

# 自由エネルギーから見るアクティブマターの流体モデル

東京大学 理学部物理学科 4年 永山龍那

2021年5月16日

## 目次

1	<b>はじめに</b>	2
2	<b>自由エネルギー</b>	4
2.1	平衡状態と自由エネルギー	4
2.2	相転移とランダウの擬似自由エネルギー	5
2.3	秩序パラメータの時間発展	7
3	<b>ネマチック液晶の自由エネルギー</b>	9
3.1	ネマチック液晶	9
3.2	スカラー, ベクトル, テンソル	9
3.3	配向ベクトルと秩序パラメータ	10
3.4	ネマチック相の自由エネルギー	12
3.5	等方液体相の自由エネルギー	14
4	<b>非平衡系と Euler 方程式</b>	17
4.1	流体力学における Euler 方程式の導出	17
4.2	局所平衡状態と Euler 方程式	19
5	<b>アクティブマター</b>	20
5.1	アクティブマター物理学	20
5.2	アクティブマターのモデル化と分類	20
5.3	離散的な記述	21
5.4	連続場による記述	23
6	<b>流体モデルの数値計算</b>	29
6.1	Toner-Tu モデルの簡易化	29
6.2	数値計算の手法	29
6.3	数値計算の結果	32
7	<b>おわりに</b>	33
7.1	今後の課題	33
7.2	謝辞	33
8	<b>参考文献</b>	34

# 1 はじめに

アクティブマターは現在研究が進んでいる非平衡系の一分野である。蚊柱やイワシの群れ、そして夕方に空を飛ぶ鳥の一群は身近な対象であり、これらが最先端の物理に繋がっているのはとても興味深い。アクティブマターの構成要素として扱われるのは小さいものでもバクテリアや人工的に作られたコロイド粒子であり、固体中の電子や宇宙から飛んでくる素粒子に比べて十分マクロである。したがって少なくとも本稿で扱う範囲では量子力学は（強磁性体の議論でスピンの言及することを除けば）現れない。量子力学なしに物理の最先端に迫れる例はそれなりに珍しいのではないだろうか。けれどもこれは、アクティブマターの物理学が簡単に理解できることを意味しない。実際にアクティブマターの理論で登場する最も基本的な式「Toner-Tu モデル」を下図に示そう\*1。

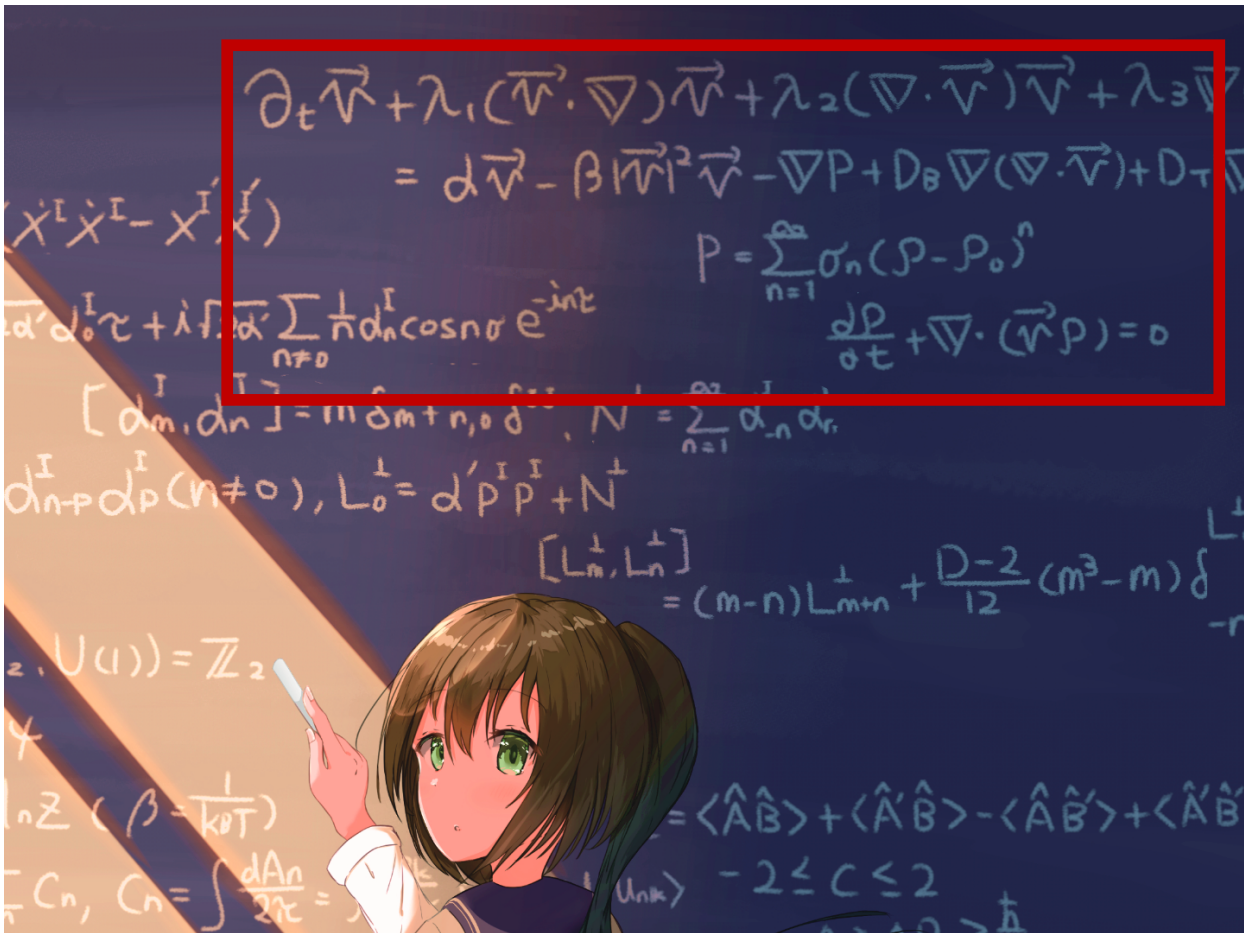


図1 Physics Lab2021 の広報ポスターの一部。Toner-Tu モデルは背景右上（赤枠内）に書かれている。

物理を学ぶ上で重要になるのは式の意味を捉えることである。けれどもどう見てもこれは予備知識無しで手に負える形ではない。凶悪すぎる。実際に式の意味を理解するためには、熱力学で現れる自由エネルギーと相転移の理論に加え、ある程度の流体の理論と液晶に関する物理学の知識、そして何よりそのような議論を展開する上で必要不可欠な対称性の考え方が必要になる。これらの予備知識のほとんどは、高校では勿論大学でも取り扱わないようなものになっている。アクティブマターの文献でこれらの予備知識が詳細に解説されることは基本的になく、日本語の文献に至ってはほとんど存在しない\*2。これも学習を阻むかもしれない。実際自分たちがゼミでアクティブマターを学び始めた際も、式の各項の詳しい意味や導出の議論の正当性をほとんど理解できなかつたと言ってよいだろう。そこでこの PDF では、大学初年次程度の熱力学の知識と、ある程度の統計力学の知見、そして電磁気学で用いる程度のベクトル解析（特に積分ではなく  $\nabla$  を用いた微分）を前提として、Toner-Tu モデルを理解しながら導出することを目標に据えた\*3。勿論意欲的な高校生の

\*1 図は Physics Lab2021 の広報ポスターの一部である。かわいらしいキャラクターが黒板に複雑怪奇な数式を書き並べているイラストは Twitter で公開されると同時に大きな反響を呼んだ。中には式の名前を当てる猛者もいたが、Toner-Tu モデルに言及した（関係者以外の）人は見受けられなかった。悲しいですね。ただし自分も他の班の数式のほとんどはよく知らない。

\*2 これはそもそもアクティブマターを研究しようとする人にとってこの程度の予備知識は標準装備であることが最大の原因であると思われる。

\*3 何を隠そう約一年前に始まったアクティブマター班のゼミで初めに自分が担当したのが Toner-Tu モデルであった。当時は知識不足でうまく

皆さんにとっても、物理学の面白さに気づく一助になれば幸いである。数式の登場しない部分はおそらく難しい前提知識がなくても表面的には読めるだろうし、周囲に数学や物理のできる先輩や同級生、あるいは気軽に相談・議論できる先生などがいれば、数式を追うこともできるかもしれない\*4。最後に本稿の構成について述べておく。まずは熱力学第二法則を復習し、自由エネルギーを導入する。次に相転移とランダウ理論を解説し、TDGL 方程式を紹介する。その後アクティブマターに必要なネマチック液晶の自由エネルギーについて述べ、これらの準備の元でアクティブマターの内容に入る。そして、得られた全ての知見を総動員して Toner-Tu モデルを導く。最後の章では誰でも手元で行える数値計算を紹介して、導いたモデルで遊べるようにした。また、文献とその紹介を巻末に付してあるので、更なる学習や不明瞭な箇所を補うために活用していただきたい。

---

説明できなかった。当時の自分に贈るつもりで本稿を構成している。

\*4 勿論これを読もうとしている高校生の中には自分より物理の得意な人もいるに違いない。そういう人はこれをバリバリ読み進めて議論や思索の材料にしよう。

## 2 自由エネルギー

### 2.1 平衡状態と自由エネルギー

ヘルムホルツの自由エネルギー  $F$  を系の温度  $T$ , 体積  $V$ , 粒子数  $N$ , エントロピー  $S$ , エネルギー  $U$  を用いて

$$F(T, V, N) = U - TS \quad (1)$$

と定義しよう。この自由エネルギーの物理的意味を考えるため、温度  $T$  の熱浴に接した熱力学的な系  $s$  を考える。  $s$  が状態  $A$  から別の状態  $B$  に変化した際に外界にする仕事  $W$  は、もし  $s$  が単純な力学のみによる系であれば

$$W = -\Delta U = -\int_{A \rightarrow B} dU = -(U(B) - U(A)) \quad (2)$$

とかけるであろう。ところが  $s$  は熱力学的な系であるから熱のやりとりを考える必要がある

$$W = -\Delta U + \Delta Q \quad (3)$$

である。持って回った言い方をしたが、これはつまり熱力学第一法則である。また、熱力学第二法則を用いれば

$$\Delta Q = \int_{A \rightarrow B} dQ = T \int_{A \rightarrow B} \frac{dQ}{T} \leq T(S(B) - S(A)) \quad (4)$$

ただしここで系  $s$  が一定温度の熱浴に接していることを用いた。この不等式を用いれば

$$W \leq -(U(B) - U(A)) + T(S(B) - S(A)) = -(F(B) - F(A)) = -\Delta F \quad (5)$$

である。自由エネルギーの変化が等温過程で系が行う仕事の上限を表しているのである。また、この不等式の等号が成立するのはクラウジウスの不等式の等号が成立する場合、すなわち可逆過程の場合である。さらに、系が外部に仕事をしない場合を考えよう。(そのような条件の一例として系の体積が一定で圧力が一様な場合がある。) この時すでに得られた仕事についての不等式から

$$\Delta F \leq 0 \quad (6)$$

つまり、仕事を外界に行わない系のヘルムホルツ自由エネルギーは等温過程において単調に減少する。ここでヘルムホルツ自由エネルギーの引数のうち、示量変数をまとめて  $X$  と書くことにして、自由エネルギー  $F(T, X_1)$  を持つ系と  $F(T, X_2)$  を持つ系を温度  $T$  に保ち、外部に仕事ができないようにしたままで  $\lambda : 1 - \lambda$  ( $0 \leq \lambda \leq 1$ ) の比率で混合した場合を考えよう。すると外界に仕事をしない等温過程でヘルムホルツ自由エネルギーが単調減少することから、

$$F(T, \lambda X_1 + (1 - \lambda) X_2) \leq \lambda F(T, X_1) + (1 - \lambda) F(T, X_2) \quad (7)$$

が成り立つ。これはまさに自由エネルギーが示量変数について下に凸であることを示している。つまり、自由エネルギーが単調に減少した際に最終的に辿り着く状態は、与えられた条件の元での最小値である。結局系のヘルムホルツ自由エネルギーが明らかになればその最小値を求めることで系の平衡状態を予言できる。ただし熱力学のみからは系の自由エネルギーはわからないので自由エネルギーは統計力学から求めるか、あるいは現象論的に(系の振る舞いをよく説明し、かつ他の理論と矛盾しないように)定めるしかない。ただし現象論的に求めた自由エネルギーは、 $\lambda : 1 - \lambda$  ( $0 \leq \lambda \leq 1$ ) の比率での混合に対して示量的に振る舞う変数について下に凸にならない場合がある。極小値を複数持つような場合がこれに当たる。

本解説では主に現象論的な立場から自由エネルギーを定めることになるが、統計力学から定める場合には分配関数  $Z$  を用いて

$$F = -\frac{1}{\beta} \ln Z \quad (8)$$

とすれば良い。これはエントロピーと状態数を結びつけるボルツマンの式から得られる。<sup>\*5</sup> 系の分配関数が計算できる場合には便利な表式と言えるだろう。

---

<sup>\*5</sup> 統計力学においてどこで熱力学と整合性をとるかで話は変わってくる

自由エネルギーの最小値でない極小値の扱いについても述べておこう。平衡状態を議論したい場合には後で具体的な例を用いて見るように、極小値を共通接線で結んで熱力学的に正しい下に凸な自由エネルギーを求めれば良いのであった。ここで議論を非平衡系に拡張すれば最小値ではない極小値を準安定状態とみなすことができる。つまり熱揺らぎなどによって最小値と間のエネルギーの壁を越えるまで、系は自由エネルギー極小値の状態に留まると考えるのである。もちろん熱力学は平衡状態に対する理論なのでこのような描像が正しいとは言いきれない（気がする）のだが、身近にもこのような極小値に対応する状態は存在している。それが過冷却や過熱である。これらを水を例にとって解説しておく。水をゆっくり冷却した場合には  $0^{\circ}\text{C}$  より低い温度でも氷にならない場合がある。これが水の過冷却状態である。このような状態にある水は振動や不純物を混ぜるなどのわずかな刺激で凍結する。逆に水をゆっくり熱すると  $100^{\circ}\text{C}$  を超えても沸騰しない場合がある。この場合もわずかな刺激で急激に沸騰する。小学校（中学校？）の理科で出てきた「突沸」\*6は、この過熱状態からの急激な沸騰のことである。準安定状態から平衡状態への相転移は「核の形成」を考慮することで議論できる。ゆらぎによって準安定状態の様な相の中に小さな新しい相の核（例えば過熱液体中の気泡）が現れることがある。この核の大きさが一定を超えるとこの核が中心となって新たな相が形成される。なお実際には物質は必ずしも純粋ではなく、このような核は様な相の中に入り込んだ不純物などを中心に形成される。例えば雪の結晶はほこりや花粉といった空気中の微粒子を核にしていることがよく知られている\*7。また、沸騰石は多孔質であり、その内部に閉じ込められた小さな気泡が液体相中の気泡、つまり新しい相の核として働くことで液体の突沸を防いでいる。

## 2.2 相転移とランダウの擬似自由エネルギー

相転移の身近な\*8例はやはり水\*9、氷、水蒸気の転移であろう。しかし実際のところ、これらの相（ここでは気体、液体、固体）をどのように分類すれば良いのだろうか。気体と液体については、よく知られているように密度による分類が可能であるが、液体と固体の分類は困難に見える\*10。そこで活躍する概念が対称性である。まずは水、あるいはより一般に等方的な液体を考え、ある瞬間における分子たちの様子のスナップショットを撮ろう。例えばこのスナップショットを平行移動させたり回転させたりしても、その概観は変わらない。これをもって等方的な液体は連続回転・連続並進の対称性を持つという。次に固体を考えて、やはり分子たちのスナップショットを撮ってみよう。これを回転させると、ある角度での回転では元のスナップショットに一致するが、別の角度では一致しない。これは連続回転の対称性が破れ、離散的な回転の対称性が現れていることを示している。並進に対しても同様で、ある距離だけスナップショットを平行移動させると元のスナップショットに一致するが、それを少しずらすと一致なくなってしまう。これは連続並進の対称性が破れ、離散並進対称性が現れていることを示している。結局、液体と固体では対称性が異なることがわかった\*11。ただし実際の順序はむしろ逆で、密度によらずとも対称性の変化によって相を分類できるのである\*12。その対称性の変化こそが相転移であるから、より乱暴な言い回しを用いれば相転移こそが相を定めるのである\*13。対称性が高い、低いという言い回しがよく用いられるが、上の例では液体相の対称性が高く固体相の対称性が低い。一般に対称性が低い相ほど秩序立って見えるため、そのような相を秩序相と呼ぶことがある。

さて、相転移はやはり自由エネルギーによって特徴付けられる。例えば相転移の分類に一次相転移と二次相転移があるが、これらはそれぞれ自由エネルギーの一階微分が不連続になる相転移と二階微分が不連続になる相転移を指している。液晶の例で見るとこれらの相転移の肉眼で見える最大の違いとして、相転移によって分けられる二相の共存の

---

\*6 みなさんも「沸騰石を入れるのは何故ですか?」「突沸を防ぐため!」といったやり取りをテストの紙面上でやったことがあるのではないだろうか。

\*7 本当か? こういう自分が当たり前だと思っていたことが嘘だったパターンがいくつもあるので怖くなってきたな。

\*8 身近などと言っているがその実態は未解決問題である

\*9 以下、 $\text{H}_2\text{O}$  の液体を水と呼称する。

\*10 固体の方が密度が高い気がするが、これは一般的には成り立たない。実際水の密度よりも氷の密度が大きいことはよく知られている。

\*11 この議論は少々ざっくりしていてわかりにくいと思うかもしれない。より厳密には対称性は次のような形で記述される。「ある群  $G$  で記述される変換に対して系が不変であるならば、系が  $G$  対称性を持つ。」詳しくは『液晶の物理』(折原, 2004.) や『理論物理学教程 量子力学 2』(ランダウ&リフシッツ, 1970.), その他物理と群をテーマにした文献を読むとよい。

\*12 密度がそうであるように、対称性以外の指標を用いて記述される相や相転移がある。Physics Lab2021 物性班の記事にトポロジカル相の記事があるが、これは対称性以外で記述される相の一例であろう。ただし自分は発展的な物性理論の話題には明るくないので、気になる方は物性班の記事を参照していただきたい。

\*13 気液の相転移は少し厄介である。この二相は同じ対称性をもち、密度のみが異なる。もちろん普通の環境では密度が不連続に変化する一次相転移が見られるのだが、水の相図を思い出しうまく圧力と温度を調節すれば、臨界点を回り込んで（つまり超臨界流体という気液の区別がない状態を経由して）相転移なしに気相と液相を行き来できる。固体と液体の間の相転移も動かす変数を増やすことでなかったことのできるが、変数の組を温度と圧力の二つに限ればそれは不可能である。

有無がある。一次相転移である水の沸騰を考えると、相転移が起きる温度（転移温度）では水と水蒸気が共に存在しうが、二次相転移では系は常にどちらか一方の相をとる。以下では、今紹介したような相転移の様子を自由エネルギーを用いて現象論的に記述する方法を考えよう。これまでは自由エネルギーの引数として  $T, V, N$  を考えてきたが、実際には同じ体積、粒子数であっても、系の状態（例えば化学反応の進み具合、分子の並び方や向き）によって内部エネルギーやエントロピー、ひいては自由エネルギーの値が変わりうる。相転移を記述する際、系の状態を表すパラメータとしてよく使われるのが秩序パラメータ  $\eta$  である。 $\eta$  は対称性が高い相で 0、低い相で 1 あるいは絶対値が大きい値にとることが多い。<sup>\*14</sup> また、 $\eta$  は  $\lambda:1-\lambda$  ( $0 \leq \lambda \leq 1$ ) の比率で混合した場合には示量的に振る舞うことが期待される。もう一つ注意すべき点として、平衡状態の  $\eta$  は  $T, V, N$  を決めれば自由エネルギーを最小化することで自動的に定まる。つまり  $\eta$  は  $T, V, N$  と独立ではないのである。ランダウは相転移を議論するために、相転移が起きる温度の近傍では（そしてもちろん系が対称性の高い相にあり、そこに揺らぎが加わった時には） $\eta$  が十分小さく自由エネルギーを  $\eta$  で展開できると考えた。<sup>\*15\*16</sup> そこで  $V$  と  $N$  を定数とみなして自由エネルギーが温度と秩序パラメータのみに依存すると考えれば、

$$F(T, \eta) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k(T) \eta^k \quad (9)$$

もちろん  $\eta$  の絶対値が小さい場合のみを考えているので低次の項が残れば高次の項は無視できる。また、残す項の次数は対称性によって決定し、係数の符号や形は現象論的に定める。ただし定数項はエネルギーの原点を適当に取り替えることで 0 にできる。また、既に言及したように平衡状態における  $\eta$  は

$$\frac{\partial F}{\partial \eta} = \sum_{k=1}^{\infty} k a_k(T) \eta^{k-1} = 0 \quad (10)$$

を満たすのであった。ところが  $a_1(T) \neq 0$  の場合には

$$\frac{\partial F}{\partial \eta}(T, \eta = 0) = a_1(T) \neq 0 \quad (11)$$

となり、展開した  $F$  の元で  $\eta = 0$  の状態が平衡状態として実現することはあり得なくなってしまう。これでは  $\eta = 0$  の状態と  $\eta$  が有限の値を持つ<sup>\*17</sup>状態の間の相転移を記述できない。対称性から計算した場合も  $\eta$  について線形になる項は現れないことが示唆される<sup>\*18</sup>。

このような展開の具体例として、強磁性体の自由エネルギーを考えよう。強磁性体は低温においてはスピンの揃うことで自発磁化をもち、転移温度  $T_c$  以上ではスピンの向きが無秩序になり常磁性（外場がなければ磁化が 0 になる性質）を示す物体である。ここで強磁性体の磁化を  $m$  とおくと、低温ではこれが 0 でない値<sup>\*19</sup> となり、高温では  $m = 0$  となることが期待される。スピンの向きが無秩序になると系をひっくり返してもその性質は変化せず対称性が低温の場合より高くなるので  $m$  は（秩序相で正負両方の値を示しうるものの）秩序パラメータの一例となっている。そこで自由エネルギーを  $m$  で展開することにしよう。秩序相においては  $m$  は  $\pm 1$  の両方を取り得るがやはり系の上下をひっくり返せばそれらは同じ状態であるから、 $F(m) = F(-m)$  である。したがって  $F$  の  $m$  による展開は  $m$  の偶数次の項のみを含む。既に一般的な場合で述べたように、エネルギーの原点をずらすことで自由エネルギーの定数項を取り除けば、

$$F(T, m) = A(T)m^2 + B(T)m^4 \quad (12)$$

既にみたように平衡状態では自由エネルギーを最小にする状態が実現する。もし  $B < 0$  とすると  $m$  を大きく、あるいは小さくすることで自由エネルギーをいくらでも小さくすることができてしまうので現象の記述には不適当である。そ

\*14 より正確には  $\eta$  が 0 から少しでも離れれば対称性が失われる。

\*15 正確にはこれが正当化されるのは二次相転移の場合に限られる。ただし一次相転移も同様の手法で記述できる場合がある。

\*16 実際には相転移が起きる温度で自由エネルギーの微分には特異性が生じるため転移温度を跨ぐ展開には注意が必要である。また、理論物理学教程ではギブスの自由エネルギーを展開している。これは定圧の元での化学反応を意識していると思われる。

\*17 これは物理学でよく見られる言い回しで、値が 0 でないことを意味する。

\*18 具体的な系によらず一般的に議論する方法はある。例えば『理論物理学教程 統計物理学第 3 版 下』（ランダウ& リフシッツ、2019）の 145 章「第 2 種の相転移に伴う対称性の変化」を参照せよ。例によって前提知識マシマシ行間多めで、できれば噛み砕いて解説したかったがその時間はなさそうである。群の定義から始めてははこの PDF の分量が 2 倍以上になってしまう！

\*19 ここではスピンは各点で上下のどちらかをとるものとし、 $m > 0$  ではスピンの平均的に上向きに揃っており、 $m < 0$  ではスピンの平均的に下向きに揃っていると考えよう。絶対零度ではスピンの向きが完全に揃い  $m = \pm 1$  となる。

ここで  $B > 0$  を課す.  $A$  は現象に合わせて定める. ここでは仮に  $a > 0$  を用いて  $A = a(T - T^*)$  と置いてみよう. すると平衡状態における  $m$  が満たす条件式は

$$\frac{\partial F}{\partial m} = m \{4Bm^2 + 2a(T - T^*)\} = 0 \quad (13)$$

と書ける.  $T \geq T^*$  の場合は  $m = 0$  のみがこの式を満たす. 一方で  $T < T^*$  では  $m = 0$  の他に  $m = \pm \sqrt{a(T^* - T)/2B}$  がこの式を満たす. 実際に平衡状態で実現する  $m$  を知るためには  $F(m)$  のグラフを描くのが良い.  $T \geq T^*$  であれば  $F$  は下に凸で  $m = 0$  が十分小さく自由エネルギーを最小にする.  $T < T^*$  の場合には  $m = 0$  が極大値,  $m = \pm \sqrt{a(T^* - T)/2B}$  が二つの同じ値を持つ極小値 (最小値) に対応する. 正の  $m$  はスピンの上向き状態, 負の  $m$  はスピンが下向き状態を表している. 結局このように  $A$  を定めて  $T^* = T_c$  と置くことで強磁性体の相転移を記述することができた<sup>\*20\*21</sup>. ところで, ここまでの計算では  $T < T_c$  の場合に自由エネルギーが下に凸とならず, これは熱力学から得られる事実と反する. このために, 今扱った自由エネルギーを擬自由エネルギーと呼ぶことがある. 擬自由エネルギーから熱力学的に正しい自由エネルギーを得るためには<sup>\*22</sup>, 隣あう極小値同士を共通接線で結べば良い. つまり実際には  $T < T_c$  では  $m$  の正負が異なる二種類の秩序相が共存した状態が実現するのだと考える. 二次相転移においては秩序相同士の共存しか考えられないが, 一次相転移の擬自由エネルギーに対して同様の議論を行うことで対称性の高い相と低い相の共存を説明することができる. このような例については, 実際に液晶の議論を行う際にみることにする.

## 2.3 秩序パラメータの時間発展

秩序パラメータが位置に依存する場合を考えよう. つまりここでは  $\eta = \eta(\mathbf{r})$  である.  $\eta$  が小さい場合を考えて自由エネルギーを展開したいが, 系の位置によって秩序パラメータの値は変化してしまう. そこで自由エネルギーが定められる程度に大きく秩序パラメータが変化しない程度に小さい領域  $\Delta V$  とその中の自由エネルギー  $\Delta F$  を用いて定められる自由エネルギー密度  $f_d = \Delta F/\Delta V$  を  $\eta(\mathbf{r})$  で展開することにしよう. これを実行すると, 自由エネルギーは秩序パラメータ (位置に依存する関数) の汎関数として

$$F[\eta(\mathbf{r})] = \int_{\text{系内}} f_d(\eta(\mathbf{r})) d\mathbf{r} \quad (14)$$

と書ける. さて,  $\eta$  が位置に依存するために  $f_d$  の展開には  $\eta$  の累乗のみならず  $\eta(\mathbf{r})$  の微分の項が登場する. 液晶の自由エネルギーを考える際の議論と全く同様なので詳しくは割愛するが, 自由エネルギーは系の対称性を保つ変換に対してスカラー量である必要があるので登場する項の形はある程度限定される. さらに, 自由エネルギー密度を考える領域を定めた際の議論を思い出すと,  $\eta$  は微小体積内では大きく変化せず, 空間微分は大きくないことが期待されるので,  $\eta$  の  $k$  階の空間微分は  $k$  次の微小量となる. また, 部分積分を用いて表面積分になる項については, 物質内部の自由エネルギーを考える上では無視できるので, このことから登場する項が絞り込める. 結局もっとも低次の近似で, テンソル量の係数が登場しない場合 ( $\eta = 0$  のときに立方対称である場合) には,

$$f_d(\eta(\mathbf{r})) = a\eta^2 + \mathcal{O}(\eta^3) + g(\nabla\eta)^2 \quad (15)$$

なる展開が得られる. ただしここで  $g$  を負にとると,  $\eta$  が空間的に乱れるほど自由エネルギーが小さくなり, 系が一様な状態が平衡状態として出現しなくなるため,  $g > 0$  を課す. これは秩序パラメータが空間的に揃うほど安定になることを意味している. ここで, 系に熱揺らぎがある非平衡状態を考えよう. このとき  $\eta$  は時間によって変化する. 熱揺らぎがある以上この変化にはランダムな項が加わる. また, 自由エネルギーがより小さい状態が安定であるから, 自由エネルギーが減少するような向きに  $\eta$  が変化するはずである.

ここで,  $\eta$  が従う式を得る前に熱揺らぎと粘性抵抗を受ける 1 次元自由粒子の従う式を見ておく. 抵抗力は速度に比例するのでその係数を  $\gamma$  とし, 時間相関のないガウス分布に従うランダム変数を  $\zeta(t)$  とするとこのような粒子の運動方程

\*20 本質的にはパラメータ (ここでは温度) によってグラフの概形が劇的に変わることが大事である. 力学系分野の言葉を使えば分岐が重要ということである. より複雑な分岐が微分方程式の解の挙動を変え, それによって系の振動や協調などを記述するような例が生物物理には無数にある.

\*21 これはイジング模型の平均場近似と等価である. 実際に平均場近似したイジング模型の分配関数から自由エネルギーを計算し,  $m$  が小さいとして展開すると, 同様の自由エネルギーが得られる. 詳しくは Physics Lab2021 物性班の記事を参照すると良いだろう.

\*22 もっとも, 今回考えた展開は転移温度付近の秩序パラメータが 0 に近い場所では成り立たないことに注意する必要がある.

式は次のように書き下せる.

$$m \frac{d^2x}{dt^2} = -\gamma \frac{dx}{dt} + \zeta(t) \quad (16)$$

この方程式をランジュバン方程式という. これはブラウン運動のモデル化であり, 非平衡系を記述する最も簡単な方程式の一つである. 以下では簡単のため質量  $m = 1$  とし,  $x$  の代わりにその時間全微分  $v$  を使う. ハミルトニアン  $H = v^2/2$  も使って粒子の運動方程式を書き直せば

$$\frac{dv}{dt} = -\gamma \frac{\partial H}{\partial v} + \zeta(t) \quad (17)$$

これは速度が粘性抵抗によるエネルギーを小さくするような影響と熱揺らぎを受けて時間発展することを表している. このランジュバン方程式からの類推で秩序パラメータの時間発展を示す式を書き下すと,

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = - \int \Gamma(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \frac{\delta F}{\delta \eta(\mathbf{r}', t)} d\mathbf{r}' + \zeta(\mathbf{r}, t) \quad (18)$$

ただし  $\Gamma$  は空間の各点の間の相関を表す関数である. この現象論的な式を Time-Dependent Ginzburg Landau 方程式 (TDGL 方程式)<sup>\*23</sup> と呼ぶ. ただし現象論的に求めた自由エネルギーが汎関数であることから偏微分の代わりに汎関数微分が現れる. 汎関数微分は, 関数  $\eta(\mathbf{r})$  を  $\eta(\mathbf{r}) + \delta\eta(\mathbf{r})$  と微小に変化させたとき

$$F[\eta + \delta\eta] - F[\eta] = \int \frac{\delta F}{\delta \eta(\mathbf{r})} \delta\eta(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (19)$$

の右辺によって定義される<sup>\*24</sup>. この式は偏微分との類推で解釈できる.  $n$  次元のベクトル  $\mathbf{x}$  を引数にとる関数  $f$  について, 微小な変化  $\delta\mathbf{x}$  を考えると一次近似で

$$f(\mathbf{x} + \delta\mathbf{x}) - f(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^n \frac{\partial f}{\partial x_i} \delta x_i \quad (20)$$

が成り立つが, 汎関数微分では関数の引数があたかも無限かつ連続的にあると考えて, この式に登場する和を積分に置き換えた形になっている. さて, 元の方程式に話を戻そう. TDGL 方程式の右辺第一項は自由エネルギーを小さくする方向に変化が進むことを表している. 特に位置  $\mathbf{r}'$  での自由エネルギーの傾き (汎関数微分) が係数  $\Gamma$  の重みで位置  $\mathbf{r}$  の秩序パラメータの変化に寄与する. 簡単な場合として位置  $\mathbf{r}$  の自由エネルギーの傾きのみが同じ位置の秩序パラメータの時間発展に寄与すると考えて,  $\Gamma(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$  を  $\gamma\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$  とおき,

$$\int \Gamma(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \frac{\delta F}{\delta \eta(\mathbf{r}', t)} d\mathbf{r}' \rightarrow \gamma \frac{\delta F}{\delta \eta(\mathbf{r}, t)} \quad (21)$$

とすることもある. 右辺第二項  $\zeta(\mathbf{r}, t)$  は熱揺らぎの効果を表す項で, 次式<sup>\*25</sup>を満たし Gauss 分布に従うランダムな変数である.

$$\langle \zeta(\mathbf{r}, t) \zeta(\mathbf{r}', t') \rangle = 2k_B T \Gamma(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t') \quad (22)$$

なお,  $\Gamma(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$  を  $\gamma\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$  と置いた場合には上の条件式は次のような簡単な形に変形できる.

$$\langle \zeta(\mathbf{r}, t) \zeta(\mathbf{r}', t') \rangle = 2k_B T \gamma \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t') \quad (23)$$

これは揺らぎが時間的にも空間的にもランダムであることを示している.

後で詳しくみるように, アクティブマターの連続場による記述は流体に対する連続の式とここでみた TDGL 方程式を活用して行われる. そして, 方程式に登場する自由エネルギーの形や他の項はランダウの擬似自由エネルギーと液晶の自由エネルギーの形, そして対称性から推定される.

\*23 時間依存 (Time-Dependent) と書いてあるからにはこの世には時間依存しない GL 方程式も存在する. もともと GL 方程式は超電導をよく記述する現象論として Ginzburg と Landau によって導入された方程式である. そこで扱われている自由エネルギーの形は今後本稿で扱うものとはもちろん異なるし, 多くの場合それは変分 (汎関数微分) をとった後の形で記述されている. そのため本稿のものとは似ても似つかないと感じるかもしれない.

\*24 ここでは物理でよく導入される方法で汎関数微分を定めた. 数学的に厳密に定義するためには超関数の議論が必要になるようである.

\*25  $\langle X \rangle$  は  $X$  の期待値である.



### 3 ネマチック液晶の自由エネルギー

#### 3.1 ネマチック液晶

異方的な分子からなる物質をはじめとした一部の物質では、固体（結晶）相と液体相の間に中間的な相をとる場合がある。このような中間状態を液体相と結晶相の間、液晶と呼ぶ。中間状態にはいくつもの種類があるが、ここでは最も基本的でアクティブマターのモデルにも応用されているネマチック液晶を主に扱う。ネマチック液晶は主に、鏡像異性体を持たない（有機物であれば不斉炭素原子を持たない）棒状の分子からなる。このような棒状分子に対して、結晶相（固体相）は棒の重心が離散並進対称性をもち、しかも分子の向きが揃っている状態だと考えられる。一方等方液体相は、分子がある方向を指す確率が一律であり、連続的な並進、回転の対称性を持っている状態であると考えられる。これらの中間であるネマチック相は、分子の方向が長距離秩序を持つ、言い換えるとある程度揃っており、重心の位置はばらばらという相である。対称性のことを用いれば、連続並進対称性は保たれているものの連続回転対称性は破れており、 $180^\circ$  の離散回転対称性がある相と言える。なお、ネマチック液晶では分子に鏡像異性体がないことからこれらの相は鏡映をとっても同じものであり、鏡映対称性を持つ<sup>\*26</sup>。

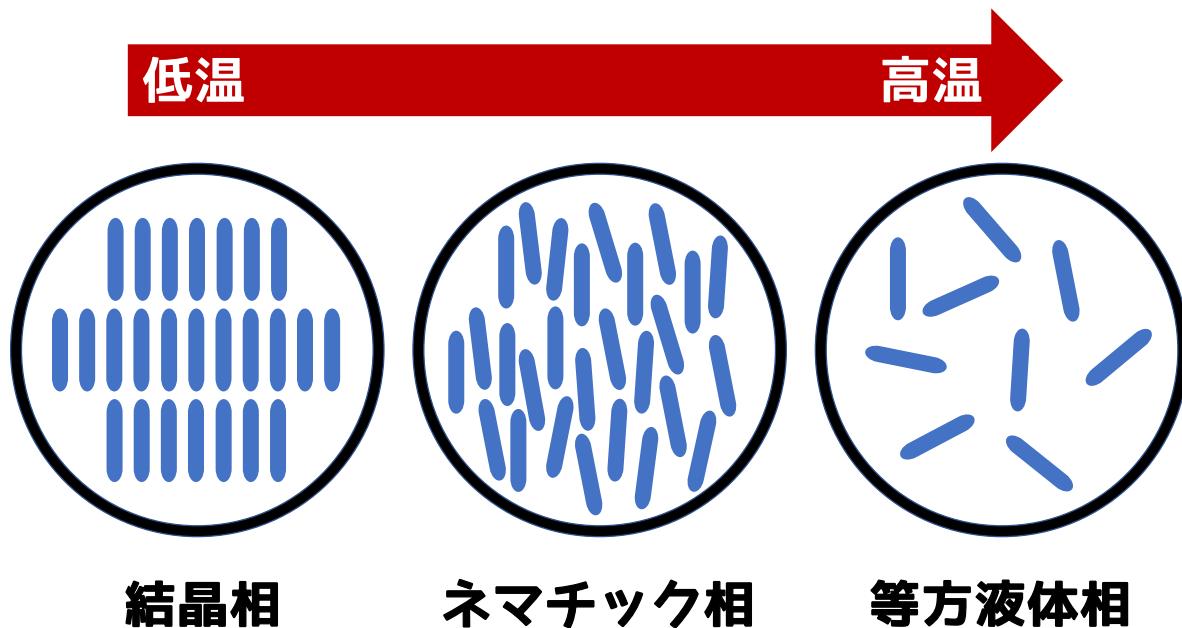


図2 結晶相、ネマチック相、等方液体相の概念図。特にネマチック相の図を  $90^\circ$  回転させると元の図とは一致しないが、 $180^\circ$  回転させると元の図と一致する。これにより連続回転対称性が破れていることがわかる。一方でネマチック相は結晶相のように分子の重心が揃っているわけではないため、図を微小に並進させても元の図と一致する。つまりネマチック相は連続並進対称性を持っている。

#### 3.2 スカラー、ベクトル、テンソル

液晶のみならず、物理について議論する際にはある変換に対して系がどのように振る舞うか考えることがとても重要である。例えば変換後も不変な量に注目することで系の対称性がわかる。そこで、これから系に加える二種類の変換とそれに対して諸量がどのように振る舞うかを考えよう。一つ目の変換は回転操作である。これは  $R \in SO(3)$ <sup>\*27</sup> を用いて  $\mathbf{r}' = R\mathbf{r}$  と書くことができる。二つ目の変換は反転（パリティ変換）である。これは  $\mathbf{r}' = -\mathbf{r}$  と書くことができる。以

<sup>\*26</sup> 詳しくは扱わないが、分子が鏡像異性体を持つ場合は分子の向きの揃った平面が螺旋状に積み重なったような相をとり、そのような相をコレステリック相と呼ぶ。

<sup>\*27</sup>  $SO(3)$  は特殊直交群と呼ばれるリー群（群構造を持つ多様体、ここでは行列からなる群としての側面に特に注目する）で、三次元空間中の回転を意味している。これに反転とそれによって生じる変換を加えた群を直交群と呼ぶ。これは  $O(3)$  と書かれることが多い。なお  $O(3)$  は  $3 \times 3$  実行列であって転置との積が単位行列となるものの集合であり、 $SO(3)$  は  $O(3)$  の元であって行列式が 1 となるもの全体の集合である。

下, 回転に対して  $\mathbf{v} \rightarrow R\mathbf{v}$ , 反転に対して  $\mathbf{v} \rightarrow -\mathbf{v}$  と変換される  $\mathbf{v}$  をベクトルと呼ぶことにする. 同様に回転に対して  $\mathbf{v} \rightarrow R\mathbf{v}$ , 反転に対して  $\mathbf{v} \rightarrow \mathbf{v}$  と変換される  $\mathbf{v}$  を擬ベクトルと呼ぶ. さて, 上で定めたベクトル  $\mathbf{v}$  の内積を考えると, これは回転に対して  $\mathbf{v}^T \mathbf{v} \rightarrow (R\mathbf{v})^T R\mathbf{v} = \mathbf{v}^T R^T R\mathbf{v} = \mathbf{v}^T \mathbf{v}$ , 反転に対して  $\mathbf{v}^T \mathbf{v} \rightarrow -\mathbf{v}^T(-\mathbf{v}) = \mathbf{v}^T \mathbf{v}$  と変換される (より正確には変換に対して不変となる). このような量をスカラーと呼ぶ. 一方ベクトルと擬ベクトルの内積についてスカラーについての議論と全く同様に考えると, 回転に対しては不変だが反転に対しては  $-1$  倍となる. このような量を擬スカラーと呼ぶ. また, 回転操作に対して  $\chi \rightarrow R\chi R^T$  と変換される量を 2 階のテンソルと呼ぶ<sup>\*28</sup>. 特にテンソルの変換性については縮約規則<sup>\*29</sup> を用いて成分表示すると  $\chi'_{\alpha\beta} = R_{\alpha\mu} R_{\beta\nu} \chi_{\mu\nu}$  である. 次に微分演算子  $\nabla$  がどのような変換を受けるのか考えよう.  $\mathbf{r}' = R\mathbf{r}$  と  $R^{-1} = R^T$  により  $\mathbf{r} = R^T \mathbf{r}'$  であるから,

$$\frac{\partial}{\partial x'_\alpha} = \frac{\partial x_\beta}{\partial x'_\alpha} \frac{\partial}{\partial x_\beta} = R_{\alpha\beta} \frac{\partial}{\partial x_\beta} \quad (24)$$

また, 反転に対しては微分演算子も  $-1$  倍されるので, 結局微分演算子  $\nabla$  は変換に対してベクトルになる<sup>\*30</sup>. 最後にスカラー量を構成する方法についても言及しておく. 現れる添字を二つずつ揃えて縮約をとればスカラー量を構成できる. 例えばベクトル同士の内積は  $v_\alpha v_\alpha$  とかけるがこれはスカラーであった. また, テンソル同士の二重ドット積  $\chi_{\alpha\beta} \eta_{\alpha\beta}$  を考えると

$$\chi'_{\alpha\beta} \eta'_{\alpha\beta} = R_{\alpha\mu} R_{\beta\nu} R_{\alpha\delta} R_{\beta\gamma} \chi_{\mu\nu} \eta_{\delta\gamma} = \delta_{\mu\delta} \delta_{\nu\gamma} \chi_{\mu\nu} \eta_{\delta\gamma} = \chi_{\mu\nu} \eta_{\mu\nu} \quad (25)$$

となりこれもスカラーである.

### 3.3 配向ベクトルと秩序パラメータ

3次元空間の場合を考える. 微小体積  $\delta V$  内に棒状分子が  $N$  個あるとする. 各分子を 1 から  $N$  までの自然数  $i$  でナンバリングする. これらの分子の向きを単位ベクトル  $\mathbf{m}_i$  で表す. 分子に頭尾の区別がないため, このベクトルには  $\pm 1$  倍の不定性があるが, ここでは一旦ランダムに定めることにしよう. 次に各成分が 0 か 1 をとる  $N$  成分のベクトル  $\mathbf{k}$  を用いてベクトル  $\mathbf{m}(\mathbf{k})$  を次のように定める. ただし以下ではベクトル  $\mathbf{v}$  の第  $\alpha$  成分を  $v_\alpha$  と表記する.

$$m_\alpha(\mathbf{k}) = \sum_{i=1}^N (-1)^{k_i} m_{i\alpha} \quad (26)$$

$\|\mathbf{m}(\mathbf{k})\|$  を最大にするような  $\mathbf{k}$  のうち一つを  $\mathbf{k}_0$  とおく.  $N \geq 1$  であればこのような  $\mathbf{k}$  は二通り存在するが, この違いは  $\mathbf{m}(\mathbf{k}_0)$  に  $-1$  倍の不定性を与えるのみであり, どちらを選んでも構わない. これを用いて棒状分子の配向ベクトル  $\mathbf{n}$  を

$$\mathbf{n} = \frac{\mathbf{m}(\mathbf{k}_0)}{\|\mathbf{m}(\mathbf{k}_0)\|} \quad (27)$$

と定める. もちろん  $\mathbf{n}$  には  $\pm 1$  倍の不定性があるがこれを気にする必要はない. 以下の議論では  $\pm \mathbf{n}$  を同一視する. また, 以下では  $(-1)^{k_{0i}} \mathbf{m}_i$  を  $\mathbf{m}_i$  として扱うことで  $\mathbf{m}_i$  の不定性を減らしておく. 定義からも明らかであるが, 配向ベクトルとは微小体積中の棒状分子の向きの平均値と解釈できる. つまりある位置におけるおおよその分子の向きを配向ベクトルを用いて記述することができる.

次に, その微小体積内で分子の向きがどの程度揃っているかを記述するスカラー秩序パラメータを定めよう. 以下,  $\mathbf{m}_i$  は微小体積内の平均値をとる場合にしか現れないため添字の  $i$  を省略する.  $\mathbf{n}$  と  $\mathbf{m}$  は共に単位ベクトルであるからなす

\*28 実際には物理でよく登場する今回扱うようなテンソル (スカラーは 0 階の, ベクトルは 1 階のテンソルとみなす) は空間の座標に対して各種のテンソルを返すテンソル場である. このテンソル場で得られるテンソルは, もとの空間 ( $\mathbf{r}$  のあるユークリッド空間) ではなくその接空間上で定義される. 一方回転や反転などの操作は系ではなく座標の方を変換したのだと考える (観察する対象を回すのではなく, 観察している我々が対象の周りをぐるっと回るようなものである). つまりテンソルは操作の定義域であるユークリッド空間上にないのである. したがって  $\mathbf{v} \rightarrow R\mathbf{v}$  のような成分を用いない変換の表記は誤解を招くかもしれない. けれども成分で書かれた変換則はしっかり成り立つので, 気に入らない場合は常に成分表記を用いると良いだろう. 一般相対論では各種のテンソルを基底を含めて書いたものが変換に対して不変になるように, 成分のみに対する座標変換の規則を定めている. なお, 接空間や変換則の正しい表記を知りたい場合は多様体を学ぶと良いだろう (自分は今丁度講義で一般相対論と多様体を学んでいるところである. したがってこの記述には誤りがあるかもしれない).

\*29 2 回登場した添字について和をとる. 例えば  $A_i B_i = A_1 B_1 + A_2 B_2 + A_3 B_3$  である. 相対論では話はもう少し複雑になるが, ここでは気にしなくて良い.

\*30 ユークリッド空間で回転と反転のみを扱うので共変やら反変やらを考慮することなく話が進む. 相対論に慣れているとかえってわかりにくいかもしれない.

角を  $\theta$  として  $\mathbf{n} \cdot \mathbf{m} = \cos \theta$  である. これを用いてスカラー秩序パラメータ  $Q$  を

$$Q = \langle P_2(\cos \theta) \rangle_{\delta V} = \frac{3}{2} \left\langle \cos^2 \theta - \frac{1}{3} \right\rangle_{\delta V} \quad (28)$$

で定める. このように定義した  $Q$  は分子の向きが揃っているほど 1 に近づき, 分子の向きがランダムであるほど 0 に近づく. 定義は多少人為的だが分子の向きの揃い具合を表すパラメータとして適当であると言える.

ここまでの議論で液晶の大体の向きと揃い具合を議論するための変数を定めることができた. しかしここまでの道具立てではいくつかの不満が残る. まずはもちろん, 向きと揃い具合の情報が別れている点不満である. どちらかだけ分かれば良い場合にはこれだけで議論できるが, 両方を同時に扱うには余計な工夫が必要そうである. 次の不満点は, 本来頭尾の区別がない分子の向きをベクトルで表している点である. 実際には多くの場面で  $\pm \mathbf{n}$  を同一視すれば問題ないが, 境界条件の記述に不定性が残るのは大きな問題である. 境界の配向ベクトル場の一部分を  $-1$  倍したとき, 記述している状態は変化しないにもかかわらず計算の難易度が大きく変化することは容易に想像できるだろう. このような問題を解決するため, テンソル秩序パラメータ  $Q$  を以下のように定義する. ただし  $Q_{\alpha\beta}$  は  $Q$  の  $(\alpha, \beta)$  成分を表す.

$$Q_{\alpha\beta} = \frac{3}{2} \left\langle m_\alpha m_\beta - \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} \right\rangle_{\delta V} \quad (29)$$

分子の向きを表すベクトル  $\mathbf{m}$  は座標の変換則によってもベクトル (1 階のテンソル) とみなせるから, このように定めた  $Q$  は 2 階のトレースレスな ( $\mathbf{m}$  が単位ベクトルであることから明らか) 対称テンソルである. とはいえひとまずは  $3 \times 3$  の対称行列と見ても構わない. 以下,  $Q$  の物理的意味を考えよう. 議論を簡単にするため  $\mathbf{n}$  の向きを  $z$  軸に取り直す. すると  $\mathbf{n} = (0, 0, 1)$  と  $\cos \theta = \mathbf{n} \cdot \mathbf{m}$  により  $m_z = \cos \theta$  が成り立つので

$$Q_{zz} = \frac{3}{2} \left\langle m_z m_z - \frac{1}{3} \delta_{zz} \right\rangle_{\delta V} = \frac{3}{2} \left\langle \cos^2 \theta - \frac{1}{3} \right\rangle_{\delta V} = Q \quad (30)$$

配向ベクトルが  $z$  軸と同じ向きなので,  $\mathbf{m}$  は  $\delta V$  内で  $z$  軸周りに対称である. したがって

$$\langle m_x m_x \rangle_{\delta V} = \langle m_y m_y \rangle_{\delta V} \quad (31)$$

これと  $Q$  がトレースレスであることから

$$Q_{xx} = Q_{yy} = -\frac{Q}{2} \quad (32)$$

同様に, 対称性から  $\alpha \neq \beta$  の場合には  $\langle m_\alpha m_\beta \rangle_{\delta V} = 0$  なので  $Q$  の非対角成分は 0 である. 結局座標系をこのようにとればテンソル秩序パラメータが初めから対角化されており, <sup>\*31</sup> その最大固有値が  $Q$ , 最大固有値に対応する固有ベクトル (テンソルの主軸) が  $\mathbf{n}$  であり, 残り 2 つの固有値は  $-Q/2$  で, それらに対応する固有空間は  $\mathbf{n}$  に直交する平面である. もちろんこれは座標の取り方に依らない性質である. このことから  $Q$  は

$$Q_{\alpha\beta} = \frac{3Q}{2} \left( n_\alpha n_\beta - \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} \right) \quad (33)$$

と書き直すことができる. 以下でも引き続き縮約規則を用いる. また  $\mathbf{n}$  と一次独立なベクトルを  $\mathbf{n}^\perp$  と書く. すると実際に,

$$Q_{\alpha\beta} n_\beta = \frac{3Q}{2} \left( n_\alpha n_\beta n_\beta - \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} n_\beta \right) = Q n_\alpha \quad (34)$$

$$Q_{\alpha\beta} n_\beta^\perp = \frac{3Q}{2} \left( n_\alpha n_\beta n_\beta^\perp - \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} n_\beta^\perp \right) = -\frac{Q}{2} n_\alpha^\perp \quad (35)$$

であり,  $\mathbf{n}$  が  $Q$  の主軸に対応する固有値が  $Q$ , 残り 2 つの固有値は共に  $-Q/2$  でその固有ベクトルは  $\mathbf{n}$  に直交することが確認できた. つまりテンソル秩序パラメータがあればその主軸を求めることでいつでもスカラー秩序パラメータと配向ベクトルの情報を得ることができる. また, 固有ベクトルの定数倍はやはり固有ベクトルであるから, テンソル秩序パラメータのみに注目している際には  $\mathbf{n}$  の  $\pm 1$  倍の不定性は自動的に同一視されている. これによって配向ベクトルとスカラー秩序パラメータのみを扱っていた際の不満点は全て解決された. <sup>\*32\*33</sup>

\*31 一般に 2 階のテンソルは座標系の軸を主軸にとれば対角化される. 例えば「液晶の物理」付録 A を参照.

\*32 代わりにテンソルを扱うという面倒が不満点に追加された

\*33 ここまでの議論は, 特に配向ベクトルの定義のあたりが少しごちゃごちゃしておりわかりにくいかもしれない. 教科書等では配向ベクトルはノ

### 3.4 ネマチック相の自由エネルギー

棒状分子が並んでいるとき、その並び方によって全体に弾性力がかかることが期待される。これは液晶の内部エネルギーが配向ベクトル場  $\mathbf{n}(\mathbf{r})$  やその微分に依存することを示唆している。ネマチック相では分子が長距離に渡って揃っているのであった。つまり  $\mathbf{n}(\mathbf{r})$  の変化は小さく、その  $k$  階の微分は  $k$  次の微小量とみなせる。<sup>\*34</sup> また、配向の揃い具合によって系のエントロピーも変化するはずである。一方スカラー秩序パラメータは一般に温度によって決定される量であるから、一定温度下の系の自由エネルギーを展開する上では考慮しなくても良い。そこでネマチック相の自由エネルギーを  $\mathbf{n}(\mathbf{r})$  やその微分で展開したい。ただしこれらは  $\mathbf{r}$  に依存してしまうので、系の中の微小体積  $\Delta V$  とその中の自由エネルギー  $\Delta F$  によって定まる自由エネルギー密度

$$f_d = \frac{\Delta F}{\Delta V} \quad (36)$$

を展開することにしよう。ただしここで微小体積  $\Delta V$  は自由エネルギーを決定できる程度に大きく、微小体積の中で配向ベクトルの低次の微分の値が定まる程度に小さくなければならない。自由エネルギー密度が配向ベクトル場とその微分で展開できれば、自由エネルギーは配向ベクトル場の汎関数として

$$F[\mathbf{n}(\mathbf{r})] = \int_{\text{系内}} f_d dV \quad (37)$$

と表される。今回は系の界面以外の部分（バルク）のみを考えることにしよう。つまり積分の際に表面項となる部分は無視する。これだけの仮定をおけば後は配向ベクトルの変換則と系の対称性のみから自由エネルギー密度を展開できる。液晶の自由エネルギーは系を回転させても変化しないはずである。また、ネマチック相にある系は構成分子が鏡像異性体を持たないからネマチック相の自由エネルギーは座標の反転に対しても不変であろう。結局ネマチック相にある系の自由エネルギー密度は  $\mathbf{n}(\mathbf{r})$  やその微分からなるスカラー量のみによって展開される。また、コレステリック相にある系を考えたい場合には、構成分子が鏡像異性体を持つことから座標の反転と回転の積で記述される鏡映操作について自由エネルギーが不変とは限らず、擬スカラー量も展開に含まれる。さらに、いずれの場合も液晶の配向ベクトルには  $\pm 1$  倍の不定性があるので得られた展開式  $f_d(\mathbf{n})$  が  $f_d(\mathbf{n}) = f_d(-\mathbf{n})$  を満たすことも確認しなければならない。展開を実行するために配向ベクトルとその微分の変換則を確認しておこう。回転  $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}' = R\mathbf{r}$  に対しては図形的な考察により  $\mathbf{n}(\mathbf{r}) \rightarrow \mathbf{n}'(\mathbf{r}') = R\mathbf{n}(\mathbf{r})$  と変換される。<sup>\*35</sup> また反転  $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}' = -\mathbf{r}$  に対しては  $\mathbf{n}(\mathbf{r}) \rightarrow \mathbf{n}'(\mathbf{r}') = -\mathbf{n}(\mathbf{r})$  と変換される。したがって配向ベクトルは変換則の意味でベクトルとして振る舞う。一方配向ベクトルの微分は配向ベクトルと微分演算子がベクトルとして振る舞うことから、回転に対して

$$\frac{\partial n_\alpha(\mathbf{r})}{\partial x_\beta} \rightarrow \frac{\partial n'_\alpha(\mathbf{r}')}{\partial x'_\beta} = R_{\alpha\mu} R_{\beta\nu} \frac{\partial n_\mu(\mathbf{r})}{\partial x_\nu} \quad (38)$$

と振る舞うので 2 階のテンソルである。実際に展開に用いる量を調べるため、まずは 0 次の微小量を考えよう。これは配向ベクトルの微分を含まないスカラー量であるから  $\mathbf{n} \cdot \mathbf{n}$  とその積に限られるが、これらは配向ベクトルが単位ベクトルであることから全て 1 となる。これは定数項であるから自由エネルギーの原点を適当に取り直すことで無視できる。1 次の微小量は配向ベクトルの 1 階微分の一次の項である。このような量として許されるのは  $\nabla \cdot \mathbf{n}$  と  $\mathbf{n} \cdot (\nabla \times \mathbf{n})$  である。前者は明らかにベクトル同士の内積でありスカラーであるが、体積積分がガウスの発散定理により表面積分に変換される。今回はバルクのみを考えるためにこのような項は無視するのであった。後者は  $\nabla \times \mathbf{n}$  が擬ベクトルとなることから

りと雰囲気定義されていることが多い。厳密かつ見通しよく議論する方法として、分子の向きベクトルを定めた後すぐにテンソル秩序パラメータを導入し、その主軸として配向ベクトルを定める方法があるのだが、これは配向ベクトルの物理的な意味が後付けになりそうで少し不満である。そこでここでは配向ベクトルを厳密に定義してからテンソル秩序パラメータの固有ベクトルと配向ベクトルの関係を論じることにした。実際その方がテンソル秩序パラメータのありがたみがよくわかる（気がする）

\*34 例えば揺らぎの波数を  $q$  として、 $\mathbf{n}$  の  $z$  成分が  $\cos qz$  と書けるとしよう。するとネマチック相では分子の向きが長距離にわたって揃っていることから揺らぎの波数  $q$  は微小量である。この成分を  $z$  で一回微分するごとに微小量  $q$  が加かるので、配向ベクトルの  $k$  階の微分は  $k$  次の微小量とみなせると言えるだろう。

\*35  $\mathbf{r}$  は空間座標を示しており確かに  $\mathbb{R}^3$  の元であるが、ベクトル場  $\mathbf{n}(\mathbf{r})$  は回転変換にかかる空間  $\mathbb{R}^3$  ではなくその接空間  $T_p \mathbb{R}^3$  ( $p = \mathbf{r}$ ) 上にあると考えるのが厳密には正しく、この記法は誤解を招くかもしれない。正確にはあくまで成分で表示した上で  $n'_i(\mathbf{r}') = R_{ij} n_j(\mathbf{r})$  が成り立つと記述するべきであろう。もっとも線形変換で書かれる座標変換についてはそこまで気にしなくても良い。

擬スカラー量となる。2次の微小量としては配向ベクトルの2階微分の一次の項か1階微分の二次の項からなるが、前者は部分積分によって表面のみに依存する項と後者の和の形に変形できるため、後者の項

$$\frac{\partial n_\alpha}{\partial x_\beta} \frac{\partial n_\gamma}{\partial x_\delta} \quad (39)$$

のみを考えれば良い。この量からスカラーを構成するためには $\mathbf{n}$ の成分を掛け合わせるかそのままの状態で縮約を取れる形に直せばよい。すると考える量は、

$$\left(n_k \frac{\partial n_k}{\partial x_i}\right) \left(n_l \frac{\partial n_l}{\partial x_i}\right), \quad \left(n_i \frac{\partial n_k}{\partial x_i}\right) \left(n_m \frac{\partial n_k}{\partial x_m}\right), \quad \frac{\partial n_k}{\partial x_i} \frac{\partial n_k}{\partial x_i}, \quad \frac{\partial n_k}{\partial x_k} \frac{\partial n_l}{\partial x_l}, \quad \frac{\partial n_k}{\partial x_i} \frac{\partial n_i}{\partial x_k} \quad (40)$$

の五通りに限られる。ところが $\mathbf{n}$ は単位ベクトルであったから

$$\left(n_k \frac{\partial n_k}{\partial x_i}\right) \left(n_l \frac{\partial n_l}{\partial x_i}\right) = \frac{1}{4} \left(\frac{\partial}{\partial x_i} \|\mathbf{n}\|^2\right)^2 = 0 \quad (41)$$

であり、一つ目の量は無視できる。また、最後の二つの差は、以下の式の最右辺に出てくる2階微分が縮約規則で消えることに注意すれば

$$\frac{\partial n_k}{\partial x_k} \frac{\partial n_l}{\partial x_l} - \frac{\partial n_k}{\partial x_i} \frac{\partial n_i}{\partial x_k} = \frac{\partial n_i}{\partial x_i} \frac{\partial n_k}{\partial x_k} - \frac{\partial n_k}{\partial x_i} \frac{\partial n_i}{\partial x_k} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(n_i \frac{\partial n_k}{\partial x_k} - n_k \frac{\partial n_i}{\partial x_k}\right) \quad (42)$$

と書ける。これはやはり積分で表面項となるので、バルクにのみ注目するのであれば、最後の二つの内いずれか一方のみを考えれば十分である。すると、自由エネルギーに寄与するスカラー量は

$$\left(n_i \frac{\partial n_k}{\partial x_i}\right) \left(n_m \frac{\partial n_k}{\partial x_m}\right) = \{(\mathbf{n} \cdot \nabla) \mathbf{n}\}^2 \quad (43)$$

$$\frac{\partial n_k}{\partial x_k} \frac{\partial n_l}{\partial x_l} = (\nabla \cdot \mathbf{n})^2 \quad (44)$$

$$\frac{\partial n_k}{\partial x_i} \frac{\partial n_k}{\partial x_i} = \{\mathbf{n} \cdot (\nabla \times \mathbf{n})\}^2 + (\nabla \cdot \mathbf{n})^2 \quad (45)$$

また、ネマチック液晶の議論には不要だが、同様に擬スカラー

$$\{\mathbf{n} \cdot (\nabla \times \mathbf{n})\} (\nabla \cdot \mathbf{n}), \quad \{(\mathbf{n} \cdot \nabla) \mathbf{n}\} \cdot (\nabla \times \mathbf{n}) \quad (46)$$

も構成できる。ただし、 $\mathbf{n}$ が単位ベクトルであることを再び用いると

$$[\mathbf{n} \times (\nabla \times \mathbf{n})]_i = n_j \partial_i n_j - n_j \partial_j n_i = -n_j \partial_j n_i = [-(\mathbf{n} \cdot \nabla) \mathbf{n}]_i \quad (47)$$

が得られるため、上に書いた擬スカラーの二つ目は0となる。結局ネマチック液晶の自由エネルギー密度に登場するスカラー量の内、二次の微小量までを列挙すると

$$\{(\mathbf{n} \cdot \nabla) \mathbf{n}\}^2 = \{\mathbf{n} \times (\nabla \times \mathbf{n})\}^2, \quad (\nabla \cdot \mathbf{n})^2, \quad \{\mathbf{n} \cdot (\nabla \times \mathbf{n})\}^2 \quad (48)$$

であり、自由エネルギー密度は定数分の差を除けば、温度によって決まる定数 $K_i$  ( $i = 1, 2, 3$ )を用いて

$$f_d(T, \mathbf{n}) = \frac{1}{2} K_1 (\nabla \cdot \mathbf{n})^2 + \frac{1}{2} K_2 \{\mathbf{n} \cdot (\nabla \times \mathbf{n})\}^2 + \frac{1}{2} K_3 \{\mathbf{n} \times (\nabla \times \mathbf{n})\}^2 \quad (49)$$

と展開することができた。この自由エネルギー密度をFrankの弾性自由エネルギーと呼ぶ。なお、 $K_1$ の項は湧き出しや吸い込みがあると大きくなる。これは配向が広がっているときに働く弾性力と解釈でき、スプレイと言われる。 $K_2$ の項は配向ベクトルと回転が平行だと大きくなる項で、配向が螺旋状になっているときに働く弾性力と解釈できる。これはツイストと言われる。 $K_3$ の項は、回転が配向ベクトルと垂直だと大きくなる項で、配向が平面上で曲がっているときに働く弾性力と解釈できる。これはバンドと言われる。単純に対称性のみから決めた自由エネルギーを解釈する<sup>\*36</sup>ことで具体的な物理的意味が得られることから、この理論が正当であることを裏付けているように思われる。

\*36 数式の意味を解釈するのが物理を勉強する上での最大のおもしろポイントである。

### 3.5 等方液体相の自由エネルギー

等方液体相にある系の自由エネルギー密度のテンソル秩序パラメータ  $Q$  による展開を考えよう. 等方液体相にある系は回転に対しても座標反転に対しても対称であるから, 自由エネルギーは  $Q$  とその微分から構成できるスカラー量のみを含む. すでに見たように,  $Q$  は対称テンソルでその固有値は  $Q, -Q/2, -Q/2$  であったから, 今用いている座標系においてある直交行列  $O$  が存在して

$$Q = O^T \begin{pmatrix} Q & 0 & 0 \\ 0 & -Q/2 & 0 \\ 0 & 0 & -Q/2 \end{pmatrix} O \quad (50)$$

とかける. つまり  $Q$  の各成分の大きさは  $Q$  に比例する. スカラー等方液体相においてはスカラー秩序パラメータ  $Q$  が微小量であることから,  $Q$  の各成分を一次の微小量とみなす. すると  $Q$  の成分のみから構成できるスカラー量は次のように列挙できる. ただし  $Q$  が対称テンソルであるために一致するものは除き, 四次の微小量までで展開を打ち切った. なお, 一次のスカラー量は  $\text{tr}Q = 0$  であり, 自由エネルギーには寄与しない.

$$Q_{\alpha\beta}Q_{\alpha\beta}, \quad Q_{\alpha\beta}Q_{\beta\gamma}Q_{\gamma\alpha}, \quad (Q_{\alpha\beta}Q_{\alpha\beta})^2, \quad Q_{\alpha\beta}Q_{\beta\gamma}Q_{\gamma\delta}Q_{\delta\alpha} \quad (51)$$

また,  $Q$  の微分から構成できるスカラー量も二次の項まで拾っておく. 配向ベクトルによる展開と同様に表面積分になる項を無視し,  $Q$  が対称テンソルであるために一致するものを除けば許されるスカラー量は

$$\frac{\partial Q_{\alpha\beta}}{\partial x_\gamma} \frac{\partial Q_{\alpha\beta}}{\partial x_\gamma}, \quad \frac{\partial Q_{\alpha\beta}}{\partial x_\alpha} \frac{\partial Q_{\gamma\beta}}{\partial x_\gamma} \quad (52)$$

である. 一項目は後形の勾配を表す三階テンソル  $Q \otimes \nabla$  の三重ドット積, 二項目は左発散を表す一階のテンソル  $\nabla \cdot Q$  の内積で書けるが, 以下では成分表示を引き続き用いる. 結局ネマチック相にある系の自由エネルギー密度は

$$f_d(T, Q) = \frac{a}{2} Q_{\alpha\beta} Q_{\alpha\beta} + \frac{b}{3} Q_{\alpha\beta} Q_{\beta\gamma} Q_{\gamma\alpha} + \frac{c_1}{4} (Q_{\alpha\beta} Q_{\alpha\beta})^2 + \frac{c_2}{4} Q_{\alpha\beta} Q_{\beta\gamma} Q_{\gamma\delta} Q_{\delta\alpha} \\ + \frac{L_1}{2} \frac{\partial Q_{\alpha\beta}}{\partial x_\gamma} \frac{\partial Q_{\alpha\beta}}{\partial x_\gamma} + \frac{L_2}{2} \frac{\partial Q_{\alpha\beta}}{\partial x_\alpha} \frac{\partial Q_{\gamma\beta}}{\partial x_\gamma} \quad (53)$$

と展開することができる. テンソル秩序パラメータには配向ベクトルとスカラー秩序パラメータ両方の情報が含まれているからこの展開式にテンソル秩序パラメータの定義式を代入することで, 自由エネルギーをスカラー秩序パラメータと配向ベクトルによって展開した場合の表示が得られる. 計算は大変なので結果のみを『液晶の物理』(折原, 2004.) から引用すれば<sup>\*37</sup>

$$f_d(T, Q, \mathbf{n}) = \frac{3}{4} a Q^2 + \frac{1}{4} b Q^3 + \frac{9}{16} c Q^4 \\ + \frac{3}{4} \left( L_1 + \frac{1}{6} L_2 \right) (\nabla Q)^2 + \frac{3}{8} L_2 (\mathbf{n} \cdot \nabla Q)^2 \\ + \frac{9}{4} Q^2 \left[ \left( L_1 + \frac{1}{2} L_2 \right) \{ (\nabla \cdot \mathbf{n})^2 + (\mathbf{n} \times \nabla \times \mathbf{n})^2 \} + L_1 \{ \mathbf{n} \cdot (\nabla \times \mathbf{n}) \}^2 \right] \\ + \frac{3}{2} L_2 Q (\nabla \cdot \mathbf{n}) (\mathbf{n} \cdot \nabla Q) + \frac{3}{4} L_2 Q (\mathbf{n} \times \nabla \times \mathbf{n}) \cdot \nabla Q \quad (54)$$

ただしここで,  $c = c_1 + c_2/2$  である. また上から三行目は配向ベクトルによる展開と同じ形をしており,  $K_1 = K_3$  であることを示唆している. ただしこれは等方液体相を仮定してテンソル秩序パラメータの高次項を落としたために成り立っているに過ぎない. 実際ネマチック相では転移温度の近くのみで  $K_1 \simeq K_3$  となることが実験的に確かめられている. さて, 等方液体相においては  $Q = 0$  となるため,  $\mathbf{n}$  は一様であるとみなそう. また  $Q$  も位置に依存しないと仮定しよう. すると  $\mathbf{n}$  や  $Q$  の微分がかかった項は 0 となる. 体積積分を実行すると, 自由エネルギー密度が位置に依存しなくなっているために考えている範囲の体積が全体にかかるだけであるから, スカラー等方液体相においてはスカラー秩序パラメータによる自由エネルギーの展開

$$F(T, Q) = \frac{3}{4} A Q^2 + \frac{1}{4} B Q^3 + \frac{9}{16} C Q^4 \quad (55)$$

\*37 この教科書にさえ「面倒な計算」との記述がある

が得られる。これはまさに、自由エネルギーの展開に残る項が対称性（ここでは系に対する回転と座標反転に対して系が対称であるから、自由エネルギーがそれらの変換に対して不変であることを要請したのであった）のみによって定まることの一例<sup>\*38</sup>である。

最後に得られた自由エネルギーがどのような相転移を記述できるか示しておく。簡単のため温度に依存する係数を適当に取り替えて

$$F(T, Q) = a(T - T^*)Q^2 - b(T)Q^3 + c(T)Q^4 \quad (56)$$

ただしここで  $a, b, c$  は全て正にとる。この自由エネルギーは  $Q \geq 0$  の範囲でのみ意味を持つことに着目して実際の振る舞いを確認しよう。強磁性体の場合には秩序パラメータの3次の項は存在せず、したがって  $T_c = T^*$  であった。一方今回のモデルでは  $T > T^*$  であっても系が秩序相を取りうる。実際に  $T^* = 1, a = 0.01, b = 0.3, c = 0.2$  として<sup>\*39</sup>様々な  $T$  に対してグラフを描いた。結果を以下の図に示す。

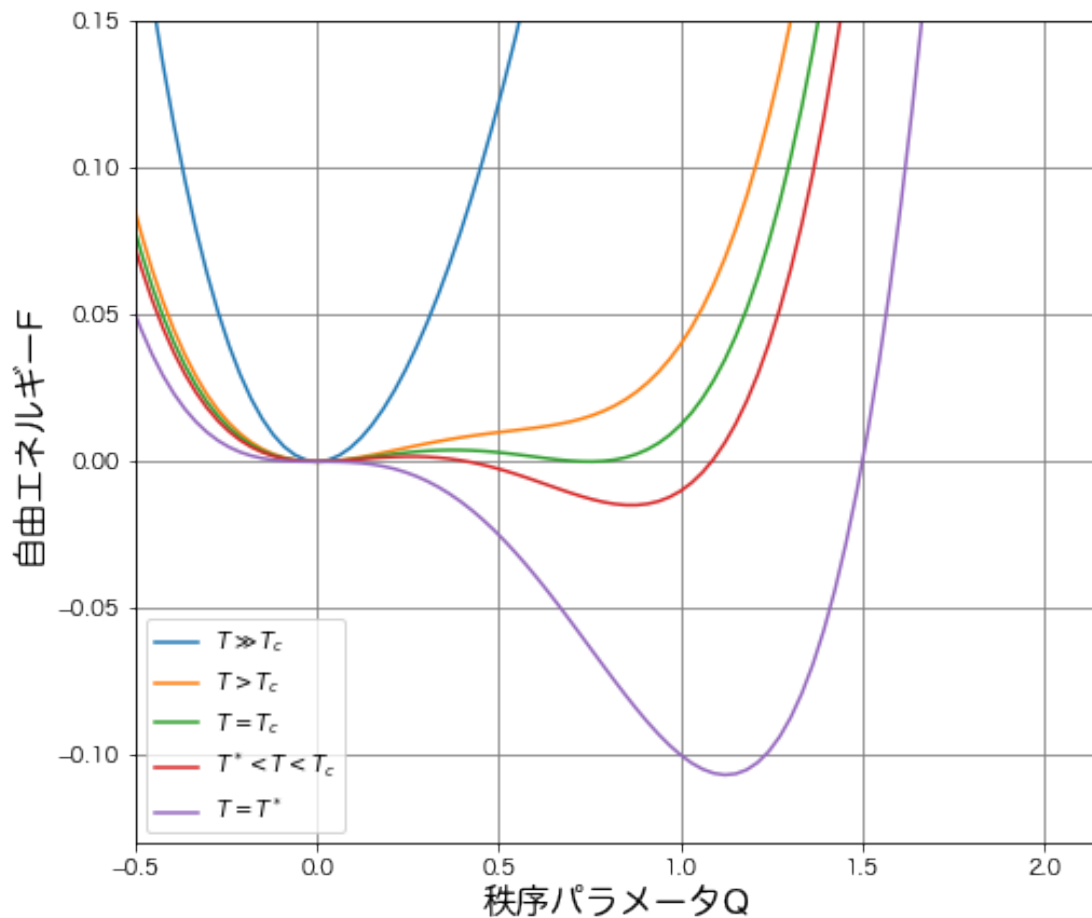


図3 液晶の擬自由エネルギー（Landau-de Gennes 理論）係数を適当に決めたため横軸の  $Q$  や縦軸の  $F$  の数値は大きな意味を持たない。また  $Q \geq 0$  でのみグラフが意味を持つ。温度が十分高い場合には  $Q = 0$  で最小値をとるが、温度が下がると  $Q \neq 0$  の極小値が現れる。転移温度では  $Q = 0$  の極小値と  $Q \neq 0$  の極小値が同じ値を持つ。転移温度より低い  $T^*$  より高い温度では自由エネルギーの最小値は  $Q \neq 0$  であるが  $Q = 0$  は依然として極小値である。  $T^*$  まで温度が下がると  $Q = 0$  では自由エネルギーが極小値を取らなくなる。

この図では簡単のために転移温度を示してしまっているが、そこは一旦気にせずにグラフを眺めよう。温度がある程度高

\*38 強磁性体の自由エネルギーの展開はランダウによって研究され、Landau 理論と呼ばれている。一方、ここで得られた液晶の等方液体相-ネマチック相の相転移を記述する自由エネルギーに関する理論は特に Landau-de Gennes（ランダウ-ドゥジャン）理論と呼ばれている。de Gennes は単純な物質（磁性体など）の秩序を研究する手法が液晶や高分子といったより複雑な物質にも一般化できるという発見により 1991 年ノーベル物理学賞を受賞している。実際対称性に注目することでマイクロなスピンの構成要素になっている現象と、よりマクロな液晶分子が構成要素になっている現象が同様に扱えるのは物理学の勝利に見える。

\*39 この値に特に意味はない。強いて言えば、グラフを描いた際に特徴がわかりやすくなるようにパラメータを選んだ。系の振る舞い自体は係数を正に取りさえすれば本質的には変わらない。

い場合でも  $Q \neq 0$  で自由エネルギーが極小値をとっており,  $T^*$  よりも高いある温度で  $Q = 0$  と  $Q \neq 0$  の二点において自由エネルギーが同じ極小値を持っていることがわかる. 平衡状態では自由エネルギー最小の状態が実現することと転移温度より小さい温度では秩序相が平衡状態で実現することからこの温度を  $T_c$  とするのが妥当である. そして  $T = T^*$  で初めて  $Q = 0$  が極小値ではなくなっている.  $T_c$  を上のように決めれば, 方程式  $F = 0$  が  $Q = 0$  とそれ以外の  $Q$  でそれぞれ重解を持つことから  $T_c$  を簡単に計算できる. 結果を示すと

$$T_c = T^* + \frac{b^2}{4ac} \quad (57)$$

熱力学的に正しい自由エネルギーは隣り合う極小値を共通接線で結んで得られるのであった. すると  $T = T_c$  では秩序立った対称性の低い相 (ネマチック相) と対称性の高い等方液体相が任意の比率で混合した状態で出現する. これは強磁性体ではみられなかった特徴であり, 一次相転移に特有の相共存という現象である. さらに二次相転移との違いとして, 転移温度で秩序パラメータが不連続になる. これは自由エネルギーのグラフからも読み取れるが,  $T \geq T_c$  で自由エネルギーが極小値をとるときの  $Q$  を求めることによって直接確かめることもできる. 実際のネマチック液晶では  $T^*$  と  $T_c$  の差が小さく, 相共存などの一次相転移特有の現象と二次相転移における臨界ゆらぎ<sup>\*40</sup> のような現象が共に観察できる.

---

<sup>\*40</sup> 強磁性体のランダウ擬自由エネルギーは  $T = T_c$  で原点付近が平坦になる. これにより小さなエネルギーで  $m$  が大きく変化でき, 大きなゆらぎが生じる. 等方液体相とネマチック相の相転移においても自由エネルギーは  $T = T_c$  で極小値のまわりが平坦に近いのでやはり大きなゆらぎが生じるが  $T = T^*$  に至る前に平衡状態がネマチック相に移るため, 極小値の周りは完全には平坦になり得ず, 臨界ゆらぎは発散しない.



## 4 非平衡系と Euler 方程式

### 4.1 流体力学における Euler 方程式の導出

流体力学において最もよく知られている方程式はナビエ-ストークス方程式であろう。もちろんこれを導出するのは重要な試みであるが\*41, 長大になってしまうしアクティブマターの議論には必ずしも必要ではないため, ここでは省略しよう。代わりに完全流体, あるいは理想流体と呼ばれる粘性のない流体が従う方程式を簡単に導出する。流体力学の捉え方には Lagrange 形式と Euler 形式の二種類がある。前者は流体を構成する各々の粒子を追跡する手法で, 諸量の引数は粒子の初期位置と時間である。これはある意味, 粒子に乗って流体を見ているようなものである。後者は空間の各点に時々刻々と変化する量があると考える手法で, 諸量の引数は空間の位置と時間である。Lagrange 形式とは対照的に, これは流体を外から見ているようなものと言えるだろう。今後の議論では Euler 形式が重要になってくるので, この形式で Euler 方程式を導こう\*42。

流体は位置によって異なる密度と速度, そして圧力を持ちうる。これらの量が各位置  $\mathbf{r} = (x, y, z)$  を用いて  $\rho(\mathbf{r}, t)$ ,  $\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$ ,  $p(\mathbf{r}, t)$  と書けるとしよう。また, 重力は無視できると仮定する。考える空間の中に閉曲面  $S$  をとり,  $S$  に囲まれた領域を  $V$  とする。領域  $V$  内の流体の質量は密度場を積分することによって得られる。ゆえに領域  $V$  内の流体の質量の時間変化は,

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} = \int_V \frac{\partial \rho}{\partial t} d\mathbf{r} \quad (58)$$

である。一方単位時間に体積  $V$  内に流入した流体の質量は, ガウスの発散定理を用いれば

$$- \int_S \rho(\mathbf{r}, t) \mathbf{v}(\mathbf{r}, t) \cdot d\mathbf{s} = - \int_V \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) d\mathbf{r} \quad (59)$$

と計算できる。ただしここで  $d\mathbf{s}$  は閉曲面  $S$  の表面の各点から外側に向かって伸びる閉曲面に垂直な単位ベクトルであり, 積分のはじめに  $-$  がついているのは閉曲面  $S$  を通って  $V$  内に流入する向きを正にするためである。流体の質量の時間変化は, 体積  $V$  内で質量が生じたり消えたりしない, つまり粒子数は流体全体で保存しているとすれば, 考えている体積の外側から流入してきた流体の質量に等しい。したがって,

$$\int_V \frac{\partial \rho}{\partial t} d\mathbf{r} = - \int_V \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) d\mathbf{r} \quad (60)$$

$V$  ある程度微小にとると, 流体の質量や速度はその体積内ではほとんど変化しないはずである。したがって  $V$  としてそのような微小体積をとれば

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\mathbf{r}, t) = - \nabla \cdot \{ \rho(\mathbf{r}, t) \mathbf{v}(\mathbf{r}, t) \} \quad (61)$$

が得られる。これは導出の過程で述べたように質量の保存を示している。一般に流れのある系の物理量  $X$  に関する保存則は今回のように

$$\frac{\partial}{\partial t} X = - \nabla \cdot \mathbf{J}_X \quad (62)$$

の形で書かれる。このような式を連続の式と言ひ,  $\mathbf{J}_X$  を  $X$  のフラックス, カレント, 流束などと呼ぶ。

さて, より重要なのは速度場の従う方程式である。密度の従う式は質量の保存則を表していた。一方速度場の従う式は運動量の保存則を表す。体積  $V$  中の運動量の時間変化は

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho(\mathbf{r}, t) \mathbf{v}(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} = \int_V \frac{\partial}{\partial t} \rho(\mathbf{r}, t) \mathbf{v}(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} \quad (63)$$

運動量はもちろんベクトル量であるから,  $V$  内に流入する運動量はまず成分で書き表した方がわかりやすい。単位時間内に体積  $V$  中に流入した運動量の第  $i$  成分の量は, 質量に対する計算と同様に

$$- \int_S \rho(\mathbf{r}, t) v_i(\mathbf{r}, t) \mathbf{v}(\mathbf{r}, t) \cdot d\mathbf{s} = - \int_V \nabla \cdot (\rho v_i \mathbf{v}) d\mathbf{r} \quad (64)$$

\*41 自分は二回やったが, やるたびに内容を忘れてしまう。

\*42 Lagrange 形式を用いると Euler 方程式と等価だが違う形をした Lagrange の流体運動方程式なるものが得られるらしい。

と書ける. さらに運動量の時間変化には圧力も寄与する. 運動量の時間微分は力であったことを思い出すと, 考えている体積にかかる圧力は体積内の流体の運動量を変化させる. もちろん圧力は体積にかかるというよりはその体積を囲む曲面にかかるものである. これはガウスの定理を用いることで

$$-\int_S p(\mathbf{r}t) d\mathbf{s} = -\int_V \nabla p(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} \quad (65)$$

これらを密度の従う式を得たときと同様にまとめると

$$\left[ \frac{\partial}{\partial t} \rho(\mathbf{r}, t) \mathbf{v}(\mathbf{r}, t) \right]_i = -[\nabla p(\mathbf{r}, t)]_i - \nabla \cdot \{ \rho(\mathbf{r}, t) v_i(\mathbf{r}, t) \mathbf{v}(\mathbf{r}, t) \} \quad (66)$$

ここで  $\rho \mathbf{v}$  に対する微分を計算すると

$$\left[ \rho \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{v} \right]_i + v_i \frac{\partial}{\partial t} \rho = -[\nabla p]_i - v_i \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) - [\rho(\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v}]_i \quad (67)$$

両辺に登場する  $v_i$  のかかった項は, 既に得られた密度に対する連続の式を用いることで消去できる. その後両辺を  $\rho$  で割ると速度場の満たす方程式を次のように書き下すことができる.

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{v} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} = -\frac{1}{\rho} \nabla p \quad (68)$$

速度場の満たす式についていくつかの注意をしておく. この流体方程式からは  $p$  は決定できない.  $p$  の形は系によって決まる状態方程式から得られる.  $p$  が  $\rho$  のみによって計算できる場合を考えよう. 例えば理想気体の状態方程式は粒子数 (mol 単位の物質質量ではない) を  $N$  として  $pV = Nk_B T$  と書ける. これを流体場に拡張し, 理想気体の一分子の質量を  $m$  とおくと  $\rho(\mathbf{r}, t) = mn(\mathbf{r}, t)$  ( $n$  は分子の数密度を表す) であるから  $p(\mathbf{r}, t) = \rho(\mathbf{r}, t)k_B T/m$  と書ける. 温度一定の場合には  $p$  は  $\rho$  によってのみ決定される. より一般の気体の場合にも, 統計力学におけるクラスター展開<sup>\*43</sup>の議論によって  $p$  を  $\rho$  で展開できる. このような場合には密度を圧力の関数  $\rho(p)$  として書けることが多い<sup>\*44</sup>. 密度が圧力のみによって決まるとき, 流体を順圧 (barotropic) であるという. 順圧の流体においては

$$\frac{1}{\rho} \nabla p = -\nabla \int \frac{dp}{\rho(p)} = -\nabla P(\rho) \quad (69)$$

と書き直すことができ

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{v} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} = -\nabla P(\rho) \quad (70)$$

が成り立つ.

最後にこの微分方程式そのものが持つ対称性について考察しておこう.  $\mathbf{v}$  は回転や鏡映からなる変換 (三次直交群で表される変換) に対してベクトルとして振る舞う. するとその時間偏微分は

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{v} = \lim_{\delta t \rightarrow 0} \frac{\mathbf{v}(\mathbf{r}, t + \delta t) - \mathbf{v}(\mathbf{r}, t)}{\delta t} \quad (71)$$

とベクトル量の差の形に書き直せるので, やはりベクトル量である. また,  $(\mathbf{v} \cdot \nabla)$  はベクトル量の内積なのでスカラー量であり,  $\rho, p$  も明らかにスカラー量であるから, 残りの項もベクトル量である. けれどもこの方程式の持つ対称性はこれだけではない. もし Euler 方程式がベクトル量の形で書ける, という対称性のみが存在するのであれば,  $(\nabla \cdot \mathbf{v}) \mathbf{v}$  のような量も空間一階微分の一次の項として方程式に登場して良いはずだ<sup>\*45</sup>. そのような項が現れないということは, この方程式は何か他の対称性も持っているに違いない. そこで, ガリレイ変換  $t' = t, \mathbf{r}' = \mathbf{r} - \mathbf{V}t$  を考えると

$$\mathbf{v}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{v}'(\mathbf{r}', t') + \mathbf{V}, \quad \frac{\partial}{\partial x_i} = \frac{\partial x'_j}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x'_j} + \frac{\partial t'}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial t'} = \frac{\partial}{\partial x'_i}, \quad \frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial x'_j}{\partial t} \frac{\partial}{\partial x'_j} + \frac{\partial t'}{\partial t} \frac{\partial}{\partial t'} = -V_j \frac{\partial}{\partial x'_j} + \frac{\partial}{\partial t'} \quad (72)$$

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \rho'(\mathbf{r}', t'), \quad p(\mathbf{r}, t) = p'(\mathbf{r}', t') \quad (73)$$

\*43 これについても勉強して書きたかったが本筋にあまり関係がない上, 致命的な束縛条件である時間的制約により今回は省略する.

\*44 当然必ずそうなるというわけではない. しかしながら密度と圧力是一对である場合がほとんどであろうから, このような数学的には微妙な流れの議論を行っている.

\*45 このことについてはアクティブマターの説明でより詳しく述べる.

が成り立つ。ただしここで  $(\mathbf{r})_i = x_i, (\mathbf{V})_i = V_i$  と略記して、二回登場する添字については和を取った。またスカラー量の変換は混乱するかもしれないが、座標の取り方（つまり位置や時間の測り方）を変えても各点におけるスカラー量は変化しないことから明らかである。これらを速度場の従う Euler 方程式の各項に用いると、

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{v} = \frac{\partial}{\partial t'} (\mathbf{v}' + \mathbf{V}) - (\mathbf{V} \cdot \nabla') (\mathbf{v}' + \mathbf{V}) = \frac{\partial}{\partial t'} \mathbf{v}' - (\mathbf{V} \cdot \nabla') \mathbf{v}' \quad (74)$$

$$(\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} = \{(\mathbf{v}' + \mathbf{V}) \cdot \nabla'\} (\mathbf{v}' + \mathbf{V}) = (\mathbf{v}' \cdot \nabla') \mathbf{v}' + (\mathbf{V} \cdot \nabla') \mathbf{v}' \quad (75)$$

$$\frac{1}{\rho(\mathbf{r}, t)} \nabla p(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\rho'(\mathbf{r}', t')} \nabla' p'(\mathbf{r}, t) \quad (76)$$

が成り立つ。ただし、ガリレイ変換後の座標における空間微分を  $\nabla'$  と書いた。これらを元の Euler 方程式に代入すると、特に時間微分と空間微分から現れる項の一部が打ち消しあって、

$$\frac{\partial}{\partial t'} \mathbf{v}' + (\mathbf{v}' \cdot \nabla') \mathbf{v}' = -\frac{1}{\rho'} \nabla' p' \quad (77)$$

となる。これは元の Euler 方程式と同じ形であるから、この方程式はガリレイ変換対称性を持つ。特にこの式の左辺に登場する微分はそれ自体がガリレイ変換対称性を持っている。そこで

$$\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \quad (78)$$

とにおいて、これを物質微分（Lagrange 微分）と呼ぶこともある。Lagrange 形式のような見方をすれば、これはある流体要素に乗ってその流体要素の諸量を観察したときの時間微分である。ただし本稿ではこれ以降、物質微分は用いない。

## 4.2 局所平衡状態と Euler 方程式

Euler 方程式は既に見たように流体力学の方程式として導出できるが、実は非平衡系に対する議論からも同様の方程式を導出することができる。議論の一部を『非平衡統計物理学』（香取, 2007.）を参考に紹介する。局所平衡状態とは、まさに局所的には平衡状態とみなせる非平衡状態のことである。スケールパラメータ  $\varepsilon$  を

$$\varepsilon = \frac{\text{粒子間距離での粒子数密度の変化量}}{\text{全系の平均粒子数密度}} \sim \frac{\text{微視的な空間スケール}}{\text{巨視的な空間スケール}} \quad (79)$$

と定める。この  $\varepsilon$  が 0 のとき、流れは停止していて系は平衡状態にある。そして  $\varepsilon$  が 0 ではないものの十分に小さい場合には系を局所平衡状態で近似できる。さて、一様な流れがある系であっても、ガリレイ変換を適切に施せば全系の平均的な流速を 0 にできて平衡状態とみなせるから、系はグランドカノニカル分布で記述できるはずである。局所平衡状態ではこのガリレイ変換を系の微小体積ごとに施すと考えれば良い。つまり系を適当なセルに分割し、セル内での流速を 0 にするように変換して確率分布を書き直すのである<sup>\*46</sup>。書き直した確率分布を時刻  $t$  の関数として  $P_\varepsilon(t)$  とする。また、粒子の密度場と速度場を一粒子の質量  $m$ 、各粒子の時刻  $t$  の位置と速度  $\mathbf{q}_i(t), \mathbf{v}_i(t)$  を用いて

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \sum_i m \delta(\mathbf{r} - \mathbf{q}_i(t)), \quad \mathbf{v}(\mathbf{r}, t) = \sum_i \mathbf{v}_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{q}_i(t)) \quad (80)$$

と定める。微視的な定義であるためデルタ関数を用いて書かれているが、実際に物理量として考えるのはこれらを他の関数で畳み込んで平均を取った量であるから発散などを心配する必要はない。このように定めた方程式について連続の式を立てることができるが、今知りたいのはその連続の式の各項を初期分布  $P_\varepsilon(0)$  で平均した量である。実はこの平均を  $O(\varepsilon)$  の項を落として近似的に取った式が Euler 方程式になっている。本来非平衡系ではエネルギーの散逸を考える必要があるはずだが、Euler 方程式の元でエネルギーは保存する。近似で落とした  $O(\varepsilon)$  の項に粘性の効果が入っているのである。流体力学でよく知られた方程式であるナビエ-ストークス方程式は、 $\varepsilon$  の一次の項まで粘性の補正を取り入れた方程式になっている。

<sup>\*46</sup> 詳しい議論は『非平衡統計物理学』（香取, 2007.）に譲る。もう時間がないのである！締め切りを過ぎている気がする。三月から書いているのにどうして……

## 5 アクティブマター

### 5.1 アクティブマター物理学

自ら動く物体（以下では自己駆動粒子と呼ぶ）に関する物理学の分野をアクティブマター物理学と呼ぶ。この分野には大きく分けて二つの視点が存在する。一つ目は勿論、それぞれの自己駆動粒子がどのようにして動いているかを明らかにする視点である。一匹のバクテリアが水の中でどうやって泳いでいるのか、一台の車がどういう原理で動いているのか、一羽の鳥がどのように空気の流れを受けて飛翔しているのか物理的に明らかにするのは、それ自体重要な研究対象である。二つ目は自己駆動粒子が多数集まった「群れ」の挙動を明らかにする視点である。一匹の魚は自分のごく近くのものしか見えていないのに魚の群れはまるでそれ自体が生きているかのように秩序だって動くことがある。特にこの PDF で取り上げるのは二つ目の視点である。群れにおける物理を考えるためには、厳密には一つ一つの自己駆動粒子がどのように動くのか知っておくべきだが、ここではその物理的性質を単純な相互作用として組み込んでしまったモデルを主に考える。さて、自己駆動粒子が多数集まった系はもちろん統計物理学の対象になる。しかし自己駆動粒子が外部からエネルギーを得て動き回っている以上、この「群れ」は非平衡系<sup>\*47</sup> であり、その取り扱いが容易ではない。だからこそ、アクティブマターという複雑な非平衡系の取り扱いを可能にするようなモデルが必要になる。

### 5.2 アクティブマターのモデル化と分類

アクティブマターの構成要素は往々にして生物であり、その一個体一個体は物理学にとっては宇宙以上に複雑な対象かもしれない<sup>\*48</sup>。けれども今知りたいのはあくまで群れの物理であって、各個体にはそこまで興味はない。それなら磁性体の Ising 模型においてそれ自体複雑な対象であるスピンを矢印とみなしたり、量子力学で扱うには複雑な液晶一分子を向きの区別のない単位ベクトルで書き表したりしたように、アクティブマターの構成要素を可能な限り単純な形でモデル化してやれば良いのである。もちろんこのモデル化は一種類ではなく、無数の手法が提案されている。それらを全て紹介するのは現実的ではないので、まずはその大まかな分類について述べる。まずアクティブマターは、その構成要素たる自己駆動粒子の周囲にある流体を無視するかどうか、という観点で大きく二分される。硬めの寒天培地上にばら撒かれたバクテリアでは培地の流れを考える必要がない。また鳥の群れを考える際も、まずは周囲の空気の動きを無視してモデリングするのが妥当であろう。自己駆動粒子以外の流体を無視する場合には群れの中の自己駆動粒子同士の相互作用のみを考えればよい。このような系を Dry な系と呼ぼう。一方で、液体培地中のバクテリアなど、周囲の流体の影響を無視できない場合も存在する。流体が無視できない場合には、当然自己駆動粒子同士の相互作用のみならず自己駆動粒子と周囲の流体の相互作用をも考慮する必要がある。このような系を Wet な系と呼ぶことにしよう。この PDF では差し当たって Dry な系のみを考える<sup>\*49</sup>。

Dry な系は、系を構成する自己駆動粒子の特徴によって三種類に大別できる。一つ目が極性をもった自己駆動粒子 (polar active particle) である。これは自己駆動粒子自体に前後の区別 (極性) があり、進む方向が粒子の極性によって定まっているものを指す。頭がある生き物は大部分の場合これだと思って良い。自動車を取り扱っている例はあまり見かけないが、強いていうならこれに分類されるだろう<sup>\*50</sup>。このような系に適切な相互作用を入れると、棒状の液晶同様、ネマチック相を示しうる。しかしより重要な秩序相として、極性秩序を持った状態が現れることが知られている。この状態では、アクティブマターが向きを揃えて同じ方向に運動する。生き物の群れを物理的に考察するにあたって最も単純で最も不思議な問いは、なぜ自分の周りしか見えていない個体からなる群れが揃って運動できるのか、ということであったが、この問いに答えられるモデルのがこの極性をもった自己駆動粒子なのである。二つ目は極性を持たない自己駆動粒子 (apolar active particle) である。これは粒子自体に前後の区別がなく、前進と後退が可能なものを指す。具体的

<sup>\*47</sup> 平衡状態ではバクテリアは既に死んでいるだろう。車は壊れないだろうが、しかし動くことはできない。

<sup>\*48</sup> 実際生物物理学は宇宙論ほど物理として体系だっていないのではないだろうか。体系を象徴するような方程式はまだないと思われるし (勿論神経の活動電位における Hodgkin-Huxley 方程式のような成功例はあるが)、教科書や研究も各論的である。ただし実験は SF 並に進んでいるように思う。

<sup>\*49</sup> Wet な系について記述するためには、Dry な系の知識に加えて液晶の流体力学 (エリクセン-レスリーの理論) を理解する必要があるため、詳しい解説は "Soft active matter" (Marchetti et al. 2012) に譲る。いずれまとめる目処が立ったら追記するかもしれない。

<sup>\*50</sup> バックしない場合を除く!

には、極性のない棒状の粒子を板の上に並べ、板を振ることによってこのような系が実現できる。このような系は秩序相として、ネマチック相のみを示しうる。三つ目は Self-propelled rod である。これは自己駆動粒子に前後の区別はないものの、進む方向は決まっているような系を指す。粒子に極性がないために、秩序相としてはネマチック相のみを示しうる。Self-propelled rod は極性を持たないバクテリアが互いにぶつかって運動する際の様子をモデル化するために用いることができる。

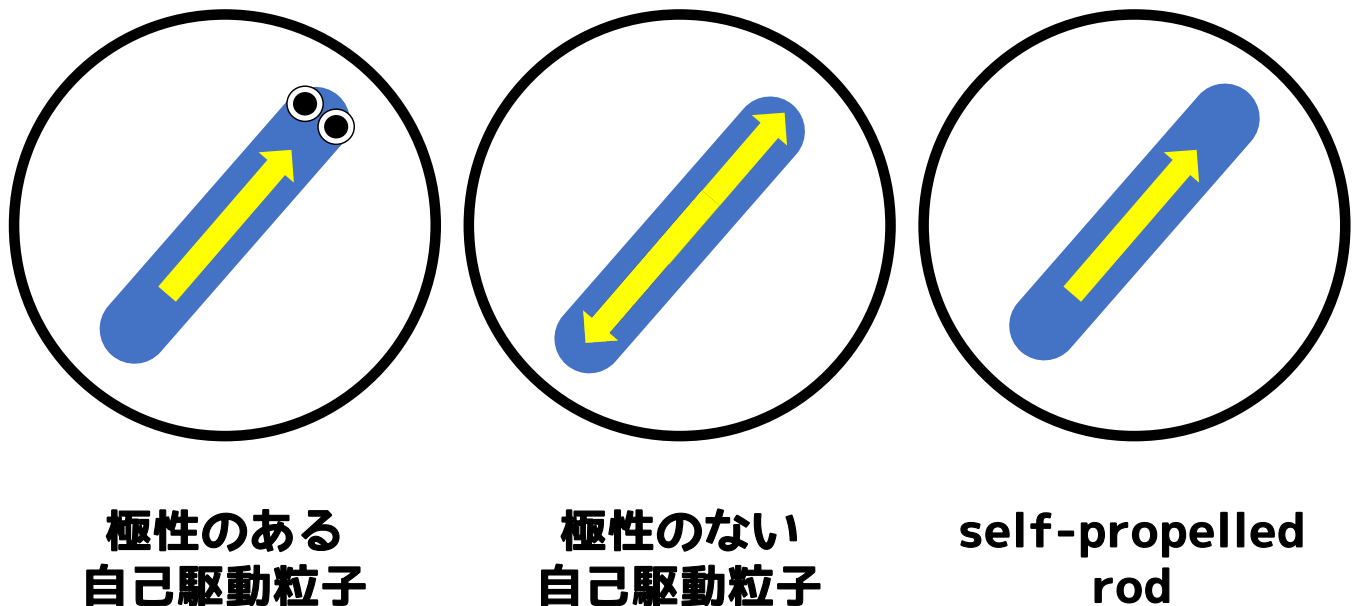


図4 Dry なアクティブマターの簡単な分類。青い棒が粒子の長軸の向きを表し、黄色い矢印が進行可能な方向を示している。特に極性がある場合には極性に合わせて進める向きが決まる。ここでは大きめの生物を想定して極性を目の位置で表現したが、極性は内部物質の濃度や磁気など、もっと一般的な量によって決められる場合もある。

さて、これでアクティブマターを表すモデルの大雑把な分類は終わったと言えるだろう。ただし上で行ったのは粒子同士の相互作用の詳細に立ち入らないモデル化であった。実際にはここに適切な相互作用を追加する必要がある。けれども今回の目標はできるだけシンプルなモデル化であるから、複雑な相互作用を考える必要はない。代表的なものに「周囲の粒子と向き<sup>\*51</sup>を揃える」というものがある。これらのモデルを考察やシミュレーションに耐えうる形、つまり数式で表す試みには、次章以降で挑戦しよう。

### 5.3 離散的な記述

ここでは統計力学における Ising モデルや同期現象の記述で有名な蔵元模型のような、粒子数が有限の値に決まっていることを前提としたモデルを紹介する。この仮定により現象の記述が直感的に行える反面、数式の解析は難しくなってしまうこともある<sup>\*52</sup>。なお、この章の内容に関してはアクティブマター班の別の解説 PDF 「アクティブマターとは」の方が詳しく解説されているので、そちらも参照することをおすすめする。

極性を持った自己駆動粒子に互いに進行方向を揃えようとする相互作用を入れたモデルとして 2 次元 Vicsek モデルが知られている。このモデルでは諸量を次のように定める。全ての粒子の速さを  $v_0$  と統一し、 $j$  番目の粒子の  $t$  ステップ目の位置を  $\mathbf{r}_j^t$  とする。さらに進行方向を角度  $\theta_j^t$  によって定義して、その向きの単位ベクトルを  $\mathbf{e}_{\theta_j^t}$  と書く。このもと

\*51 極性のある場合は進行方向のことを向きというのが良いだろう。極性がない場合には粒子同士がぶつかって粒子の長軸が揃う、くらいの意味で捉えれば良い。

\*52 この例えが正しいかわからないが、Ising 模型は 2 次元の場合は解くのが難しく、3 次元の場合は未だ解かれていない (?) ようである。蔵元模型の方は既に解かれている。大体のモデルは手では解かず数値計算することになるが現代の科学ではあるが、それでも問題を解析的に解くことにはある種の憧れを感じずにはいられない。ただし現実には、レポートの課題にさえ苦戦しているのが実情である。

で、各粒子の位置と進行方向の時間発展を次のように定める。

$$\mathbf{r}_j^{t+1} = \mathbf{r}_j^t + v_0 \mathbf{e}_{\theta_j^t} \quad (81)$$

$$\theta_j^{t+1} = \arg \sum_{k \in \Omega_j} e^{i\theta_k^t} + \zeta_j^t \quad (82)$$

ただしここで  $\zeta_j^t$  はホワイトノイズであり、進行方向を更新する際の和は  $j$  番目の粒子から半径  $R$  の円内に存在する全ての粒子に渡ってとる。このモデルで注目したいのは極性秩序相への相転移である。この相を考えるための秩序パラメータとして

$$\varphi^t = \frac{1}{N} \left| \sum_{j=1}^N e^{i\theta_j^t} \right| \quad (83)$$

が定義される。粒子の進行方向がばらばらであれば和は打ち消しあって 0 になり、粒子の進行方向が揃っていれば和の絶対値が  $N$  に近づく。この量を大規模なシミュレーションによって計算すると、ノイズを小さくするか密度を大きくした場合に相転移が見られた。しかもこの量は相転移の前後で飛びを示したのである<sup>\*53</sup>。秩序パラメータが相転移の前後で飛びを示したことから、Vicsek モデルにおける無秩序相と極性秩序相の間の相転移は一次相転移であることがわかる。実際の数値計算でも Vicsek Wave と呼ばれる秩序相と無秩序相が同時に現れる現象が観察されている。もちろんこれは一次相転移に特有の相共存である。

極性を持たない自己駆動粒子のモデルとしては active nematics が知られている。諸量の定義は Vicsek モデルの場合と全く同様で、相互作用と位置の時間発展のみが異なっている。特に位置の時間発展は特徴的で、進行方向は毎ステップランダムに決まる。どちらにも動ける無極性な自己駆動粒子の最も極端な例といえるだろう。なお、進行方向の時間発展は長軸の向きを揃える形で記述されている。

$$\mathbf{r}_j^{t+1} = \mathbf{r}_j^t \pm v_0 \mathbf{e}_{\theta_j^t} \quad (84)$$

$$\theta_j^{t+1} = \frac{1}{2} \arg \sum_{k \in \Omega_j} e^{2i\theta_k^t} + \zeta_j^t \quad (85)$$

Self-propelled rod のモデルは、単に self-propelled rods と呼ばれているようである（西口, 佐野, 2016.）。これは相互作用項のみが Vicsek モデルと異なる。つまり長軸の向きを平行、あるいは反平行に揃えるような相互作用が現れる。実際に数式を書き下すと、

$$\mathbf{r}_j^{t+1} = \mathbf{r}_j^t + v_0 \mathbf{e}_{\theta_j^t} \quad (86)$$

$$\theta_j^{t+1} = \arg \sum_{k \in \Omega_j} \text{sign}[\cos(\theta_k^t - \theta_j^t)] e^{i\theta_k^t} + \zeta_j^t \quad (87)$$

なお、系がネマチック相を示す場合の秩序パラメータは

$$\phi^t = \frac{1}{N} \left| \sum_{j=1}^N e^{2i\theta_j^t} \right| \quad (88)$$

で与えられる。active nematics と self-propelled rods のいずれにおいても無秩序相からネマチック相への相転移は一次相転移であることが知られている。また、Vicsek モデルと self-propelled rods の重要な性質として向きが長距離に渡って揃う真の長距離秩序を示すことが挙げられる。2次元以下の平衡系ではこのタイプの秩序が現れず、準長距離秩序という相関関数がべき的に減衰する<sup>\*54</sup> 状態までしか現れないことが厳密に証明されている<sup>\*55</sup> ため、これはアクティブマターの非平衡系としての側面が強く現れているとみなせるだろう。アクティブマターのモデルに対しては他にも興味深い性質が多々現れるが、その解説は既にある日本語文献（西口, 佐野, 2016.）やアクティブマター班の他の解説 PDF に

\*53 相転移の有無を実験結果をもとに判断するのは難しい。相転移における諸量の飛びや発散は単純に熱力学的極限、すなわち無限に大きい系でのみ成り立つことだからである。しかしながらスケールリング仮説を認めることで有限の系の結果に対してこのような飛びを示すことが可能になることが知られている。詳しくは『相転移・臨界現象の統計物理学』（西森, 2005）を参照せよ。

\*54 難しげな言い回しだが、遠くまで向きが揃っているわけではなく、基準とした場所から遠ざかるにつれてだんだん向きがずれてくる程度の意味だと思えば良いだろう。

\*55 Mermin-Wagner の定理と呼ばれている。

譲る。また、モデルに対して成り立つことを実験で示すことができるかどうか、というのはまた別の（大きな）問題であり、様々な研究が行われている<sup>\*56</sup>。

最後に最近提案された興味深いモデルについても紹介しておこう。Vicsek モデルでは、粒子が影響を受ける範囲を円形にとった。これは粒子 A が他の粒子 B の影響を受ける時、粒子 B にも粒子 A が見えていて影響を受けることを表している。力学で言うところの「作用反作用の法則」のようなものが存在することになっている。しかし実際の生き物で、「作用反作用の法則」は本当に成り立っているのだろうか。魚や鳥は、自分の視界の範囲内の仲間しか見えていないのではないだろうか。そこで視界の効果の入ったモデルが提案され、「作用反作用の法則」の破れのある系がどのように振る舞うかが詳細に研究されている (Lucas& Fernand, 2019)。パラメータを様々に変えて数値計算を行い、実現する状態を相図として記述しているのも面白い<sup>\*57</sup>。

## 5.4 連続場による記述

離散的な記述ではシミュレーションは容易でも、数式を相手にした解析は難しくなってしまう<sup>\*58</sup>。ここで、十分な数の自己駆動粒子の存在を仮定すると、その群れはある種の流体なのではないかと考えることができる。例えばアクティブマター班の（ものでなくとも良いが）Swarming 実験の動画を見るとそういう気持ちになれるだろう<sup>\*59</sup>。極性のない自己駆動粒子は本質的にテンソル秩序パラメータなしには記述できないが、極性のある自己駆動粒子は向きがはっきりしているためベクトルで記述できる<sup>\*60</sup>。それならここまでの知識を用いることで、流体の方程式のような形でアクティブマターを記述できるのではないだろうか。

ここが本稿のゴール地点の一つであり、これまでに学んできた数々の伏線を回収する場である。Vicsek モデルで記述されるような、極性を持つアクティブマターを連続場でモデル化しよう。そのためには構成要素（以下、より簡単に書くため粒子と呼ぶことにする。）を特徴付けるようなパラメータを連続的な場で表す必要がある。通常の流体では密度場と速度場の時間発展が現れたことを思い出し、アクティブマターにおいてもこれらの量を考えることにしよう。時刻  $t$  における  $n$  番目の粒子の位置を  $\mathbf{R}_n(t)$ 、速度を  $v_0 \boldsymbol{\nu}_n(t)$  とおく。ただしここで、Vicsek モデルにおいては各粒子の速度が一定であったことからここではその速度を  $v_0$  とし、各粒子の速度ベクトルの向きを表す単位ベクトルを  $\boldsymbol{\nu}_n(t)$  とした。すると数密度場は次のように定めることができる。

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \sum_n \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n(t)) \quad (89)$$

$\delta(x)$  はデルタ関数であり、この数密度場は粒子が存在する場所でいかにも発散しそうな形をしている。実際にはこれをガウス分布など、全空間で積分すると 1 になり、原点を中心に  $\delta V$  程度の空間で 0 でない正の値を持つような適当な関数  $g(\mathbf{r})$  を用いて

$$\int \rho(\mathbf{r}') g(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d\mathbf{r}' = \sum_n g(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n(t)) \quad (90)$$

と畳み込んだ量が観測される。もちろん  $\delta V$  は、その中で畳み込む量が一樣になる程度に小さく、しかし平均を取れる程度に大きい空間である必要がある。やっていることは液晶において一分子の向きを表すベクトル  $\mathbf{m}$  を微小体積  $\delta V$  内で平均して配向ベクトル  $\mathbf{n}$  を得たのと同様の操作であり、これを粗視化という。統計力学では粗視化に用いる関数は熱平均を取るように決める場合もあるが、ここでは単に空間平均を取るように定めれば十分であろう。次に速度場を考える必要があるのだが、既に決めたように各粒子の速度は等しいので実際に問題になるのは各粒子の向き  $\boldsymbol{\nu}_n(t)$  のみである。そこで規格化された速度ベクトル場  $\mathbf{p}(\mathbf{r}, t)$  を次のように定める。

$$\mathbf{p}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\rho(\mathbf{r}, t)} \sum_n \boldsymbol{\nu}_n(t) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n(t)) \quad (91)$$

\*56 物性などのマイクロな実験よりも対象が見やすく容易なのではと思ってしまいがちだが、生き物を相手にすると全く別の困難が生じる。バクテリアは人間の言うことを聞いてくれないどころか、勝手に増え過ぎたり勝手に弱ったりするのだ。

\*57 これがどれくらい重要な研究なのかは自分ではまだ判断できないが単に面白いと感じたので紹介しておく。研究の妥当性や重要性を評価するのは一学生には無理ですね。

\*58 簡単に見える二次元 Ising 模型でさえ、その厳密解を求めるのはそれなりに面倒である。

\*59 アクティブ乱流は培養液中の枯草菌を用いた Wet な系に対する実験のため少し話が変わってくる。

\*60 おそらくこれではネマチックな秩序相が記述できないが、興味があるのは当面極性秩序相のみである。

明らかに速度場  $\mathbf{v}$  は  $v_0 \mathbf{p}(\mathbf{r}, t)$  によって得られるが、適当なスケール変換で  $v_0 = 1$  とできる（あるいはそのように距離の測り方を定める）ことができるから、 $\mathbf{p}(\mathbf{r}, t)$  そのものを速度場として扱って良いだろう。さて、polar なアクティブマターの連続場による記述において最も重要なのが、速度場  $\mathbf{p}(\mathbf{r}, t)$  が秩序パラメータの役割をも果たすことである。粗視化の関数  $g$  が値を持つ範囲に含まれる粒子の  $\nu_n(t)$  が全て等しい、すなわち各粒子の向きが揃っているときには、 $\nu_n(t)$  を和の外に出すことができる。すると

$$|\mathbf{p}(\mathbf{r}, t)| = \left| \frac{\nu_n(t)}{\rho(\mathbf{r}, t)} \sum_n \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n(t)) \right| = |\nu_n(t)| = 1 \quad (92)$$

となる。ただしここで数密度場の定義式を用いた。一方で粒子の向きがばらばらの場合には、様々な  $n$  に対して  $\nu_n(t) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n(t))$  が打ち消しあい、 $|\mathbf{p}(\mathbf{r}, t)| = 0$  となる。したがって規格化された速度場  $\mathbf{p}$  は粒子の向きの揃い具合を示す極性秩序パラメータでもある。ここまでで得られた二つの場について連続の式を適用して、Toner-Tu モデルを導こう。数密度場については明らかに、既に見た一般の流体における質量密度の場合と同様に連続の式が成り立つ。これは粒子数の保存を示している。つまり今回の系では、群れの中で運動している最中に個体が死んでしまったり、新たな個体が誕生したりしないことを仮定している。このような仮定は多くの群れに対して適切であろう。バクテリアのような高頻度で分裂して増殖する生物になると少し怪しい場合があるかもしれないが、ここではそのような場合は考えないことにする。結局、数密度場に対する連続の式を書き下すと

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\mathbf{r}, t) = -\nabla \cdot (\rho v_0 \mathbf{p}) \quad (93)$$

である。では速度場についての式はどのような形で書かれるべきだろうか。まずは順圧の Euler 方程式から出発しよう。

$$\frac{\partial \mathbf{p}}{\partial t} + (\mathbf{p} \cdot \nabla) \mathbf{p} = -\nabla P(\rho) \quad (94)$$

Euler 方程式の解説の際に述べたように、この方程式には熱散逸を記述する粘性の効果が入っていない。無論最もメジャーな粘性の効果を追加するとナビエ-ストークス方程式に帰着するが、今回はただの流体ではなく群れの非平衡状態を考えたいのである。ここで  $\mathbf{p}$  が秩序パラメータでもあったことを思い出すと、 $\mathbf{p}$  は TDGL 方程式同様の式にしたがつて時間発展するはずだ。そこで上の流体方程式の粘性項として自由エネルギーの汎関数微分による効果を用いることにしよう。さらに TDGL 方程式の場合同様にノイズの効果も存在するに違いない。これを書き下すと、

$$\frac{\partial \mathbf{p}}{\partial t} + (\mathbf{p} \cdot \nabla) \mathbf{p} = -\nabla P(\rho) - \gamma \frac{\delta F}{\delta \mathbf{p}} + \boldsymbol{\xi}(\mathbf{r}, t) \quad (95)$$

ただし  $\boldsymbol{\xi}(\mathbf{r}, t)$  はホワイトガウシアンノイズで、 $\langle \xi_i(\mathbf{r}, t) \xi_j(\mathbf{r}', t') \rangle = 2\Delta \delta_{ij} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t')$  である。TDGL 方程式の場合は  $\Delta = \gamma k_B T$  であったが、微視的なバクテリアや人工粒子の場合とはまったく魚や鳥の群れといった系においてはノイズを熱由来のものに限定する必要はない。それらは生物が周囲の個体に向きを揃えようとした際に生じる微妙なずれかもしれないし、そもそも鳥や魚は熱揺らぎの効果を考えるには巨視的すぎる対象のように思われる。また、TDGL 方程式では本来自由エネルギーの汎関数微分による効果を関数  $\Gamma$  で畳み込むのであったが、ここではある地点での自由エネルギーの傾きはその地点のみ影響するという最も簡単な場合を考えた。

ここで、自由エネルギーの形を具体的に決める必要が生じる。もちろん最も原理的には、系の対称性を考えて許される項のみを残さなければならないだろう。例えば群れを鏡写しにしても系の自由エネルギーは変化しないだろうし、適当に回転させて見たところでやはり自由エネルギーは不変に保たれる。結局残る項は  $\mathbf{p}$ ,  $\rho$  とそれらの微分から構成されるスカラー量であろう。けれどもここではそのような手法を取る代わりに、これまでで紹介してきた液晶や相転移に関する議論から自由エネルギーを現象論的に構成しよう。Toner-Tu モデルは Vicsek モデルで記述される系を流体場で表現したものともみなせるから、Vicsek モデルで観察できる現象を再現する必要がある。ここでは特に系の密度が大きくなった時に、無秩序相から秩序相（向きの揃った集団運動）への相転移が見られることに注目する。転移密度（相転移が起きる密度）を  $\rho_c$  とする。ランダウの擬似自由エネルギーの議論を思い出して自由エネルギー密度を  $|\mathbf{p}|$  で展開し、

$$f_{\text{trans}}(\rho, |\mathbf{p}|) = a(\rho_c - \rho) |\mathbf{p}|^2 + b|\mathbf{p}|^4 \quad (96)$$

とおく。ただし  $a$  は温度  $T$  によって決まる正の数であり、 $b$  は  $\rho$  と  $T$  の関数で、やはり正であるとする。これは明らかにスカラー量である。ランダウの擬似自由エネルギーの議論を思い出してこの式を  $|\mathbf{p}|$  の関数と見た場合の概形を考察し



よう。  $\rho \leq \rho_c$  では  $|\mathbf{p}| = 0$  のみが極小値となるが、  $\rho > \rho_c$  では  $|\mathbf{p}| = 0$  はもはや極大値であり、  $|\mathbf{p}|$  がある正の数の場合に極小値をとる。したがって  $f_{\text{trans}}$  は密度による相転移を記述する項であると言えるだろう。ここでいくつか注意をしておこう。  $|\mathbf{p}|$  のより高次の項は  $|\mathbf{p}| < 1$  の場合、つまり系が完全な秩序相にはない場合のみを考えると  $|\mathbf{p}|$  の四次の項に比べて十分無視できる。また、  $|\mathbf{p}|^3$  の項はもちろんスカラーであるから捨っても良いが、あくまで最小限のモデルを作るという観点からは二次と四次の項さえあれば相転移を記述できて十分と言えるだろう。 Vicsek モデルで実際に起こるのは一次相転移であることが知られているものの、液晶の場合と違って今回は非平衡系を考えており、しかも自由エネルギーにはさらにいくつかの項が追加されるので、三次の寄与を取り入れることなく一次相転移を記述できる可能性は十分にある\*61。さて、他にはどのような項を自由エネルギーに追加すべきだろうか。式で記述する対象として細長い棒状のバクテリアを考えてみよう。一度これらの向きが揃ってしまうと、向きが揃ったバクテリアの集団を捻ったり曲げたりするためにはある程度の力が必要になるはずである。それはもちろんネマチック液晶における Frank の弾性自由エネルギーの形をしているはずだ\*62。液晶のテンソル秩序パラメータによる展開をスカラー秩序パラメータと配向ベクトルの形に書き直した際にわかったように、このような効果は秩序相以外にも現れる。ただし無秩序な相ではこのような効果は存在していても小さいはずである。このことを簡単に表現するためには単に Frank 弾性自由エネルギーを  $\mathbf{n}$  の代わりに  $\mathbf{p}$  を用いて書き直せば良いであろう。実際こうすれば  $|\mathbf{p}| < 1$  の場合には単位ベクトルを用いた場合に比べて自由エネルギーが小さくなるはずである。実際にこのような Frank 弾性自由エネルギー由来の項を書き下せば、

$$f_{\text{Frank}}(\rho, \mathbf{p}) = \frac{1}{2}K_1 (\nabla \cdot \mathbf{p})^2 + \frac{1}{2}K_2 \{\mathbf{p} \cdot (\nabla \times \mathbf{p})\}^2 + \frac{1}{2}K_3 \{\mathbf{p} \times (\nabla \times \mathbf{p})\}^2 \quad (97)$$

ただし弾性係数  $K_1, K_2, K_3$  は  $\rho$  に依存すると見て良い。ここまでの結果を含めて全自由エネルギーを

$$F[\rho(\mathbf{r}, t), \mathbf{p}(\mathbf{r}, t)] = \int \{f_{\text{trans}}(\rho(\mathbf{r}, t), \mathbf{p}(\mathbf{r}, t)) + f_{\text{Frank}}(\rho(\mathbf{r}, t), \mathbf{p}(\mathbf{r}, t))\} d\mathbf{r} \quad (98)$$

とする。実は対称性から許される項はまだまだ沢山あるのだが、何でも自由エネルギーに押し付けていると今度は物理的な意味がわかりにくくなるので、今回はネマチックな相互作用と相転移を最低限記述する項だけを自由エネルギーに含めた。最終的には自由エネルギーを汎関数微分することによって流体方程式を導くのだが、その計算は一旦後に回して別の部分を議論する。

本当にこれでモデルは完成だろうか。ここで、Euler 方程式のガリレイ対称性に関する議論を思い出すと、流体方程式の左辺

$$\frac{\partial \mathbf{p}}{\partial t} + (\mathbf{p} \cdot \nabla) \mathbf{p} \quad (99)$$

はガリレイ変換に対して不変な形になっているのだった。ところが今考えている群れのモデルでは、実はガリレイ変換対称性は破れてしまうのである。  $t \rightarrow t' = t, \mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}' = \mathbf{r} - \mathbf{V}t$  とガリレイ変換したとき、

$$\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p}' = \mathbf{p} - \frac{\mathbf{V}}{v_0} \quad (100)$$

と変換されるはずである\*63。すると元の座標系で観察したときに  $|\mathbf{p}| = 1$ 、すなわち秩序相にあったからと言って、ガリレイ変換後の座標系で観察したときに  $|\mathbf{p}'| = 1$  になるとは限らなくなってしまう\*64。つまり群れの方程式をガリレイ変換してしまうと、元の座標系で群れがどのような相にあったのかわからなくなってしまうのである。これでは変換によって見える物理が変わってしまうから到底方程式がガリレイ変換対称性を持つとはいえない。もう少し具体的な例でこのことを解釈しなおしてみよう。あなたが草原に座っていると羊の群れがやってきた。羊の群れをよく見ると全ての個体が必死に同じ向きに走っていることが分かった。つまり羊の群れは秩序相を示していたのである。さて、羊の群れを見ているとあなたも一緒に走りたくなってきた。そこであなたは群れに並走することにした。羊たちと全く同じ速度で並走しながら羊の群れを見ると、羊は止まって見えるはずである。そこではいかなる集団運動も観察することができない。当

\*61 とはいえ無邪気に三次の項を落とすのはかなり歯切れが悪い。もう少し考察を進め、何らかの知見を得たら追記することしよう

\*62 牛や羊の群れに実際にこのような自由エネルギーが存在するだろうか？確かに群れを曲げたりするにはある程度のエネルギーが必要にはなりそうだが、ただこのような弾性エネルギーを考えて良いのは粒子数が多く群れをベクトル場でモデル化できたことによると言えるだろう。

\*63 一瞬、  $\mathbf{p}$  の定義にまで遡って各粒子の速度を  $v_0$  の代わりに  $|\mathbf{v}_n - \mathbf{V}|$  で割って変換後の  $n\mathbf{u}_n$  を定義したくなるかもしれない。けれども  $\mathbf{V} = \mathbf{v}_n$  であった時にこのような項の定義が不明確になってしまうし、そもそも今は  $\mathbf{p}$  を  $\mathbf{v}$  を絶対値が1以下になるように測り直したものに過ぎない。速度場が  $\mathbf{v} - \mathbf{V}$  と変換を受けることからやはり、本文中のように変換するのが正しいと言えるだろう。

\*64 最早  $|\mathbf{p}'| \leq 1$  である確認すらなくなってしまう。

然あなたは人間なので羊たちが向きを揃えていることも分かるし本当は走っていることも知っている。けれども今回のモデルでは、個体の向きは速度ベクトルを通してのみわかることになっているから、速度0に見える羊の向きが揃っているかどうかはやはりわからないのである。結局群れの集団運動を観察するためには群れが運動の基準にしているところに対して観察者が静止している必要がある。鳥や羊の集団運動を観察したいなら、地に足をつけて観察する必要がある。魚の群れの集団運動を観察したいなら水面か海底か、あるいは水槽の外で止まっていなければならない。バクテリアの秩序立った運動を見るなら顕微鏡のステージをバクテリアの運動に合わせて動かすなどということをしてはいけないのだ。これを踏まえて再び流体方程式の左辺を見よう。左辺の空間微分のいわゆる移流項は最早  $\mathbf{p}$  の時間偏微分と同じ変換則に従うベクトルでさえあれば良い。ただし秩序相では群れが長距離に渡って向きを揃えて運動するために  $\mathbf{p}$  の一階の空間微分が一次の微小量になることを考えると、 $\mathbf{p}$  の一階の空間微分の一次以下の項と  $\mathbf{p}$  のみからなるベクトル量のみが元の移流項と同程度の微小量として許される。すると流体方程式は

$$\frac{\partial \mathbf{p}}{\partial t} + \lambda_1 (\mathbf{p} \cdot \nabla) \mathbf{p} + \lambda_2 (\nabla \cdot \mathbf{p}) \mathbf{p} + \lambda_3 \nabla (|\mathbf{p}|^2) = -\nabla P(\rho) - \gamma \frac{\delta F}{\delta \mathbf{p}} + \boldsymbol{\xi}(\mathbf{r}, t) \quad (101)$$

と三種類の移流項を持つ形に書き換えられる<sup>\*65</sup>。これはガリレイ変換対称性の破れによって運動量が保存しないことに繋がっている<sup>\*66</sup>。Toner-Tu モデルの左辺はこの時点で既に出揃った。あとは右辺を考えていこう。

圧力項について考察しよう。圧力項は現状、単に順圧のオイラー方程式とのアナロジーから付け加えたものに過ぎない。けれども対称性の視点から式を見直すと、これは密度のスカラー関数の勾配をとることによって得られるベクトル量であると見ることができる。しかしこのような項が許されるなら、 $|\mathbf{p}|$  (これは勿論スカラー量である) を引数に持つスカラー量の勾配も許されて然るべきである。そこで圧力項の代わりに  $\nabla P_1(\rho, |\mathbf{p}|)$  を用いることにしよう。この項は勾配の中身が  $\rho$  のみならず  $|\mathbf{p}|$  にも依存しており、最早順圧の条件を満たしていないので純粋に圧力と解釈するのは困難そうである。実際のところアクティブマターの系における圧力を考えるというのはそれ自体が重要なテーマのようで、今回方程式中に出てくるこの項は単に Euler 方程式の圧力に似ているだけの対称性から許される項だと考えるのが良さそうである。さらに Toner(2012) では元々の Toner-Tu モデルでは無視していたとして<sup>\*67</sup>非等方な圧力項  $-\mathbf{p}(\mathbf{p} \cdot \nabla P_2(\rho, |\mathbf{p}|))$  が追加されている。確かにこの量はベクトルの変換則に従う。もちろんこのような項は非平衡の流体であるから許されるのであって、平衡状態の流体では出現しえない。そのような静止した流体では互いに接触した流体要素間にはたらく力の方向は接触面に垂直で、力の大きさは接触面の方向によらず接触面の面積に比例するので (パスカルの原理) 圧力は等方的になる。なお、Toner(2012) によるとこの項を考慮に入れても本質的な解析結果はほとんど変わらないようである。また、対称性による理論は  $P_1, P_2$  の詳細な形、すなわち状態方程式を決定しない。ただしこれらの関数が  $\rho$  を引数に持つ以上、物理的に意味を持つ<sup>\*68</sup> 状態方程式は密度の平均値  $\rho_0$  からのずれ  $\rho - \rho_0$  で展開できる。そこで Toner(2012) では、これらの圧力 (のように見える関数) を

$$P_1(\rho, |\mathbf{p}|) = \sum_{n=1}^{\infty} \sigma_n (|\mathbf{p}|) (\rho - \rho_0)^n, \quad P_2(\rho, |\mathbf{p}|) = \sum_{n=1}^{\infty} \mu_n (|\mathbf{p}|) (\rho - \rho_0)^n \quad (102)$$

と展開した形が与えられている。

最後に自由エネルギーの汎関数微分を実際に計算して流体方程式の具体的な形を手に入れよう。  $f = f_{\text{trans}} + f_{\text{Frank}}$  とおく。以下では一つの項で二回登場した添字については 1 から 3 まで (あるいは  $x$  から  $z$  まで) 和をとることにする。

\*65 この辺りの議論をアクティブマター班の班長としていたところ、散逸系ならガリレイ変換対称性が破れるのは自明では? という話が出てきた。これ自体は真偽がまだよくわからないところだが、ひとまず最も簡単な空気抵抗を含む運動方程式を考えてみると、抵抗が速度に比例するために確かにガリレイ変換対称性が破れている。ところがもう一步議論を深めてみると、空気抵抗は注目している物体と周囲の気体分子との衝突によるものであり、周囲の気体分子の効果も含めると空気抵抗の項が書き変わってガリレイ変換対称性を持つような気がしてくる。ここで上のアクティブマターの説明を振り返ると、大事なのは地面などの基準系から見た群れの相対速度であって、初めからこれを  $\mathbf{p}$  などとしてしまえば  $\mathbf{p}$  はガリレイ変換に対して不変で、系をガリレイ変換対称にできる希望が湧いてくる。いよいよ混乱してきたがこのように考えても地面を基準として絶対視してしまっていることに変わりはなく、速度場の定義を相対速度にしてしまったためにやはり移流項がオイラー方程式の形でなくても良いことになる。むしろ空間微分がよりややこしいことになって辻褃合わせが困難になるため、このような方針はやはりよくないのかもしれない。大体地面からの相対速度が本質的だと思うなら地面に止まって測定したときの方程式だけを考えれば良いのだ。

\*66 そもそもガリレイ対称性が破れていたら速度をずらすことによって局所平衡状態で記述することはできないと思われる。本質的には対称性だけが式の形を決めているのだ。もっともそれだと意味が分かりにくいので類推を多用するのだが。

\*67 そんなわけでいくつかの文献にはこの項は反映されておらず、結果として広報ポスター中の数式でもこの項は省かれてしまっている。あまり本質的ではない頃らしいところが救いか。

\*68 数学的には考えるべきだが物理としては奇妙な、例えば不連続性を持つものや微分が不連続になってしまうようなものは物理では無視しがちである。もちろん相転移など、そのような特異性に注目して説明できることもあるが。

汎関数微分は定義にしたがって次のように計算できる\*69.

$$\left[ \frac{\delta F}{\delta \mathbf{p}} \right]_i = \frac{\partial f}{\partial p_i} - \frac{\partial}{\partial x_j} \frac{\partial f}{\partial \left( \frac{\partial p_i}{\partial x_j} \right)} \quad (103)$$

ただしここで、 $f$  の偏微分をとる際に  $p_i$  と  $\partial_j p_i$  は全く関係のない別の文字だと考えて計算する必要があることに注意する。また、計算の簡単のために  $f_{\text{Frank}}$  の bend 項  $\{\mathbf{p} \times (\nabla \times \mathbf{p})\}^2$  の代わりに  $\{(\mathbf{p} \cdot \nabla) \mathbf{p}\}^2$  を用いることにする。ネマチック液晶においてこれらが等しかったのは  $\mathbf{n}$  が単位ベクトルであったためである。しかしながら、アクティブマターにおいてもこのような相互作用が強く現れるのは  $|\mathbf{p}|$  が 1 に近い秩序だった場合で、 $|\mathbf{p}|$  が小さければ bend 項をどちらの形で書いても小さい値にしかならないと期待されるので、今回もこれらがほとんど等価な弾性由来の影響を与えるはずである。いずれにせよ実際の計算は泥沼にかなり近い。

$$\frac{\partial f_{\text{trans}}}{\partial p_i} = \frac{\partial}{\partial p_i} \{a(\rho_c - \rho)p_j p_j + bp_k p_k p_l p_l\} = 2a(\rho_c - \rho)p_i + 4bp_j p_j p_i \quad (104)$$

$$= [2a(\rho_c - \rho)\mathbf{p} + 4b|\mathbf{p}|^2 \mathbf{p}]_i \quad (105)$$

ただし、 $f_{\text{trans}}$  は  $\mathbf{p}$  の空間微分にはよらないので汎関数微分の第二項への寄与は 0 となる。さらに、Frank 弾性自由エネルギー由来の項の計算は次のように計算できる。

$$\frac{\partial f_{\text{Frank}}}{\partial p_i} = \frac{\partial}{\partial p_i} \left[ \frac{1}{2}(K_1 - K_2) \frac{\partial p_j}{\partial x_j} \frac{\partial p_k}{\partial x_k} + \frac{1}{2}K_2 \frac{\partial p_j}{\partial x_k} \frac{\partial p_j}{\partial x_k} + \frac{1}{2}K_3 \left( p_k \frac{\partial p_j}{\partial x_k} \right) \left( p_l \frac{\partial p_j}{\partial x_l} \right) \right] = K_3 \left( \frac{\partial p_j}{\partial x_i} \right) \left( p_l \frac{\partial p_j}{\partial x_l} \right) \quad (106)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \frac{\partial f_{\text{Frank}}}{\partial \left( \frac{\partial p_i}{\partial x_j} \right)} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ (K_1 - K_2) \delta_{ij} \frac{\partial p_k}{\partial x_k} + K_2 \frac{\partial p_i}{\partial x_j} + K_3 p_j p_k \frac{\partial p_i}{\partial x_k} \right] \quad (107)$$

$$= (K_1 - K_2) \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial p_k}{\partial x_k} + K_2 \frac{\partial^2 p_i}{\partial x_j \partial x_j} + K_3 \frac{\partial}{\partial x_j} \left( p_j p_k \frac{\partial p_i}{\partial x_k} \right) \quad (108)$$

$$= [(K_1 - K_2)\nabla(\nabla \cdot \mathbf{p}) + K_2 \nabla^2 \mathbf{p} + K_3 \{(\nabla \cdot \mathbf{p})(\mathbf{p} \cdot \nabla) \mathbf{p} + (\mathbf{p} \cdot \nabla)^2 \mathbf{p}\}]_i \quad (109)$$

したがって流体方程式の粘性項は、

$$-\gamma \left[ \frac{\delta F}{\delta \mathbf{p}} \right]_i = [-2\gamma a(\rho_c - \rho)\mathbf{p} - 4\gamma b|\mathbf{p}|^2 \mathbf{p}]_i - \gamma K_3 \left( \frac{\partial p_j}{\partial x_i} \right) \left( p_l \frac{\partial p_j}{\partial x_l} \right) \quad (110)$$

$$+ \gamma [(K_1 - K_2)\nabla(\nabla \cdot \mathbf{p}) + K_2 \nabla^2 \mathbf{p} + K_3 \{(\nabla \cdot \mathbf{p})(\mathbf{p} \cdot \nabla) \mathbf{p} + (\mathbf{p} \cdot \nabla)^2 \mathbf{p}\}]_i \quad (111)$$

と書き下すことができる。実はここで求めた長い式の内、いくつかの項は最終的に流体の方程式には登場しないことがわかる。Toner & Tu(1998) によると、群れの長波長（長距離）、長時間の現象にのみ注目したい\*70という観点から、式を簡単にするために時間微分と空間微分の一次の項のみを残したとある。ただしここで空間微分は二階のものまで考えている。賢明な読者はこの不誠実な近似に目を疑うかもしれない。場の長波長成分は  $|\mathbf{k}| \ll 1$  なる波数を用いて  $f(\mathbf{r}) = \tilde{f}(\mathbf{k})e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$  のような形を持つはずである。すると一階の空間微分の二次の項の大きさは  $|\mathbf{k}|^2 |\tilde{f}(\mathbf{k})|^2$  程度であり二階の空間微分の一次の項の大きさは  $|\mathbf{k}|^2 |\tilde{f}(\mathbf{k})|$  程度である。前者が後者に対して無視できるためには、 $|\tilde{f}(\mathbf{k})| \ll 1$  でなければならない。一方秩序相やそれに近い状態では長波長成分が支配的になるはずであるから、このような条件は必ずしも成り立たないだろう\*71。それに Toner-Tu モデルには空間微分の項として  $(\mathbf{p} \cdot \nabla)^2 \mathbf{p}$  が現れるが、この中には明らかに二階微分の一次の項だけでなく一階微分の二次の項も含まれる。あるところでは一階微分の二次の項を無視し、またあるところでは一階微分の二次の項をとりこんでいることをどのように正当化すれば良いだろうか。Toner & Tu(1998) ではこのように項を落とすためのさらに説得力のある説明がなされている。くりこみ群の解析を行う\*72という視点から

\*69 この定義についてはここでは詳しくは触れない。解析力学の教科書や折原 (2004) などが参考になるだろう。

\*70 実際注目したい秩序相では長距離に渡って向きが揃うので初めから連続場の長波長の成分のみに注目して良いだろう。

\*71 等方相のみを考えればある程度納得のいく近似かもしれない。そもそも秩序相では  $|\mathbf{p}|$  のより高次の項の影響も無視できなくなるはずなのでこのモデルはそもそも秩序相ではなく等方相側で正当化されているのだと割り切ればこの説明でも十分である。しかしながら Toner の論文では秩序相の解析に重きが置かれているので、このような割り切りはあまり良くないと思われる。

\*72 今回、相転移の項で詳しく説明しなかったが、相転移の理論を考える際に強力な武器となるのがくりこみ群 (renormalization group) である。これは系を粗視化して元のサイズに戻すというくりこみ操作（これは正確には群ではなく半群をなす）を繰り返すことで、系の本質的な性質を取り出そうという理論である。ここで、くりこみを行った後の結果に影響する項を relevant な項（有意な項）、影響しない項を irrelevant

見ると、空間微分の高次の項は本質的には有意ではなく、臨界指数<sup>\*73</sup>に影響を与えないのである。したがってこれらの項は、くりこみ群の解析を行う上ではあってもなくても大差なく、結果として式の形が簡単になるように恣意的に無視できることになる。これを踏まえて粘性項から一階微分の二次の項（既に述べたように正確にはその一部）を落とすと、

$$-\gamma \left[ \frac{\delta F}{\delta \mathbf{p}} \right]_i \simeq [-2\gamma a(\rho_c - \rho)\mathbf{p} - 4\gamma b|\mathbf{p}|^2\mathbf{p}]_i + \gamma [(K_1 - K_2)\nabla(\nabla \cdot \mathbf{p}) + K_2\nabla^2\mathbf{p} + K_3(\mathbf{p} \cdot \nabla)^2\mathbf{p}]_i \quad (112)$$

が得られる。記述の簡単のために  $\alpha(\rho) = 2\gamma a(\rho - \rho_c)$ ,  $\beta = 4\gamma b$ ,  $D_1 = \gamma(K_1 - K_2)$ ,  $D_T = \gamma K_2$ ,  $D_2 = \gamma K_3$  とおきなおす。ただし  $K_i$  は正であり、ネマチック液晶ではスプレイ項の寄与がツイスト項の寄与よりも大きく  $K_1 > K_2$  であることが多いので、 $D_1, D_2, D_T$  は全て正となる。また、 $\alpha(\rho)$  は  $\rho < \rho_c$  のとき負、 $\rho = \rho_c$  で0、 $\rho > \rho_c$  で正の値をとる関数で、 $\beta$  は正である。このような書き換えにより、粘性項は

$$-\gamma \frac{\delta F}{\delta \mathbf{p}} \simeq \alpha(\rho)\mathbf{p} - \beta|\mathbf{p}|^2\mathbf{p} + D_1\nabla(\nabla \cdot \mathbf{p}) + D_T\nabla^2\mathbf{p} + D_2(\mathbf{p} \cdot \nabla)^2\mathbf{p} \quad (113)$$

と簡略化できた。 $D$  から始まる係数がかかっている項は、二階微分の一次の項という意味で一般化された拡散項とみなせるが、自由エネルギーによる導出から明らかになったように、これはもともとネマチック液晶（アクティブマターで言えば向きのある程度揃った群れ）の弾性エネルギーに由来しているのである<sup>\*74</sup>。向きの揃った状態を捻ったり曲げたりするとエネルギーが増えるというのがこの弾性エネルギーの簡単な意味であったから、自由エネルギーをより小さくするのは向きの揃った状態であるに違いない。したがって Frank 弾性自由エネルギー由来の項も相転移の項とは別に、向きがある程度揃った群れに対して、さらに向きを揃えるような効果を与えることが予想される。さて、こうして得られた粘性項の表示を流体方程式に代入すれば Toner-Tu モデルが得られる。黒板に書かれた複雑怪奇な数式に、今到達したのである！結果を整理してまとめよう。

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(\mathbf{r}, t) = -\nabla \cdot (\rho v_0\mathbf{p}) \quad (114)$$

$$\frac{\partial \mathbf{p}}{\partial t} + \lambda_1(\mathbf{p} \cdot \nabla)\mathbf{p} + \lambda_2(\nabla \cdot \mathbf{p})\mathbf{p} + \lambda_3\nabla(|\mathbf{p}|^2) = -\nabla P_1 - \mathbf{p}(\mathbf{p} \cdot \nabla P_2) + \alpha(\rho)\mathbf{p} - \beta|\mathbf{p}|^2\mathbf{p} \quad (115)$$

$$+ D_1\nabla(\nabla \cdot \mathbf{p}) + D_T\nabla^2\mathbf{p} + D_2(\mathbf{p} \cdot \nabla)^2\mathbf{p} + \boldsymbol{\xi}(\mathbf{r}, t) \quad (116)$$

$$P_1(\rho, |\mathbf{p}|) = \sum_{n=1}^{\infty} \sigma_n(|\mathbf{p}|)(\rho - \rho_0)^n, \quad P_2(\rho, |\mathbf{p}|) = \sum_{n=1}^{\infty} \mu_n(|\mathbf{p}|)(\rho - \rho_0)^n \quad (117)$$

一つ目の式は粒子数保存を示す連続の式であった。二つ目の式は各粒子の速度を  $v_0$  と一定にしたときに得られる規格化された速度場  $\mathbf{p}$  の従う式である。このようにおくことで  $|\mathbf{p}|$  が秩序パラメータの役割を果たすのであった。速度場の従う式に現れる  $\lambda$  は系がガリレイ変換対称性を破ることに起因する三種類の移流（のような）項の係数であり、これらは全て正である。また、 $D$  は秩序相の弾性自由エネルギーに起因する三種類の拡散（のような）項の係数であり、これらは全てやはり正である。 $\alpha, \beta$  は相転移を記述する係数であった。 $P_1, P_2$  はそれぞれ等方、非等方な圧力（のように見える）項であり、これらの具体的な形（状態方程式）は理論から決定できるわけではないので、三つ目の式のように密度ゆらぎによる展開の形で与えられる。なお、速度場の満たす方程式は各項がベクトル項でさえあれば良いので、 $\alpha, \beta$  を除く各項の係数は一般には  $\rho$  だけでなく  $|\mathbf{p}|$  に依存するスカラー量であるとしても構わない。

な項（有意でない項）、これらの中間に属する項を中立な項と呼ぶ。詳しい説明は教科書に譲りたい。もっとも微分方程式で記述された模型に対するくりこみについて自分は未だ何も知らない。Toner & Tu(1998)にはその詳細な解析が載っているようだが、そこで得られる結果は Toner(2012)で一部修正されている（例えばスケーリング指数が完全に決まると考えていたが実は完全には決まらなかったなどと書いてある）ので注意が必要であるし、群れの物理を考えていたはずなのに解析の過程でファインマンダイアグラムが登場しておりかなり難解そうである。

\*73 相転移の章でここまで詳しく説明すべきだったかもしれない。対称性の異なる相の間を連続的に移り変わる二次相転移で起こる特殊な現象を臨界現象と呼ぶ。相転移においては、転移温度で発散したり飛びを示したりする量が多々存在するが、このような量の発散ないし飛びの様子は  $(T - T_c)$  のべきで書ける。このべき指数を臨界指数と呼ぶ。相転移を示す模型には色々なものがあるが、驚くべきことに臨界指数は模型、つまり系の詳細にはあまり依存せず、むしろ系のおかれた次元、相互作用の範囲、秩序変数の対称性などのより一般的な量に依存する。これを臨界現象の普遍性という。このような普遍的な量を求めるために便利なのが先述したくりこみ群である。くりこみを繰り返すことで元々は違う模型だったものがくりこみ群の同一の固定点に落ち着く場合があるが、これはまさに臨界指数が系の詳細によらないことに対応している。なお、このような臨界現象の普遍性を背景に似たような性質を持つ系の集合を普遍性クラスと呼ぶ。Nishiguchi(2020)の記述によれば、厳密な定義はまだないものの、本稿で紹介したようなモデルは Vicsek 普遍性クラス（あるいはより細かい分類の元で Vicsek 普遍性クラスとアクティブネマティクス普遍性クラス）なる非平衡の普遍性クラスを構成すると考えられているようである。

\*74 自由エネルギーをスカラー量になるように構成して TDGL 方程式の形に帰着させるのも最終的な式の形がベクトル量になるように方程式を構成するのも結局は同じ対称性の議論に過ぎない。けれども前者の手法をとることで対称性から定めたために意味のわかりにくい式を解釈できるというのが本稿の見方の利点であろう。

## 6 流体モデルの数値計算

### 6.1 Toner-Tu モデルの簡易化

前章で導出した Toner-Tu モデルは複雑で、そのまま数値計算するのは大変である。そこで数値計算と実際の実験を両方行っている論文 (Wensink et al.,2012) では、

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \lambda_1(\mathbf{v} \cdot \nabla)\mathbf{v} + \lambda_3 \nabla(|\mathbf{v}|^2) = -\nabla P_1 - (\alpha + \beta|\mathbf{v}|^2)\mathbf{v} + \Gamma_0 \Delta \mathbf{v} - \Gamma_1 \Delta^2 \mathbf{v} \quad (118)$$

なるモデルが提案されている。ただしここで、数値計算を行う上では全章における  $\mathbf{p}$  を秩序パラメータとして捉えるよりも速度場として捉える方がわかりやすいので  $\mathbf{v}$  を用いた。導出した Toner-Tu モデルに比べて  $\alpha$  の符号を取り直し、非圧縮性の仮定  $\nabla \cdot \mathbf{v}$  が用いられている他、Toner-Tu モデルに登場しない四階微分の項が登場している。しかしながらこの「最小限のモデル」でも枯草菌懸濁液での乱流（これは丁度実験で観察したものと同じである）の特徴の多くを再現できるようなる<sup>\*75</sup>。直接的に参考にした論文 (Martin, Wouter & Michael,2018) では、このモデルをさらに簡略化し、

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \lambda(\mathbf{v} \cdot \nabla)\mathbf{v} = -\nabla P - (\alpha + \beta|\mathbf{v}|^2)\mathbf{v} - (1 + \Delta)^2 \mathbf{v} \quad (119)$$

としている。ここまで簡単になった方程式であれば、数値計算を比較的容易に実行することができるだろう。なお、以下の数値計算ではこの方程式を考えることにし、二次元系のみを取り扱う。

### 6.2 数値計算の手法

#### 6.2.1 渦法

数値計算を行う上で鬼門となるのが  $P$  の存在である。既に述べてきたように Toner-Tu モデルでは  $P$  の具体的な形（状態方程式）は決定できない。もちろん密度ゆらぎが十分小さければ密度の連続の式についても数値計算を行って、密度ゆらぎを求めれば圧力を得られるかもしれないが、その場合には係数  $\sigma_1$  などを適切に定める必要が生じる。そこで一計を案じよう。方程式全体の rot をとるのである。すると  $\nabla \times \nabla P = 0$  により圧力項の寄与を消すことができる。また、二次元系を考えている以上渦度場  $\omega = \nabla \times \mathbf{v}$  はベクトル量ではないと考えて良い。すると

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + \lambda \mathbf{v} \cdot \nabla \omega = -\alpha \omega - \beta \nabla \times (|\mathbf{v}|^2 \mathbf{v}) - (1 + \Delta)^2 \omega \quad (120)$$

が得られる。いよいよ式の形が簡単になってきた。ただしここで  $\omega$  の時間発展を計算するためには  $\mathbf{v}$  を求めなければならない。そこで流れ関数  $\psi$  を

$$\frac{\partial \psi}{\partial y} = v_x, \quad \frac{\partial \psi}{\partial x} = -v_y \quad (121)$$

を満たす関数として定義する。ただしここで  $\mathbf{v}$  の  $x$  成分を  $v_x$ ,  $y$  成分を  $v_y$  と書いた。すると流れ関数は

$$\Delta \psi = \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} = -\frac{\partial v_y}{\partial x} + \frac{\partial v_x}{\partial y} = -\omega \quad (122)$$

なるポアソン方程式を満たす。したがって  $n$  ステップ目の速度場を得るためには  $n$  ステップ目の  $\omega$  を用いてポアソン方程式を数値的に解き、得られた結果を  $x$  や  $y$  で微分すれば良い。ポアソン方程式をいかにして数値的に解くかという問題は後で解決することにしよう。

#### 6.2.2 二次の Runge-Kutta 法

数値計算で最初に習う手法はおそらく Euler 法であろう。これは微分方程式

$$\frac{d}{dt} x(t) = f(x, t) \quad (123)$$

<sup>\*75</sup> このモデルは Dry な系のモデルである Toner-Tu モデルから出発しているのに Wet な系の結果を再現できるのは不思議な気もする。

を数値計算するときに用いる最も簡単な手法である。時間刻み幅を  $t_{k+1} - t_k = \Delta t$  とすれば、Euler 法による時間発展は

$$x_{k+1} = x_k + \Delta t f(x_k, t_k) \quad (124)$$

で与えられる。これは簡単である代わりに  $\mathcal{O}(\Delta t^2)$  の誤差を許してしまう。微分方程式の形によっては Euler 法でもそれなりによく計算できるが、流体の方程式などを相手にするときにはこの誤差は致命的である。そこで Euler 法の改良として Runge-Kutta 法が考案された。Runge-Kutta 法は主に二、三、四次のものが用いられる。もちろん精度は次数が上がるほど高まるが、計算量もまた次数に比例して定数倍増えてしまうために、ここでは簡単な二次の場合を用いる。二次の Runge-Kutta 法は Euler 法の時間発展の左辺を  $t_k + \Delta t/2$  における諸量を用いて計算することで得られる。これを数式で書き下しておこう。

$$x_{k+1} = x_k + \Delta t f\left(x_{k+\frac{1}{2}}, t_k + \frac{\Delta t}{2}\right), \quad x_{k+\frac{1}{2}} = x_k + \frac{\Delta t}{2} f(x_k, t_k) \quad (125)$$

### 6.2.3 線形項に対する積分因子法

上で考えた  $f(x, t)$  が、 $x$  について非線形な項  $F(x, t)$  を用いて

$$f(x, t) = -\alpha x + F(x, t) \quad (126)$$

と書ける場合を考える。このとき、元の微分方程式を用いて

$$\frac{d}{dt} e^{\alpha t} x = \alpha e^{\alpha t} x + e^{\alpha t} \frac{d}{dt} x = e^{\alpha t} \{\alpha x + f(x, t)\} = e^{\alpha t} F(x, t) \quad (127)$$

が得られる。これに対して Euler 法の時間発展を考えると、

$$e^{\alpha t_{k+1}} x_{k+1} = e^{\alpha t_k} x_k + e^{\alpha t_k} \Delta t F(x_k, t_k) \quad (128)$$

両辺を  $e^{\alpha t_{k+1}}$  で割ることにより、線形項の寄与だけを先に計算した表示を

$$x_{k+1} = e^{-\alpha \Delta t} \{x_k + \Delta t F(x_k, t_k)\} \quad (129)$$

と書くことができる。これを二次の Runge-Kutta 法に移植すれば、次が得られる。

$$x_{k+1} = e^{-\alpha \Delta t} \left\{ x_k + \Delta t F\left(x_{k+\frac{1}{2}}, t_k + \frac{\Delta t}{2}\right) \right\}, \quad x_{k+\frac{1}{2}} = e^{-\alpha \frac{\Delta t}{2}} \left\{ x_k + \frac{\Delta t}{2} F(x_k, t_k) \right\} \quad (130)$$

### 6.2.4 擬似スペクトル法と $\frac{2}{3}$ Rule

数値計算の際、時間微分のみならず空間微分も計算しなければならないことはよくあるが、この計算は各空間格子点ごとの数値の差を計算する必要があり面倒である。擬似スペクトル法では、得られる量をフーリエ変換してから微分することで、次のように空間微分と波数の掛け算を入れ替える<sup>\*76</sup>。

$$\frac{d}{dx} f(x) = \frac{d}{dx} \int_{-\infty}^{\infty} f(k) e^{ikx} dk = \int_{-\infty}^{\infty} ik f(k) e^{ikx} dk \quad (131)$$

このように、空間についての微分をフーリエ変換後の波数空間で行う手法を擬似スペクトル法という。おそらく擬似とついているのは、時間微分は実空間で更新するためであろう。さて、実際の数値計算で無限個の波数を考えるわけにはいかない。けれども数値計算のために空間を適当に分割していることを思い出せば、フーリエ変換の代わりにフーリエ級数展開を自然に導入することができる。今、一辺の長さが  $L$  の正方形領域を  $N \times N$  に等分したとして、正方形上で定義された物理量  $f$  を考える。すると  $i = 0, 1, \dots, N-1, j = 0, 1, \dots, N-1$  を用いて表される  $f$  の  $(i, j)$  成分は  $(0, 0)$  成分を原点とする座標

$$(x, y) = \left( \frac{i}{N} L, \frac{j}{N} L \right) \quad (132)$$

<sup>\*76</sup> 勝手に微分と積分を入れ替えるなど言われそうだが、どうせ離散化の結果フーリエ変換ではなくフーリエ級数展開を考えることになるのでそこまで気にする必要はない。

における  $f$  を表している。これをフーリエ級数展開すると

$$f(x, y) = \sum_{n=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \sum_{m=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \tilde{f}_{nm} e^{ik_x(n)x} e^{ik_y(m)y} \quad (133)$$

ただしここで

$$k_x(n) = \frac{2\pi n}{L}, \quad k_y(m) = \frac{2\pi m}{L} \quad (134)$$

である。擬似スペクトル法は、このフーリエ級数展開が高速フーリエ変換 (FFT) のアルゴリズムによって高速で実行できるため便利に使うことができる。ただし擬似スペクトル法には大きな欠点 (見方によっては利点) があることに注意が必要である。すなわち、この手法を取った時点で周期境界条件を用いることが確定し、以降意識せずとも周期境界条件を満たすように計算が進む。これはフーリエ級数展開が、周期的に同じ形が広がっていると考えて初めて使えるものであることによっている。現実の実験では境界の影響が強くなるのが往々にしてある。このような系のシミュレーションには擬似スペクトル法は使いにくい。けれども多くの物理理論では、境界の影響を無視したバルクにのみ注目する場面が多々ある<sup>\*77</sup>。この場合には境界の影響は考えたくないの、周期境界条件を利用したい。したがって擬似スペクトル法が有効な武器となる。

方程式に非線形項が現れるとき、関数同士の積は波数空間では面倒な畳み込みになってしまい、微分を避けた意味がなかったと諦めそうになるかもしれない。けれども我々には FFT があるので、FFT して波数空間で微分したものを IFFT (逆高速フーリエ変換) して実空間に戻し、関数同士の積は実空間で行ってしまえばよい。FFT の計算量が小さいことを生かして実空間と波数空間で得意な計算を分担するのである。ただしこのような計算を行う場合、波数空間で畳み込んで計算したものと実空間で積をとって FFT したものの間に誤差が生じてしまうことには注意が必要である。これをエイリアシング誤差<sup>\*78</sup>という。これを防ぐために波数空間で計算した量の内、高周波数のものは 0 にしてしまうというテクニックがある。各波数成分の最大値は  $N/2$  だが、計算に寄与できる波数をその  $2/3$  である  $N/3$  までに限ることから、これを  $2/3$ Rule と呼ぶ。二次元系で等方的に高周波数をカットするためには

$$k_x^2 + k_y^2 > \left(\frac{N}{3}\right)^2 \quad (135)$$

なる波数に対応する成分を全て 0 に置き換えてしまえば良い。より詳しい解説は Qiita の記事 (@toya27, 2019) を参考にするのが良いだろう。

なお、擬似スペクトル法を用いれば棚上げしていたポアソン方程式が今回必要な範囲で容易に解ける。

$$\Delta\psi = -\omega \quad (136)$$

の両辺をフーリエ級数展開し、微分を波数の掛け算にすれば、波数空間上の  $(n, m)$  成分について

$$-\{k_x(n)^2 + k_y(m)^2\} \tilde{\psi}_{nm} = -\tilde{\omega}_{nm} \quad (137)$$

が成り立つ。したがって

$$\tilde{\psi}_{nm} = \frac{1}{k_x(n)^2 + k_y(m)^2} \tilde{\omega}_{nm} \quad (138)$$

一見  $(n, m) = (0, 0)$  のときに分母が 0 になってまずい形に見えるかもしれない。しかしながら、最終的に興味のある量は流れ関数ではなくその微分で与えられる速度場である。波数  $(0, 0)$  の成分は実空間では定数項に対応するため、微分で消えてしまう。したがって、流れ関数の  $(0, 0)$  成分は常に 0 であるとしてよい。また、流れ関数は微分しか用いないので、わざわざ実空間に戻す必要はなく、波数空間での値のみを格納しておけば十分である。

### 6.2.5 NumPy の FFT に対する注意

FFT の実装をしなくても既に用意されたライブラリを用いることができるのが、現代の利点である。今回は数値計算に Python を用いた。NumPy ライブラリを用いれば、 $N \times N$  の `np.ndarray` に格納した諸量を直感的に四則演算の対象

\*77 液晶の自由エネルギーもバルクのみを考えて導いたのであった。

\*78 画像処理などの文脈で出てくるエイリアシング誤差と本質的に同一なのだろうか。詳しいことはまだよくわかっていない。

にできる上、それなりに速く計算できるため、よほど面倒な計算をしない限りは Python が便利であろう。ただし既製品を使うからにはその製品特有の問題を知っておく必要がある。今回は二次元の高速フーリエ変換を行うため `np.fft.fft2`, `np.fft.ifft2` 関数を用いた。ただしこの関数を用いた結果実関数が複素数値を取ってしまうことがあるため、逆フーリエ変換の度に実部のみを取った。後で知ったことだが実関数の FFT には `rfft` 関数が便利なのである\*79。さて、諸量をフーリエ変換するのみならず、波数を格納した配列も必要になるが、これは `np.fft.fftfreq(N)` を用いて計算できる。`fftfreq` 関数は波数を 0 から  $N/2$ ,  $-N/2$  ( $N$  が偶数),  $-(N-1)/2$  ( $N$  が奇数) から  $-1/N$  の順で  $n/2$  を並べた上、それらを  $N$  で割った配列になっている。波数の順番が昇順になっていないため、例えば 2/3Rule の適用のためにフィルターをかけたい時には `np.fft.fftshift` 関数で象限を入れ替えた後で処理を行い、再度 `np.fft.ifftshift` 関数で象限を戻すか、あるいはフィルターの側の象限を入れ替えておく必要がある\*80。これに気づかずに計算すると面倒なことになるので注意しなければならない。

### 6.2.6 手法の統合

ここまでの手法を用いてアクティブマターの流体モデルに対する時間発展の表式を書き下そう。方程式の非線形項は

$$F(\omega, \mathbf{v}) = -\lambda \mathbf{v} \cdot \nabla \omega - \beta \nabla \times (|\mathbf{v}|^2 \mathbf{v}) - (1 + \Delta)^2 \omega \quad (139)$$

である。時間発展は二次の Runge-Kutta 法と積分因子法を用いて

$$\omega_{k+1} = e^{-\alpha \Delta t} \left\{ \omega_k + \Delta t F(\omega_{k+\frac{1}{2}}, \mathbf{v}_{k+\frac{1}{2}}) \right\}, \quad \omega_{k+\frac{1}{2}} = e^{-\alpha \frac{\Delta t}{2}} \left\{ \omega_k + \frac{\Delta t}{2} F(\omega_k, \mathbf{v}_k) \right\} \quad (140)$$

$$\Delta \psi_k = -\omega_k, \quad \frac{\partial \psi_k}{\partial y} = v_{k,x}, \quad \frac{\partial \psi_k}{\partial x} = -v_{k,y} \quad (141)$$

ただし空間微分は擬似スペクトル法によって計算する。

## 6.3 数値計算の結果

元にした論文で紹介されている乱流状態と正方格子状態を再現することができた。結果を下図に示しておく。ただし、 $L$  を  $N$  に取るとおそらく波数の掛け算か  $\alpha$  の指数でオーバーフローが発生する点や、六角格子を再現できなかった点が不満点として残る。改善案としては、元論文同様空間の刻み幅を極端に大きくすることが挙げられるが、この場合には計算に長い時間がかかり手元の環境ではあまり現実的ではない。

$$\alpha = -0.8, N = 128, L = 64, \beta = 0.01, \Delta t = 0.01$$

$$\lambda = -3.5$$

$$\lambda = 0$$

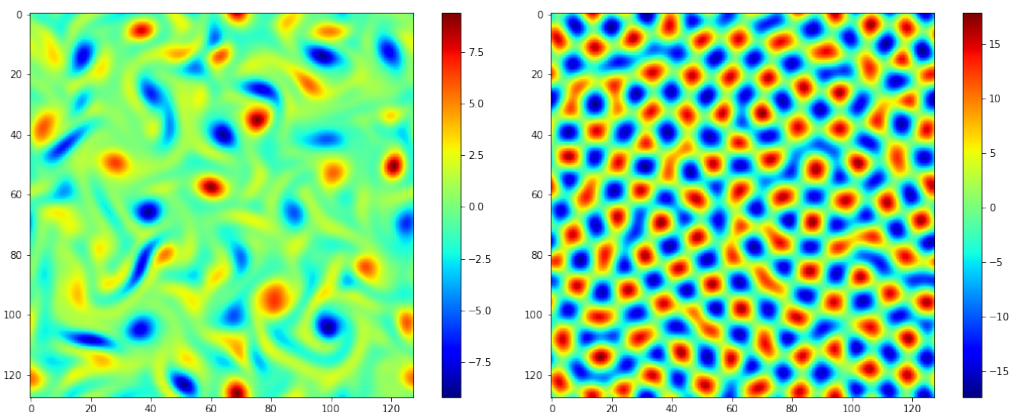


図5 数値計算によって得られた渦度場を可視化したもの。左上の一行は両者に共通したパラメータであり、 $\lambda$  のみ左右で異なる値を用いた。乱流状態（左）と正方格子状態（右）を再現することができた。

\*79 しかしこれを使うと注意すべき点がある。

\*80 こちらの方が速い気がしてきた。



## 7 おわりに

### 7.1 今後の課題

今回は Toner-Tu モデルの導出でタイムアップとなった<sup>\*81</sup>が, 実際には折角導出した Toner-Tu モデルに対する詳細な解析やテンソル秩序パラメータを用いたネマチックで Dry な系の流体モデルの導出, 液晶のエリクセン-レスリーの理論とそれを応用した Wet な系の流体方程式についてもいずれはまとめたい. 実際 Wet な系の数値計算を行った方が今回の企画で行ったアクティブ乱流実験との比較を安心して行える. また, 非平衡系についての記述をはじめとした少し雑な部分の修正や実験, アクティブマターの圧力に関する実験への言及も今後の課題としたい. 全体にリンクを通すことやレイアウトを修正することも L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X の練習がてらやりたいところである<sup>\*82</sup>.

### 7.2 謝辞

竹内研究室の西口助教には Toner-Tu モデルの導出に際して不明瞭な部分に対して多数の有益な助言を頂きました. また, アクティブマター班の活動全体を通して竹内研究室の皆様には大変お世話になりました. アクティブマター班の班長である西村君には, 誤字や微妙な点の修正をしていただきました. この場を借りて深くお礼申し上げます. なお, 本稿にある物理的な間違いの責任は全て自分の浅い理解にあります.

---

\*81 間に合ってすらいない

\*82 けれども最大の課題は間違いなく本稿を書くのだといって目をそらしてきた大学院入試であろう.

## 8 参考文献

この PDF を作成するに当たって参考にした書籍や論文、講義資料のリストと、簡単な紹介を以下に示す。本が好きだったタイプの人間がうっかり物理学科に入ると理学書オタクになりがちだが<sup>\*83</sup>、せっかくなのでそういうオタク視点<sup>\*84</sup>で紹介を書きたいと思う。なお、書籍の出版年については最新の版のものを挙げている。

[1] ランダウ, リフシッツ. (2019). 『統計物理学 第3版 下』. (小林秋男, 小川岩雄, 富永五郎, 浜田達二, 横田伊佐秋訳). 岩波書店.

相転移やランダウ理論, 準安定状態と核の形成の記述と, ネマチック液晶の自由エネルギーの導出の一部はこれを参考にした。難しく通読には向かないような気がするが, 知りたいことは大体全部載っているため持っているが強くなれる気がする。統計力学語辞典だと思えば良い。絶版だったが2019年に復刊を遂げた。またいつ絶版になるかわかったものではないので懐を冷やしつつ購入したが, 後悔はしていない。絶版になっていたら英語版を使おう。(版は古いですがPDFが無料DLできる)

[2] 西森秀稔. (2005). 『相転移・臨界現象の統計物理学』. 培風館.

TDGL 方程式の記述はこの本を参考にした。Ising 模型やそれをさらに発展させたモデル, 本稿では雑に省略してしまったくりこみ群についても記述があって読み得。二次元 Ising 模型の厳密解の導出まで載っている。

[3] 高橋和孝, 西森秀稔. (2017). 『相転移・臨界現象とくりこみ群』. 丸善出版.

ランダウ擬似自由エネルギーから熱力学的に正しい自由エネルギーを得て二種類の秩序相の共存を記述する話題はこの本によった。余談だがこの本は大学の Maruzen ebook Library で DL はできないものの閲覧可能なので, 購入はしていない。

[4] 折原 宏. (2004). 『液晶の物理』. 内田老鶴圃.

(講義スライド版が [https://www.eng.hokudai.ac.jp/labo/MOLPHY/home/\\_src/sc657/koginote.pdf](https://www.eng.hokudai.ac.jp/labo/MOLPHY/home/_src/sc657/koginote.pdf) で公開されている.)

この PDF のアクティブマター以外のほとんどの部分はこの本によったといっても過言ではない。群を用いた対称性の記述, 液晶の分類, 誘電体のランダウ理論と液晶の自由エネルギー, ネマチック液晶のトポロジカル欠陥や液晶で起こる様々な相転移の話題に加え, 簡単な流体力学の導入と棒状分子と溶媒がある場合の流体の記述 (エリクセン・レスリーの理論), 果てはテンソルの変換則や汎関数微分に至るまで, ありとあらゆる記述がある。しかも話題の一部は Landau や de Gennes の難しめの記述を噛み砕いてわかりやすくしたもので行間に苦しむこともあまりない。買ってよかった。

[5] Steven H. Strogatz.(2015). 『ストロガッツ 非線形ダイナミクスとカオス 数学的基礎から物理・生物・化学・工学への応用まで』. (田中久陽, 中尾裕也, 千葉逸人訳). 丸善出版.

数学の本かと思って身構えたらとても読みやすかった。現象をパラメータによって形状の変わる式で記述したくなったり物理や数学を少し学んだ後にそれらを使って遊びたくなったりカオスについて知りたくなったりしたら読む本。演習問題でランダウ理論と分岐の関連が紹介されている。

---

\*83 自分だけかもしれない。  $n = 1$

\*84 普段の昼食が 500 円を超えると洗い顔になるのに 3000 円は優に超える理学書にバイト代をじゃばじゃば突っ込んでしまうのは何故なのか。そしてそれを読まずに放置するのは何故なのか。

[6] 岡部朋永. (2015). 『テンソル解析からはじめる応用固体力学』. 株式会社コロナ社.

一般相対論の本とは違い, 三次元の (物理で登場する) テンソルとその微分が成分表記以外の形でもわかりやすく説明されている. テンソルの左発散や二重ドット積といった複雑怪奇な記法はこの本で学んだ.

[7] エンリコ フェルミ. (2011). 『フェルミ熱力学』. (加藤正昭訳). 株式会社三省堂.

自由エネルギーについての議論の参考にした. 熱力学には議論の順序にバリエーションがあるので初学の場合は教科書を見比べて自分にあったものを選ぶべきかもしれない. この本は理論の詳細を詰めない程度の初学の場合か, 一度学んだ内容を整理したい場合に勧められがちなのがする (つまりいつも勧められる).

[8] 香取眞理. (2007). 『非平衡統計力学』. 株式会社裳華房.

時間的制約により飛ばし気味になってしまった非平衡統計力学の説明がなされている本. 薄いという事は行間があるかそうでなくとも難しいことを意味している. かつてこの本を用いて始まったゼミは頓挫したが物理学科の教育を丸一年くらい受けた今なら記述のありがたみもわかるしちゃんと読める気がする.

[9] 西口大貴, 佐野雅己. (2016). 「自己駆動粒子の集団運動: 群れから始まる非平衡統計力学 (特集 数理モデルと普遍性)」 『数理科学』 54(1), 39-44.

ネットで読めるアクティブマターの解説記事. アクティブマター班発足時に読んだ. 当時は離散的なモデルに興味があったので Vicsek モデルに注目していた気がする. Toner-Tu モデルも紹介はされているが当時は各項の意味を掴むことやガリレイ対称性の破れの議論を理解することはできなかった.

[10] Marchetti, M. C., Joanny, J. F., Ramaswamy, S., Liverpool, T. B., Prost, J., Rao, M., & Simha, R. A. (2012). Soft active matter. arXiv preprint arXiv:1207.2929.

アクティブマター全体のレビュー. アクティブマター班で初めて本格的なゼミをした文献である. Toner-Tu モデルを簡略化したモデルを自由エネルギーを元に導く部分のゼミ担当であった. 当時できる最大限の説明をしたが, 液晶の知識がほとんどなかったので深い理解はできなかった. 本稿の Toner-Tu モデルに対する議論の骨子はこのレビューリスペクトではあるものの, こちらは論文だけあって前提知識の導入などはない. なお, この論文で紹介されているモデルでは圧力項や移流項も簡易化して自由エネルギーに押し付けている. 今回省略したネマチックな系の流体方程式や Wet なアクティブマターの理論の紹介も多く書かれているので発展的な議論に興味を持った方は参考にすると良いであろう.

[11] Toner, J., & Tu, Y. (1998). Flocks, herds, and schools: A quantitative theory of flocking. Physical review E, 58(4), 4828.

Toner-Tu モデルのオリジナル. モデルの説明に加えて解析も詳しく行われている. ただし解析の一部は次に紹介する文献で修正されている. モデルの導出の過程で定性的にわからないところは大体ここに載っていた. なお, この論文では前述の文献と異なり自由エネルギーを経由することなく方程式が満たすべき対称性 (ベクトル量であること) から方程式を導いている. 各項の物理的意味は見づらくなるが, 議論としては数行で終わる分わかりやすいかもしれない.

[12] Toner, J. (2012). Reanalysis of the hydrodynamic theory of fluid, polar-ordered flocks. *Physical Review E*, 86(3), 031918.

Toner-Tu モデルに非線形な圧力項が追加され、議論が修正された論文。モデルの意味や導出の説明は最小限であるが、詳細な結果はおそらくこちらが正しい。著名な論文に書いてあるからといって全ての結果や言及が正しいとは限らず、結果はいつでも修正されうることを実感した。

[13] Lucas, Barberis.& Fernando, Peruani. (2016). Large-Scale Patterns in a Minimal Cognitive Flocking Model: Incidental Leaders, Nematic Patterns, and Aggregates. *Physical Review Letters*, 117(24), 248001

視界を制限したより生物らしいモデルを提案し、数値計算で相図を書いたり連続場による記述を行ったりしている論文。面白いとして紹介したものの連続場の方はまだよく理解できていない。

[14] Daiki Nishiguchi. (2020). *Order and Fluctuations in Collective Dynamics of Swimming Bacteria*. Springer.

モデルや分類の導入は Soft active matter にもあるが、2012 年に修正された Toner-Tu モデルを反映しているのはこちら側。アクティブマターを対称とした実験の論文だが、これが東大のライセンスで無料で読めることに気づいたのは今年度に入ってからで、本稿で実験について言及することはできなかった。

[15] Martin James, Wouter J. T. Bos, & Michael Wilczek. (2018). Turbulence and turbulent pattern formation in a minimal model for active fluids. *Physical Review Fluids*, 3(6), 061101

数値計算の元論文。2018 年に論文が出た結果が手元の PC であまり苦勞せずに再現できるのはとても楽しいことである。youtube で active turbulence などと検索するとこの論文の数値計算で得られた動画を見ることができる。自分の結果より刻み幅が細かいこともあってとても綺麗である。

[16] Wensink, H. H., Dunkel, J., Heidenreich, S., Drescher, K., Goldstein, R. E., Löwen, H., & Yeomans, J. M. (2012). Meso-scale turbulence in living fluids. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 109(36), 14308-14313.

数値計算の元論文の元論文。上で紹介した論文では、ここで提案されたモデルをさらに簡易化して、渦法を用いて計算している。こちらは圧力項をなんとか数値計算しているようだが、細かい手法はよく理解できなかった。

[17] @toya27. (2019). 『趣味でスペクトル法\_#003\_2次元周期流』。  
(<https://qiita.com/toya42/items/03d3060de125a4289f9c>)

数値計算の論文ではどのような手法を用いたかという説明はあっても手法そのものの説明はなかった。ある程度ネット検索すると最低限の情報はわかるのだが、今回用いた手法の全てを詳しくカバーした記事はこれをおいて他になかった。これがなければ数値計算を諦めていた可能性が非常に大きい。ところでスペクトル法についての解説書が東京大学出版会から出ていたらしいが、当然のように絶版になっている。勘弁してください<sup>\*85</sup>。

---

\*85 絶版する本あれば再販する本ありということでそろそろ異流体力学が入手できそう。わくわくしています。