

平成21年5月20日現在

研究種目：若手研究（A）

研究期間：2006～2008

課題番号：18684002

研究課題名（和文） 水面上での液滴運動に対する数理解析とその数理解析

研究課題名（英文） Mathematical model for the oil droplet motion on the water surface, and its analysis

研究代表者

長山 雅晴（NAGAYAMA MASAHARU）

金沢大学・数物科学系・教授

研究者番号：20314289

研究成果の概要：分裂や融合を伴いながら並進運動する液滴に対する数理的機構を明きからにすることを目的に研究を推進した。本研究では、液滴の高さを表す関数を導入し、表面エネルギー最小原理によって液滴運動を記述する数理解析モデルを得た。また、初期体積の保存条件を満足する数値計算法として離散勾配流法を採用し数値計算を行った。この結果、液滴の初期体積が小さい場合は並進運動すること、初期体積が大きい場合は、液滴が分裂し、分裂した液滴が併進運動を行い、衝突する角度に依存して反射と融合が起こることを明らかにした。

交付額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合計
2006年度	6,500,000	1,950,000	8,450,000
2007年度	2,100,000	630,000	2,730,000
2008年度	2,200,000	660,000	2,860,000
年度			
年度			
総計	10,800,000	3,240,000	14,040,000

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：数学・応用数学

キーワード：数理解析モデル，反応拡散系，離散変分法，液滴運動，表面張力

## 1. 研究開始当初の背景

研究開始前まで実験グループと共同で気水界面上での界面活性を持つ物質の薄片（以降、粒子と呼ぶ）の自発的運動や引き込み現象、間欠運動のメカニズムを数理解析による数理解析によって明らかにしてきた。実験グループと共同で研究を推進していた中で、研究協力者である北畑裕之講師が当時所属していた吉川研一教授（京都大学）の研究グループによって以下のような現象を起こすペンタノール液滴運動の実験結

果が報告された：

- ・非常に大きな液滴は数個の液滴に分裂しながら並進運動を始める。
- ・比較的大きな液滴は並進運動をしながら分裂する。
- ・小さい液滴は水面上を並進運動し、小さな液滴同士は衝突することなく反発する。
- ・適当な大きさの液滴は衝突後に合体し、しばらく並進運動をしてから再び分裂する。

上記のように分裂と合体を伴った液滴の並

進運動は、動的な表面張力変化を利用した液滴の自発的運動の中で最も変化の激しい現象である。これらの現象の起因する機構を実験のみから理解することは困難であり、数理科学の側面からもアプローチする必要性が生じた。数理科学的に液滴運動を理解するためには、現象を記述する数理モデルを構成する必要があった。しかしながら、本研究で取り扱った現象は分裂と融合を伴うため、これまで研究してきた数理モデルをそのまま拡張することは不可能な状況であった。

このような状況下で、我々は、研究協力者の小俣正朗教授が研究していた弾性膜運動の数理モデルに注目した。このモデルは膜運動エネルギー最小原理により構成された数理モデルであり、液滴運動を表面エネルギー最小原理から導くことが出来るのではないかと考えた。実験を再現するためには初期液滴体積を保存したままで液滴の分裂や融合おこす数値計算法が必要であったが、体積保存条件を容易に導入することが可能である数値計算法として離散勾配流法（時間差分・空間微分型汎関数の最小化関数を用いて近似解を構成する方法）があった。これにより液滴運動の数理モデル化とその計算機援用解析が可能であると着想するに至った。

## 2. 研究の目的

実験手法だけでは理解が困難である液滴運動について次に上げる問題について数理的機構から明らかにすることが目的であった：

- ・液滴の大きさと分裂の関係・液滴の粘性と分裂の関係・液滴の大きさと液滴の速度の関係

- ・液滴の速度と反射現象、融合現象との関係

これらの問題に対して現象の数理モデル化を行い、数理モデルに対する数値実験および数理解析によって調べることを目的とした。最初に、分裂現象、融合現象も再現可能な液滴運動の数理モデルの構成を目指した。そのため液滴と水面を1つの表すことができるように液滴の高さを表す関数を導入した。数理モデルの検証数値実験において反復計算を行う離散勾配流法の収束が非常に遅いことが明らかになり、数値計算の高速化も行う必要性が生じ、数値計算法の高速化も目指した。数理モデルの検証が終了の後、液滴の大きさと分裂の関係や大きさと液滴の並進速度の関係、反射現象と融合現象が起こる要因を数値計算によって明らかにすることを目指した。さらに、その結果を実験グループにフィードバックす

ることによって液滴運動の物理化学的理解をも進展させることも目指した。

## 3. 研究の方法

### (1) 数理モデルの構成

水面と液滴全体を一つの関数で記述することによって、図1のような分裂現象や融合現象を伴う液滴運動の再現可能な数理モデルを構成する。液滴の運動方程式は表面エネルギーのラグランジアンからの変分によって導出した。それによって自由境界問題が導出されたため、自由境界問題を近似する退化双曲型微分方程式を導出した。また、液滴から展開される界面活性膜の方程式は、拡散が線形であると仮定し、反応拡散系によって近似した。

### (2) 数値計算法の開発

初期体積を保存し、分裂した液滴全体の体積が初期体積と同じとなるように、体積保存条件が付いた離散勾配流による数値計算法を確立した。これにより(1)で構成した数理モデルの数値計算を可能とした。

### (3) 液滴運動の解析

数理モデルに対して体積保存条件付き離散勾配流法を適用することによって、

- ・液滴の分裂現象の体積依存性
- ・液滴の融合現象と反射現象の起こる要因の計算機援用解析を行った。

## 4. 研究成果

液滴運動を表現する数理モデルは、液滴の高さを表現する変数を導入することによって、液滴の表面、水面を1つの関数を用いて表し、その関数を用いて表面エネルギー最小化から導出することに成功した。この方程式は特異性を持つ双曲型偏微分方程式となった。また、液滴から展開される界面活性膜を反応拡散系で近似することによって水面の表面張力変化を表現することにした。これに液滴の体積保存条件を加えることによって液滴運動を記述する数理モデルを構成した。この数理モデル中の液滴モデルが特異性を持つことから一般の差分による数値計算が困難であった。そこで離散勾配流を用いて数値計算をおこなった。数理モデルが実験を再現可能かどうか検証した。その結果、

1) 小さな液滴は自走する (図2)

2) 大きな液滴は分裂し、自走する (図3) を得た。この結果から、本研究で構成した数理モデルは液滴の並進運動や分裂現象を再現し得ることが明らかになった。この数理モデ

ルを用いて液滴の反射現象と融合現象のおこる要因を数値実験から明らかにした。その結果として次のことがわかった：

3) 分裂した液滴は衝突角度に依存して反射する場合と融合する場合がある (図 4)。

4) 液滴同士が正面衝突する場合、体積差がほとんどない液滴は融合し、体積差が大きければ反射する。

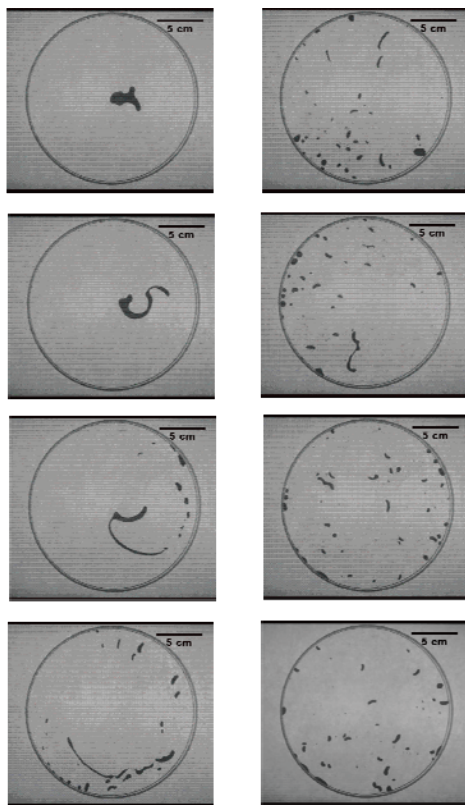


図 1. 大きな液滴の分裂現象，分裂した小さな液滴同士は融合したり反射したりする。

これにより、液滴が反射する現象と融合する現象では、体積差と衝突角度の違いによってことが明らかになった。これらの結果を踏まえて実験結果と比較したところ、液滴の衝突角度が鋭角であるとき反射現象を起こす (図 5 (a))，正面衝突すると融合現象を起こす (図 5 (b))，二つの液滴の体積差が大きいときは正面衝突する前に反射する (図 5 (c)) という実験結果を再現していることがわかった。

これらの数値実験結果，次のことがわかる。衝突角度は二つの液滴が接近する速度を変化させることに対応することから，結果 3) より，速度の遅い液滴は反射し，速度の速い液滴は融合することを示唆している。さらに，結果 4) から体積差のある二つの液滴が反射することは，液滴の体積が液滴速度に依存し

ていることを示唆している。

これらの研究成果を研究集会等で講演した。また，本研究で用いた離散勾配流法の計算速度は遅いが，体積保存条件は高精度で実現できることがわかった。

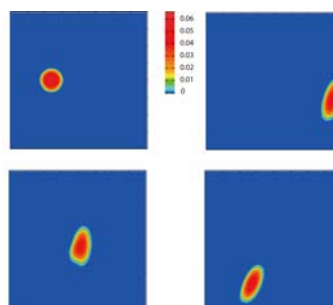


図 2. 液滴の並進運動

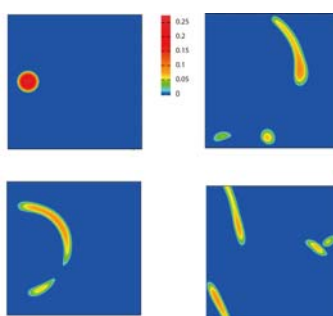


図 3. 液滴の分裂現象

本研究の中で数値計算に用いた離散勾配流法は液滴が分裂・融合を起こしても体積を保存するという点は優れているが，反復計算の収束が非常に遅いため体積の大きな液滴の数値計算を行うには数値計算法の高速化を避けて通れないことが判明した。このため現在のところ図 1 のような実験に対応する大規模な液滴運動の数値計算を行うことが困難となっている。現在のところ反復法の部分を工夫す

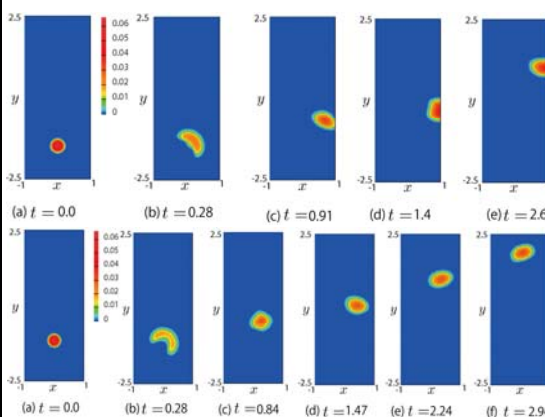


図 4. 液滴の融合と反射現象，衝突角度の違いによって液滴の相互作用が異なる。

ることによって収束回数を減少させることができるのではないかと考えており今後の課題となっている。そして、数値計算法を改善することによって図1のような実験に対応する数値実験を行っていく。その後、液滴が分裂する半径を計算機援用解析によって明らかにしたい。

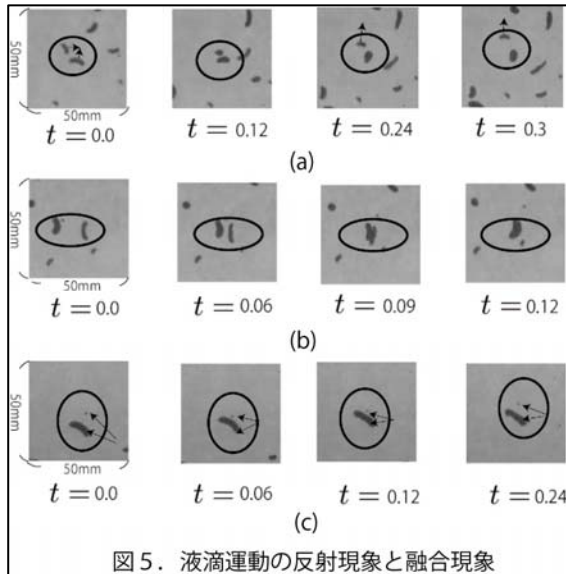


図5. 液滴運動の反射現象と融合現象

また、これは二つの液滴の融合現象と反射現象が液滴の速度に依存していることから、まず、液滴体積と液滴の並進速度の関係を明らかにし、反射現象から融合現象に変化する臨界速度を求める。そして、斜めに衝突する二つの液滴の接近速度と臨界速度の関係を明きからにしたい。これにより液滴運動に現われる液滴間相互作用を明きからにすることができるかと期待される。

##### 5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計5件)

(1) 矢留雅亮, 長山雅晴, 上田肇一, ``反応拡散系に対する大域的分岐構造の数値計算法とその応用'', 京都大学数理解析研究所講究録, 1633(2009), 39-61. (査読なし)

(2) M. Nagayama, M. Yadome, N. Kato, J. Kirisaka, M. Murakami and S. Nakata, "Bifurcation of self-motion depending on the reaction order", Physical Chemistry Chemical Physics, 11(2009), 1085-1090. (査読あり)

(3) M. Yadome, K. -I. Ueda, T. Teramoto, M. Nagayama and Y. Nishiura, "Periodic transition sequences of scattering

patterns in a three-component reaction-diffusion system", Bulletin of the Institute of Mathematics, Academia Sinica New Series, 3(4)(2008), 585-602. (査読あり)

(4) T. Yamazaki, S. Omata and M. Nagayama, ``Numerical simulation of motion of a bubble restrained to water surface'', 京都大学数理解析研究所講究録, 1522 (2006), 111-119. (査読なし)

(5) S. -I. Ei, M. Mimura and M. Nagayama, "Interacting spots in reaction diffusion systems", Discrete and Continuous Dynamical Systems, 14(1)(2006), 31-62. (査読あり)

[学会発表] (計6件)

(1) 長山 雅晴, 液滴運動の数理モデルとその数値シミュレーション, 非線形現象の数値シミュレーションと解析 2009, 北海道大学, 2009年3月7日.

(2) 長山雅晴, 現象の数理モデル, 日本数学会 (応用数学分科会特別講演), 近畿大学, 2008年03月25日.

(3) 長山 雅晴, 反応拡散系に対する大域的分岐構造の数値計算法, 日本数理生物学会企画シンポジウム, 同志社大学, 2008年9月18日.

(4) M. Nagayama, Traveling Spots Dynamics in Reaction-Diffusion Systems, International Conference on Computational Science 2007, Institut Teknologi Bandung, December 3, 2007. (招待講演)

(5) 長山 雅晴, 液滴運動のモデル方程式とその数値計算法, 日本物理学会 (ポスター講演), 鹿児島大学, 2007年03月21日.

(6) M. Nagayama, Mathematical modeling for the motion of oil droplet, East-Asia Workshop on Pattern Formations and Reaction-Diffusion Systems, Chinese University of Hong Kong, Tuesday December, 14, 2006. (招待講演)

[図書] (計1件)

[1] 三村 昌泰, 長山 雅晴, ``パターン形成とダイナミクス (非線形・非平衡現象の数理4) 第3章: 発熱反応拡散系に現われる空間パターン'', 63-94, 東京大学出版会,

2006年

[その他]

ホームページアドレス

<http://blossom1.s.kanazawa-u.ac.jp/professor/research.html>

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

長山 雅晴 (NAGAYAMA MASAHARU)

金沢大学・数物科学系・教授

研究者番号：20314289

### (2) 研究協力者

小俣 正朗 (OMATA SEIRO)

金沢大学・数物科学系・教授

研究者番号：20214223

北畑 裕之 (KITAHATA HIROYUKI)

千葉大学・理学研究科・講師

研究者番号：20378532