}|^2)\boldsymbol{v} \to \left(\alpha\dfrac{L}{T} + \beta\dfrac{L^3}{T^3}|\boldsymbol{v}|^2\right)\boldsymbol{v} \\ \Gamma_0\nabla^2\boldsymbol{v} \to \Gamma_0\dfrac{1}{LT}\nabla^2\boldsymbol{v} \\ \Gamma_2\big(\nabla^2\big)^2\boldsymbol{v} \to \Gamma_2\dfrac{1}{L^3T}\big(\nabla^2\big)^2\boldsymbol{v} \end{cases}$$

[2]第二著者に W. Bos が入っている

[3]この量はどこから出てくる？ 安定性解析？

全ての項に（時間微分項の係数の逆数である）T^2/L を乗じて，

$$\begin{aligned}\frac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial t} + \lambda_0 \boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{v} =& -\boldsymbol{\nabla}p - \left(\alpha T + \beta\frac{L^2}{T}|\boldsymbol{v}|^2\right)\boldsymbol{v} \\ &+ \Gamma_0\frac{T}{L^2}\nabla^2\boldsymbol{v} - \Gamma_2\frac{T}{L^4}\left(\nabla^2\right)^2\boldsymbol{v}\end{aligned} \tag{10}$$

となる．よって，先行研究の脚注 [4, 脚注 28] にあるように

$$\lambda_0 \to \lambda, \qquad \alpha T \to \alpha + 1, \qquad \beta\frac{L^2}{T} \to \beta, \qquad \Gamma_0\frac{T}{L^2} \to -2, \qquad \Gamma_2\frac{T}{L^4} \to 1 \tag{11}$$

と書き直して

$$\begin{aligned}\frac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial t} + \lambda\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{v} &= -\boldsymbol{\nabla}p - (\alpha+1)\boldsymbol{v} - \beta|\boldsymbol{v}|^2\boldsymbol{v} - 2\nabla^2\boldsymbol{v} - \left(\nabla^2\right)^2\boldsymbol{v} \\ &= -\boldsymbol{\nabla}p - \left(1+\nabla^2\right)^2\boldsymbol{v} - \alpha\boldsymbol{v} - \beta|\boldsymbol{v}|^2\boldsymbol{v}\end{aligned} \tag{12}$$

となる．式 7 にあったパラメータのうち，λ_1 と (Γ_0, Γ_2) がそれぞれ圧力 p へのくりこみと勝手な変数変換によって消えていることに注意する [4]．

4　渦度方程式の導出

一般に，数値流体力学において圧力を解くのはきわめて大変である．これは，圧力勾配の評価が非圧縮性と関係しており，圧力の Poisson 方程式を解くためには全空間の情報が必要なためである．しかし，圧力 p はスカラー場であることから，圧力勾配の rot をとると 0 になることが分かる．

$$\boldsymbol{\nabla}\times[\boldsymbol{\nabla}p] = \varepsilon_{ijk}\frac{\partial^2 p}{\partial x_j \partial x_k} = 0 \tag{13}$$

ここで ε_{ijk} は Levi–Civita 記号（Eddington のイプシロン）である．

これを利用して，無次元化された支配方程式 12 の渦度方程式を考える [5, S1]．各項の rot を考えると，

$$\begin{cases}\boldsymbol{\nabla}\times\left[\dfrac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial t}\right] = \dfrac{\partial \boldsymbol{\omega}}{\partial t} \\ \boldsymbol{\nabla}\times[\lambda\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{v}] = \lambda\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{\omega} - \lambda\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{v} \\ \boldsymbol{\nabla}\times[\boldsymbol{\nabla}p] = 0 \\ \boldsymbol{\nabla}\times\left[\left(1+\nabla^2\right)^2\boldsymbol{v}\right] = \left(1+\nabla^2\right)^2\boldsymbol{\omega} \\ \boldsymbol{\nabla}\times[\alpha\boldsymbol{v}] = \alpha\boldsymbol{\omega} \\ \boldsymbol{\nabla}\times\left[\beta|\boldsymbol{v}|^2\boldsymbol{v}\right] = \beta\boldsymbol{\nabla}\times\left(|\boldsymbol{v}|^2\boldsymbol{v}\right)\end{cases}$$

よって，渦度方程式は

$$\frac{\partial \boldsymbol{\omega}}{\partial t} + \lambda\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{\omega} = \lambda\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{v} - \left(1+\nabla^2\right)^2\boldsymbol{\omega} - \alpha\boldsymbol{\omega} - \beta\boldsymbol{\nabla}\times\left(|\boldsymbol{v}|^2\boldsymbol{v}\right) \tag{14}$$

となる [5]．

[4] これらの操作の妥当性？ とくに Γ の項を定数としているのはよいのか？

[5] 文献 [5, S1] で $\lambda\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{v}$ の項が無いのは二次元で考えているから？（$\because \omega_z$ と $\boldsymbol{\nabla}$ が直交するので $\lambda\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{v} = 0$）

5 Fourier スペクトル法を用いた数値計算に向けて

5.1 Fourier スペクトル法のアルゴリズム

Fourier スペクトル法では，式 14 の渦度 $\boldsymbol{\omega}$ を Fourier 展開して波数空間で時間発展をおこなう．ただし，非線形項の評価を波数空間でおこなうと総波数モードを N として N^2 の演算が必要となり，非効率的である．この問題は，FFT（高速 Fourier 変換，**F**ast **F**ourier **T**ransform）を用いて物理量を実空間に写して非線形項を評価することで $N \log N$ の演算量となり解決できる．

5.2 Dealiasing について

また，非線形項の評価にともなって生じる alias 誤差を除去するために 2/3 則 [6]や 3/2 則 [7] をもちいて dealiasing をおこなう．

※N–S 方程式は 2 次の非線形性なので 2/3 則あるいは 3/2 則で良い．今回のモデルは 3 次の非線形性をもつため，dealiasing 手法についてよく考える必要がある [8]．

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.

[4] Martin James, Wouter J.T. Bos, and Michael Wilczek. Turbulence and turbulent pattern formation in a minimal model for active fluids. *Phys. Rev. Fluids* 3.6 (2017).

[5] Martin James, Wouter J.T. Bos, and Michael Wilczek. Supplemental Material: Turbulence and turbulent pattern formation in a minimal model for active fluids. *Phys. Rev. Fluids* 3.6 (2017).

[6] 波数モードのうち低波数の 2/3 側のみを用いて非線形項を評価することで，本来定義しているよりも高次モードが発生することを防ぐ

[7] 非線形項の評価の際，本来の定義の 3/2 倍のモードを用意して計算することで「折り返し」によって低波数側に誤差が伝播することを防ぐ

[8] 文献 [5] では “1/2 dealiasing” を実装している？