

モデル論について

早川尚男*

通常、モデルは自然現象を巧く記述する方便として造られる。その際にそのモデルが実体を持ったものであるかどうかは問われないのが普通である。勿論、中世以前に於いて宗教的な規範に反しない限りは各人が独自のモデルを持ち独自の世界観を持ち得たのである。一方、近代に於いて宗教的世界観が没落し、実験によって検証することでそのモデルの当否を判定する自然科学が勃興し世界観を一新した。しかしながら自然科学が早い段階から分化したためにある分野では実体の伴ったモデルが他の分野では単なる思弁の産物と見なされることは少なくない。

その典型的な例が19世紀における原子モデルである。化学の分野ではDalton等によって既に原子は実体のあるものであったが、物理では熱力学の成功のため或いは無限小の概念に支えられたNewton力学（及び解析学、Maxwellの電磁気学）の影響のためか原子は単なる思弁的モデルに過ぎずその実体を認めないエネルギーと呼ばれる一派が存在した。原子の実在という側面だけに焦点を充てると原子論を支持するBoltzmannとエネルギーのMach、Ostwald等との論争は現代の我々には滑稽にすら映る。

原子論の例を時間を追って考え直すとモデルが物理的な実体を伴ったものに変化するには様々な段階を経る必要がある事が分かる。当然、第1段階ではギリシアの哲学者Demokritosが純思弁的に導入した。勿論、究極的な構成要素として原子を導入したのは彼が初めてではないだろう。しかし空気の圧縮や拡散現象に答えるために「空間」の中に原子が点在する描像を提出し、その説明が無矛盾であったため後世に名を残すこととなった。第2段階ではDalton等の化学者が活躍した。気体反応等を定量的に実験することによって原子モデルの導入が不可欠であることを科学的に示した。第3段階ではBoltzmann等の原子論者とMach等のエネルギーとの間の論争である。当時、熱素説を否定して熱力学を構築し、光の波動性が疑いのないものになったことが単なる化学的実在「原子」を排撃する余地があったのであろう。最終段階では量子論の勃興によって原子が物理的にも実体を伴ったものと見なされるようになった。量子論では粒子描像と波という描像が混在するが、前世紀末の論争を踏まえると折衷案とも見なせる。原子論の認知の過程でEinsteinの果たした役割は特異である。EinsteinはLangevin方程式とエネルギー等分配則、流体力学といった当時知られていたモデルを巧みに組み合わせることでBrown運動を定式化し、同時にAvogadro数の決定に成功し、原子論を実体化したことは量子論の一連の流れと独立してい

*東北大学理学部物理学教室、〒980 仙台市青葉区荒巻字青葉

るようで興味深い。何れにしてもモデルの当否は哲学とも微妙に絡み合いながら論争を続け気の遠くなるような時間を経て判定されるのである。

さて筆者には物理学史全般におけるモデル論を論ずる力はないのでもう少し筆者の経験に照らしたモデル論を展開しよう。ここからは相転移の Ginzburg-Landau モデルを出発点にしてその動的モデルへの拡張とその問題点、混相流モデルへの拡張とその問題点を探る。最後に講演で触れた粉体への応用について考えてみよう。

相転移現象の研究は何も Landau から始まった訳ではない。実際、Landau の前に既に Ising 模型の提出、その平均場近似に基づく Weiss の解析、Onsager の 2 次元厳密解等があり彼の業績を抜きにして相転移（臨界現象）の歴史を語ることは可能である。又、Landau の先駆者達のモデルに対する態度はまず量子力学に基づくスピンの間の交換相互作用があつて一軸異方性が強い時に Ising 模型が有効であるというものであった。この態度はミクロな基礎モデルから臨界現象というマクロな物理を記述しようとするもので「原子論的」物理学者にとって比較的理解しやすい。そのためか学部レベルの教育では Landau 抜きで臨界現象が語られる事が多い。一方、Landau の態度はある意味でエネルギーの復活を志すものである。即ち彼は対称性のみを考慮してたった一つの秩序パラメータの展開のみで相転移現象を理解しようとした。発想の元となったものを知る由もないが少なくともミクロな構成要素の協同現象として相転移を記述しようという気がなかった事は確かである。従って後世の BCS 理論からの Landau 模型の導出や Ising 模型からの導出等は本質的ではない。即ち、Landau は臨界現象では量子力学はおろか統計力学も本質的ではない事を見抜いていたのである。その意味で Landau はまさに彼にしかできないやり方で現象論モデルを構成した。そのために通常の物理学者には Landau の態度が理解できず超伝導の解決が BCS に帰されるのであろう。しかしながら臨界現象を研究したものにとって Landau の遺志を継ぐ Wilson による（基礎のない）繰り込み群の成功及びユニバーサリティの概念の登場によってミクロなものへの拘りは消えていった筈である。

ダイナミックスを考える時にも Landau の考え方は有効である。非緩和型の場合でも Bifurcation Analysis によって最低次の非線形方程式を議論すれば Landau タイプの方程式が導かれる。ことに臨界波数が有限で散逸不安定の際の振幅方程式歴史的に Complex Ginzburg-Landau 方程式と呼ばれている。この方程式は流体現象のパターンを議論する際に普遍的に現れ様々な現象の記述に有力なモデルとなっている [1]。端的な例が液晶対流である。この場合、例えば de Gennes [2] の教科書に書かれている基礎方程式系（これすら常識的な物理学者からすると極めて現象論的であるが）は極めて複雑であり、そこから Bifurcation analysis を経てある種の振幅方程式を導出するのは一般に困難である。この場合、初めから液晶というものを異方的な流体と捉えて現象論を構成するのが賢明な行き方である。問題はこうした現象論モデルには多くのパラメータが含まれており、それらをサブレベルの理論を用いずに決定する事が困難であることにある。このようなモデルを用いて現象を記述した場合、何を以て理解したかということに答える術が今の所ないため、非専門家の物理学者にはわかりにくいものとなっている。

もう少し筆者の親しんだダイナミックスのモデルとしては緩和型の時間に依存した Ginzburg-Landau 方程式を挙げることができる。このダイナミックスの方程式は雑多で個々のモデルのユニバーサリティは極めて狭いために Anderson [3] をして相転移のダイナミックス（輸

送現象)の記述を省いたことを残念に思わないと言わしめている。ここでは極く簡単なモデルを2、3紹介しておこう。

最初に紹介するのは Hohenberg と Halperin[4] によってモデル A と呼ばれた非保存系の場合のモデルである。この方程式は次の様に理解できる。系は有効自由エネルギー F を減らす方に緩和する。従って $\frac{dF}{dt} \leq 0$ を充たす。 F を秩序変数 ϕ の汎関数であるとするとき $\frac{dF}{dt} = \int d\mathbf{r} \frac{\delta F}{\delta \phi} \frac{\partial \phi}{\partial t}$ となる。従って最も簡単な緩和型の方程式は

$$\partial_t \phi(\mathbf{r}, t) = -L \frac{\delta F}{\delta \phi} \quad (1)$$

である。但し輸送係数は正定値である。勿論、この方程式では熱平衡状態へ緩和しないので揺動散逸定理を充たす熱揺らぎを足しておくのが普通である。しかし非平衡性の強い急冷したあとの緩和では熱揺らぎは重要ではない。

次に簡単な動的モデルはモデル B[4] とも Cahn-Hilliard 方程式とも呼ばれる保存系のモデルである。この方程式も上の場合と同様に理解できる。やはり $\frac{dF}{dt} \leq 0$ を指導原理にする。秩序変数は保存するのでカレント $\mathbf{j}$ を用いて $\partial_t \phi = -\nabla \cdot \mathbf{j}$ と書けるだろう。従って $\frac{dF}{dt} = \int d\mathbf{r} \frac{\delta F}{\delta \phi} \frac{\partial \phi}{\partial t} = - \int d\mathbf{r} \frac{\delta F}{\delta \phi} \nabla \cdot \mathbf{j}$ となる。この式を1回部分積分して境界の効果を無視すれば

$$\partial_t \phi(\mathbf{r}, t) = L \nabla^2 \frac{\delta F}{\delta \phi} \quad (2)$$

を得る。この方程式はスピノーダル分解や Ostwald 成長の基礎方程式となり物理よりも冶金の分野でよく研究されている。

これらのモデルでは通常 F に対しては秩序変数の Landau 展開

$$F = \int d\mathbf{r} \left[\frac{\kappa}{2} (\nabla \phi)^2 + f(\phi) \right] \quad (3)$$

で $f(\phi) = -a\phi^2 + b\phi^4$ を用いている。しかし Hohenberg、Halperin[4] の頃のように臨界点近傍での緩和を論じるならともかく現在のように急冷した後の相分離を研究する場合には非線形性の最低次の切断でいい保証はない。実際、大野と Puri[5] による相分離現象の効率的なシミュレーターとしての Cell-Dynamical Systems(CDS) では自由エネルギーとしてより強い非線形性を採用した事に対応している。本質的なのは $f(\phi)$ が臨界点より上で1つの極小を持ち、下では2つの等価な極小を持つことである。更にこれらのモデルの実体性については固体電子論等で用いられるものと較べて著しく希薄である事は何度強調しても構わない。実際にこれらのモデルが合金の相分離等の実験と比較して用いられるのは液晶対流の場合と同じく一種の詭弁であると言ってもよい。

さて本筋と外れるが上のモデルを純思弁的に拡張する事は容易である。例えば秩序変数の自由度を増やしたモデルはよく用いられる [6]。実際に2自由度を持つ場合はヘリウムや少し項を加えれば超伝導のモデルとなっており物理的に興味深い。しかしこの自由度がそれより大きくなるにつれ物理的な意味はなくなってくる。その極に自由度を無限大にすると線形化された解けるモデルとしての Spherical model が存在する。一方、ダイナミクス

では寡聞にして知らないが de Gennes が自由度 $\rightarrow 0$ の極限の場合は GL モデルが高分子モデルになるというアイデアは卓抜で人々を驚かせた。実体のない自由度の解析接続によって高分子という実体そのものを浮かび上がらせるのは de Gennes[7] ならではと言える。より思弁的なものとして筆者の関わったモデル A とモデル B の中間的な性格を持つモデル [8] とか長距離相互作用を持つモデル [9] 等が考えられる。しかしながらこれらのモデルは物理的実体がありそうもないという意味で悪いモデルである。例えば後者の場合、短距離相互作用のみの系と較べてかなり様相が異なり、数理的な面白さは充ち溢れているがやがてその議論は消えていく運命にあるであろう。現象論モデルが現象を忘れた場合の末路は悲惨である [10]。

さて本筋に戻ろう。川崎 [11] によって提唱された臨界流体のモデル (モデル H) を今までと少し異なる 2 流体モデルの変分問題と捉えて紹介しよう [12]。この場合の秩序変数 ϕ は 1 つの流体 (速度 $\mathbf{v}$) の体積分率と思ってよい。勿論、連続の方程式

$$\partial_t \phi = -\nabla \cdot (\phi \mathbf{v}) \quad (4)$$

を充たす。もう一つの流体 (速度 $\mathbf{u}$) も同様な式を充たすがここでは平均流 $\mathbf{V} = \phi \mathbf{v} + (1-\phi) \mathbf{u}$ の充たす $\nabla \cdot \mathbf{V} = 0$ の方が本質的である。一般に熱力学変数 $x_i (i = 1, \dots, n)$ の従う動的方程式

$$\frac{dx_i}{dt} = -L_{ij} \frac{\partial F}{\partial x_j} \quad (5)$$

は L_{ij} の逆 M_{ij} を用いて Rayleighian

$$R = \frac{1}{2} M_{ij} \dot{x}_i \dot{x}_j + \frac{\partial F}{\partial x_j} \dot{x}_j \quad (6)$$

を最小にすることで得られる。これを連続場の場合に適用して

$$R = \int d\mathbf{r} \left[\frac{1}{2} \zeta(\phi) (\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 + \frac{1}{2} \eta (\nabla \mathbf{V} : \nabla \mathbf{V}) + \frac{\delta F}{\delta \phi} \phi \right] \quad (7)$$

として更に $\nabla \cdot \mathbf{V} = 0$ から導入される Lagrange の未定乗数の圧力 p を考慮して $\mathbf{v}$ 、 $\mathbf{u}$ について変分を取ると

$$\begin{cases} \mathbf{v} - \mathbf{V} = -\frac{(1-\phi)^2 \phi}{\zeta} \nabla \frac{\delta F}{\delta \phi} \\ \eta \nabla^2 \mathbf{V} - \nabla p = \phi \frac{\delta F}{\delta \phi} \end{cases} \quad (8)$$

を得る。これを連続の方程式に代入すると

$$\partial_t \phi + (\mathbf{V} \cdot \nabla) \phi = \nabla L(\phi) \cdot \nabla \frac{\delta F}{\delta \phi} \quad (9)$$

となる。但し $L(\phi) = \frac{\phi^2(1-\phi)^2}{\zeta(\phi)}$ である。またこの場合 $\mathbf{V}$ は解けて

$$\mathbf{V} = \int d\mathbf{r}' T(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \phi(\mathbf{r}') \nabla' \frac{\delta F}{\delta \phi(\mathbf{r}')} \quad (10)$$

と書ける。但し $T_{ij}(r) = \frac{1}{8\pi\eta r}(\delta_{ij} + \hat{r}_i \hat{r}_j)$ (ここで $\hat{r} = \mathbf{r}/|\mathbf{r}|$) は Oseen tensor である。このモデルではエネルギー散逸が平均流を通して現れる事に注意したい。

さて質量の異なる2流体(速度 $\mathbf{v}$ 、密度 ρ_p 、体積分率 ϕ の流体及び $\mathbf{u}$ 、 ρ_f 、 $\bar{\phi} = 1 - \phi$ の流体)で重力の効果を考えたらどうなるか。また散逸は1つの流体でのみ起こるとしよう。その場合、加速度効果も考慮すると基礎方程式は同様にして

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t \phi = -\nabla \cdot (\phi \mathbf{v}) \\ \partial_t \bar{\phi} = -\nabla \cdot (\bar{\phi} \mathbf{u}) \\ \rho_p \phi [\partial_t \mathbf{v} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v}] = -\phi \nabla (p + \frac{\delta F}{\delta \phi}) - \rho_p \phi g \mathbf{e}_z + \zeta(\phi)(\mathbf{u} - \mathbf{v}) + \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} \\ \rho_f \bar{\phi} [\partial_t \mathbf{u} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}] = -\bar{\phi} \nabla p - \rho_f \bar{\phi} g \mathbf{e}_z - \zeta(\phi)(\mathbf{u} - \mathbf{v}) \end{array} \right. \quad (11)$$

となる。ここでストレステンソル σ_{ij} は

$$\sigma_{ij} = \int_0^t dt' G(t-t') \left[\frac{\partial v_j}{\partial x_i} + \frac{\partial v_i}{\partial x_j} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \left(\frac{\partial v_k}{\partial x_k} \right) \right] \quad (12)$$

とでもしておけばよいだろう。ここで $G(t)$ はメモリー効果がある場合に対応しうる様に導入したもので通常のNewton流体では $G(t) \propto \delta(t)$ としておけばよい。これは高分子と溶媒のモデル[12]であると同時に粉体を鉛直な流れの中においた場合のモデルともなっている[13]。このモデルで面白いのは F が1つの極小しか持たない無秩序相においても流れの存在によって相分離が起こり得る事である。

このモデル(11)の解析は本研究会でも小松氏が述べたので繰り返さない。しかし、一樣流動状態を記述しうる事、一樣相が不安定になった近傍で1次元モデルでは普遍的にソリトンが観測されどうやら気泡の生成、気泡が膜のようになるスラグ流も記述し得るなど興味深い事実が明かになりつつある。また離散要素法による粉体モデルとの対応も成り立ち、粉体に対して決して悪いモデルではないと思っている。しかしながら本質的なのはこのモデルが粉体のみを想定して造られたのではなく、質量の異なる2流体に流れの効果を考慮した場合に現れる普遍的な新しいタイプの非平衡相転移を記述しようとして導入された事である。

最後にここまで述べてきた相転移のLandauモデルとその動的なモデルが原子論におけるモデルの発展の例で示したどの段階にあるかを列記しよう。最初に平衡のLandauモデルはノーベル賞につながるなど実体として認知されている様にも見えるが「原子論的」物理学者に正しく認知されたとは言えず、第3段階にあると言ってよいだろう。それに続く相転移の動的モデルは実験との対応等は問題がなく第2段階までは到達しているが、Anderson[3]に輸送理論が揺動散逸定理から直接導出できたかと嘆かせ、また深く古典的であると非難されており、論争の最中である。この場合社会的に見て「原子論」者の方が旗色がいい。また最後の粉体或いは高分子のモデルは第2段階に進みつつあり今後の発展が期待できる。

[14]
本論はこのセッションの趣旨にあるような良いモデルを如何に造るかというような虫のいい話には答えていない。そのような方法があるのなら教えて欲しいとしてこの論文を締めくくりたい。

参考文献

- [1] Y.Kuramoto, Chemical Oscillations, Waves nad Turbulence (Springer 1984); 蔵本由紀他著「パターン形成」(朝倉書店 1991).
- [2] P.G.de Gennens, Liquid Crystals (Oxford, 1974).
- [3] P.W.Anderson, Basic Notions of Condensed Matter Physics (Benjamin, 1984).
- [4] P.C.Hohenberg and B.I.Halperin, Rev.Mod.Phys. **49**, 435 (1977).
- [5] Y.Oono and S.Puri, Phys.Rev.A **38**, 434 (1988).
- [6] see e.g. A.J.Bray and S.Puri, Phys.Rev.Lett.**67**,2670 (1991); H.Toyoki, Phys.Rev.B **45**, 1965 (1992).
- [7] de Gennens, Scaling Concepts in Polymer Physics (Cornel Uiv. 1979).
- [8] see e.g. A.Onuki, Prog.Thoer.Phys. **74**, 1155 (1985); A.J.Bray, Phys.Rev.B **41**, 6724 (1990); H.Hayakawa and F.Family, Physica A **166**, 408 (1990); H.Hayakawa and T.Koga, J.Phys.Soc.Jpn. **59**, 3542 (1990).
- [9] H.Hayakawa, Z.Rácz, and T.Tsuzuki, Phys.Rev.E **47**, 1499 (1993); H.Hayakawa, T.Ishihara, K.Kawanishi, and T.S.Kobayakawa, Phys.Rev.E (December 1); A.J.Bray, Phys.Rev.E**47**, 3191 (1993); T.Ohta and H.Hayakawa, Physica A (to be published)
- [10] これは決して筆者がこのテーマで学位論文を書く事を認められなかった為ではない。
- [11] K.Kawasaki, Ann.Phys.**61**, 1 (1970).
- [12] M.Doï and A.Onuki, J.Phys. (Paris) II **2**, 1631 (1992) and references therein.
- [13] S.Sasa and H.Hayakawa, Europhys.Lett. **17** 685 (1992); H.Hayakawa and S.Sasa, in *Complex Fluids* ed.by L.Garrido (Springer, Berlin, 1993) p.319. T.S.Komatsu and H.Hayakawa, Phys.Lett. A **183**, 56. 小松輝久、物性研究 **60**, 103 (1993). H.Hayakawa, T.S.Komatsu and T.Tsuzuki, Physica A (to be published)
- [14] しかしながら本論で書いた連続体礼賛の態度はやはり暴論であると同時に片手落ちである。従って粉体をよりミクロに扱った手法も相補的に重要となる。特にミクロ描像に基づいた我々のシミュレーションの示す粉体粒子系の複雑な挙動を見るに及んで本論の内容には些か疑念を抱くに至った。K.Ichiki and H.Hayakawa, in preperation 市来健吾、修士論文 (1994：東北大学)