

令和 6 年 6 月 4 日現在

機関番号：14501

研究種目：若手研究

研究期間：2020～2023

課題番号：20K14370

研究課題名（和文）流速場と拡散ダイナミクスの相乗的な効果による拡散促進現象

研究課題名（英文）Cooperative effect of diffusion and convection

研究代表者

小谷野 由紀（Koyano, Yuki）

神戸大学・人間発達環境学研究科・助教

研究者番号：50849643

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,200,000円

研究成果の概要（和文）：流体の混合において、流れによる攪拌と熱揺動による拡散の2つのダイナミクスが重要である。2つは基本的に異なる時空間スケールを持つので分けて考えることが普通だが、特に小さい空間スケールでは攪拌（移流）と拡散が協働した混合がみられる場合がある。このような協働効果は移流拡散方程式を時間積分することによって明らかにできるが、非自明な効果であるため数値計算に頼る必要がある。本研究では、離散的なフォッカー・プランク方程式を用いることで、拡散の促進、異方的な拡散、流動場だけでは説明できない移流効果など、非自明な移流と拡散の協働現象を解析的に導くことに成功した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

移流と拡散が協働する現象はサブミリメートル以下のスケールで重要だと考えられる。近年、浮遊させた液滴を変形・合体させる技術や、マイクロ流路内での溶液混合など、マイクロスケールで流体を操作する工業的技術が発展を遂げている。本研究はそれらに基礎的な知見を与えることが期待される。また、細胞内には形状が変形するタンパク質が多数存在するが、そういったアクティブな要素が変形運動を続ける環境下での物質拡散に対しても重要な知見を与える可能性がある。

研究成果の概要（英文）：Convection and diffusion are fundamental processes in regard to fluid mixing. The two dynamics, convection and diffusion, usually have different spatial and temporal scales, and thus they can be considered separately.

However, it has been revealed by the experiments that the cooperative effect of convection and diffusion can cause nontrivial diffusion enhancement.

In this study, such cooperative effects were precisely investigated. We numerically found that anisotropic diffusion and net shift as well as diffusion enhancement were observed under a reciprocal flow. Such anomalous diffusion and convection were theoretically explained by the discrete Fokker-Planck equation of the Langevin dynamics.

研究分野：非線形物理学

キーワード：移流拡散方程式 フォッカー・プランク方程式 移流 拡散 異常拡散

1. 研究開始当初の背景

二流体を混ぜ合わせる工程は、工業の分野では基本的な操作の一つであり、経験則も含め技術の蓄積がある。流体の混合過程は攪拌と拡散に分けることができ、マクロなスケールでは攪拌が、ミクロなスケールでは拡散が支配的である。粘性の低い流体の場合は、攪拌して乱流化させると流速場の構造がカスケード的に微細になっていきよく混ざる。一方粘性の高い流体は乱流化しにくい。熱的な揺動による物質拡散の特徴的スケール（特徴的な時間を1秒とすれば、およそ10~100 μm ）以下では、流体の混合のダイナミクスにおいて拡散が支配的になる。そのため、高粘度流体を均一に混ぜるには、拡散長程度の細かい流動構造を作ることが重要となる。しかし、系全体のスケールが小さくなればなるほど、流体の攪拌に用いることのできる外力は技術的に限られてくるため、流動による攪拌は困難となる。

流体の攪拌においては、流動構造のスケールだけでなく、流動構造それ自体も重要なファクターである。渦状の流速場では引き伸ばしと回帰が絶えず繰り返され、パイ捏ね写像の要領で攪拌が起こる。そのため時間反転対称でない外力が望ましいが、技術的な制約がある場合もある。例えば流動を引き起こす外力が振動的な場合、レイノルズ数が小さい流体では流れが単純な構造になりやすいため、流速場は振動的になると予想される。このような振動的な流速場では流体素片が往復運動し周期的に元の位置に戻ってくるため、攪拌には寄与しない。そのため、小さなスケールでは物質拡散が重要であると考えられる。

熱的な揺動による物質拡散の拡散係数は、ブラウン運動する粒子のサイズや、周囲流体の粘度、温度などによって決まる。これらのファクターに加えて、攪拌能力のない振動的な流速場が拡散係数に寄与することが、実験的に明らかとなってきた[1]。この実験系では、粒子を分散させた流速場の観察において、振動的な流速場が生じていることが示唆されている。振動的な流速場はその瞬間ごとに物質の輸送を行うが、振動の周期毎に時間平均をとると正味の輸送はない。それに関わらず、物質の混合が速く進行した。本研究実施者らはこの現象を説明するため、ランジュバン方程式に移流項を加えた確率微分方程式から、粒子の分布確率の方程式（離散時間のフォッカー・プランク方程式）を求めた[2]。その結果、実効的な拡散係数が、熱の揺動による拡散係数に加え、流速場由来の拡散係数からなること、すなわち、従来の拡散係数より大きくなることを見出した。

このように、流動場と拡散とがカップルすることではじめて生じる拡散の促進現象が発見され、理論的な解析が少しずつ進んできていた。しかし研究開始時では、具体的な系（流動場）に対する解析に留まっていた。また、理論解析も非自明な拡散の促進が現れる最低次までの計算しか行われておらず、高次の項から定性的に異なる現象が見られるかどうか未知であった。

2. 研究の目的

研究開始時点では、具体的な実験結果を説明する理論について研究がなされていたが、振動的な流速場は常に拡散を促進するのかについては明らかになっていない。また、振動的な流速場でない場合においても、流速場が拡散に寄与する可能性があるが未知である。それらを解明することが本研究の目的である。

3. 研究の方法

まず、振動的な流動がある場合の移流拡散方程式やランジュバン方程式を数値的に解くことで、どのような定性的に非自明な現象（拡散・移流）がみられるか調べる。さらに離散フォッカー・プランク方程式を理論的に解析することにより、移流と拡散の共同現象について詳細な情報を得る。

4. 研究成果

まず、振動的な流動がある場合の移流拡散方程式やランジュバン方程式を数値的に解くことで、通常の熱拡散と異なった振る舞いが現れるのか詳細に調べた。その結果、既に往復的な流体場によって拡散が促進されることが明らかとなっていた[2]が、拡散の促進現象に加え、異方的な拡散が起きることが明らかとなった（図1）。今回見つかった異方的な拡散は、初期分布がガウス分布で与えられたとき、等方的に分布が広がるのではなく、三ツ矢のような120度ずつの3方向に拡散が大きくなり、その3方向から60度ずれた方向では拡散が抑えられるというものである。また、拡散だけではなく、移流にも変化が生じることが明らかとなった。流動の影響のみ

を考えれば、振動的な流動場は一周期の平均（もしくは長時間平均）で移流がゼロとなるが、拡散と協働することで非自明な移流が生じる。

数値計算で明らかとなった異方的な拡散や非自明な移流を説明するため、離散的なフォッカー・プランク方程式を考えた。これまでも離散的なフォッカー・プランク方程式は用いてきており、2次のモーメントまで考慮してきたが、今回新たに4次のモーメントまで計算を行った。解析計算の結果、3次のモーメントの項の効果によって三つ矢状の異方的な拡散を説明することができた。拡散促進の効果は、拡散係数に比例し、流動場の振幅の2乗に比例する。一方、異方拡散の効果は、拡散係数の2乗に比例し、流動場の振幅に比例する。よって、相対的に拡散係数が小さく流動場の振幅が大きいパラメータ領域では拡散の促進が、拡散係数が大きく流動場の振幅が小さいパラメータ領域では異方的な拡散が見られる。さらに、異方的な拡散が起きるには、流速場に空間的な勾配がある必要があることが明らかとなった。具体的には冪関数にして3乗以上の依存性が必要である。例えばハーゲン・ポワズユ流れでは異方的な拡散は見られないことがわかり、マイクロ流路内部で往復振動流を誘起した場合には、拡散の促進のみを考えれば良い。

また、1次のモーメントによって非自明な移流を説明できることが明らかとなった。移流の大きさのオーダーは流動場の振幅の2乗、拡散係数の1乗である。流動場のみでは一周期で移流はゼロとなるはずであるから、これは流動場と拡散が協働することではじめて起こる非自明な効果である。一般の流れに適用できる結果かはまだ明らかになっていないが、基本的に流れのずり応力がより大きい方向へ移流が起きる。この移流効果は流速場に空間的な依存性がある必要があり、具体的には冪関数にして3乗以上の位置依存性が必要である。そのため、ハーゲン・ポワズユ流れでは生じない効果である。一方、酵素反応によって形状を変化させるタンパク質が流れを生じさせる場合には、タンパク質を近似的に力の双極子とみなすことができ、拡散促進や異方的な拡散だけでなく移流効果があると期待される。

上記の主要な結果に加え、アクティブな粒子が多数存在する環境下におけるブラウン粒子の挙動についても研究を進めた[3]。この研究は酵素反応が起きている環境下でのブラウン粒子の挙動を観察した実験から着想を得ている。そこで酵素を形状が変化するアクティブな素子として、酵素を模した粒子（Dimer）とブラウン粒子（Tracer）からなる空間2次元多体系の数値計算を行った（図2）。酵素は2つの円形粒子をバネで繋いだダンベル状の粒子とし、バネの自然長を周期的に変化させることで形状変形を実装した。すべての粒子は排除体積を持ち、またランジュバンダイナミクスに従うとしてモデリングした。数値計算の結果、超短時間では他の粒子との衝突による相互作用がないため純粋なブラウン運動が見られ、短時間では粒子の混み合いの効果から亜拡散的となり、長時間経つと通常拡散に回復するといった、ガラス系で知られている鳥かご効果が確認された。加えて、酵素反応が起きていると拡散が大きくなり、通常拡散への回復も早くなること、亜拡散が起きているとき平均自乗変位は時間の α 乗（ $0 < \alpha < 1$ ）となるが、この指数 α が酵素反応の有無によって変化し、酵素反応が起きている方が α が大きい、すなわち通常拡散に近いことも明らかとなった。また、粒子密度（混雑度合い）の影響についても実験と定性的に同じ結果を得ることができた。

<引用文献>

[1] Watanabe *et al.*, *Sci. Rep.* (2018). [2] Koyano *et al.*, *Phys. Rev. E* (2020). [3] Koyano *et al.*, *Phys. Rev. E* (2022). [4] Maiti *et al.*, *Phys. Rev. E* (2024).

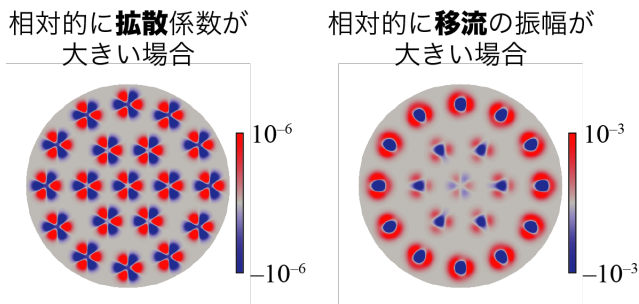


図 1: 移流拡散方程式と拡散方程式の時間発展の差分 [3]。移流拡散方程式に含まれる移流は、周期的で正味の移流がない。移流赤い(青い)領域は拡散方程式の時間発展結果より濃度が高い(低い)エリアを表す。拡散係数が相対的に大きいときには異方的な拡散が、移流が相対的に大きいときには拡散の促進が見られる。初期条件として、各スポットに幅の狭いガウシアンをおいた。

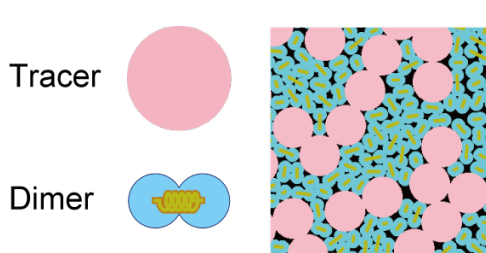


図 2: 酵素を模した粒子（Dimer）とブラウン粒子（Tracer）からなる空間 2 次元多体系のイメージ図。混み合い効果と Dimer のアクティビティによって、Tracer の平均自乗変位が定量的に変化する。

ため純粋なブラウン運動が見られ、短時間では粒子の混み合いの効果から亜拡散的となり、長時間経つと通常拡散に回復するといった、ガラス系で知られている鳥かご効果が確認された。加えて、酵素反応が起きていると拡散が大きくなり、通常拡散への回復も早くなること、亜拡散が起きているとき平均自乗変位は時間の α 乗（ $0 < \alpha < 1$ ）となるが、この指数 α が酵素反応の有無によって変化し、酵素反応が起きている方が α が大きい、すなわち通常拡散に近いことも明らかとなった。また、粒子密度（混雑度合い）の影響についても実験と定性的に同じ結果を得ることができた。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計11件（うち査読付論文 11件 / うち国際共著 3件 / うちオープンアクセス 3件）

1. 著者名 Koyano Yuki, Kitahata Hiroyuki	4. 巻 106
2. 論文標題 Anomalous diffusion and transport by a reciprocal convective flow	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review E	6. 最初と最後の頁 024102/1-10
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevE.106.024102	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Ishikawa Hiroaki, Koyano Yuki, Kitahata Hiroyuki, Sumino Yutaka	4. 巻 106
2. 論文標題 Pairing-induced motion of source and inert particles driven by surface tension	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review E	6. 最初と最後の頁 024604/1-11
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevE.106.024604	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Kitahata Hiroyuki, Koyano Yuki, Loffler Richard J.G., Gorecki Jerzy	4. 巻 24
2. 論文標題 Complexity and bifurcations in the motion of a self-propelled rectangle confined in a circular water chamber	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 20326 ~ 20335
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D2CP02456J	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Loffler Richard J.G., Rolinski Tomasz, Kitahata Hiroyuki, Koyano Yuki, Gorecki Jerzy	4. 巻 25
2. 論文標題 New types of complex motion of a simple camphor boat	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 7794 ~ 7804
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D2CP05707G	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Kitahata Hiroyuki, Koyano Yuki	4. 巻 10
2. 論文標題 Self-Propelled Motion of the Camphor Float With n-Fold Rotational Symmetry	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Frontiers in Physics	6. 最初と最後の頁 858791/1-11
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3389/fphy.2022.858791	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Hirose Yuhei, Yasugahira Yusuke, Okamoto Mamoru, Koyano Yuki, Kitahata Hiroyuki, Nagayama Masaharu, Sumino Yutaka	4. 巻 89
2. 論文標題 Two Floating Camphor Particles Interacting through the Lateral Capillary Force	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 074004/1 ~ 8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.89.074004	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Kitahata Hiroyuki, Koyano Yuki	4. 巻 89
2. 論文標題 Spontaneous Motion of a Camphor Particle with a Triangular Modification from a Circle	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 094001/1 ~ 9
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.89.094001	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Koyano Yuki, Kitahata Hiroyuki, Hasegawa Koji, Matsumoto Satoshi, Nishinari Katsuhiko, Watanabe Tadashi, Kaneko Akiko, Abe Yutaka	4. 巻 102
2. 論文標題 Diffusion enhancement in a levitated droplet via oscillatory deformation	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review E	6. 最初と最後の頁 033109/1 ~ 10
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevE.102.033109	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Koyano Yuki, Kitahata Hiroyuki	4. 巻 103
2. 論文標題 Imperfect bifurcation in the rotation of a propeller-shaped camphor rotor	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review E	6. 最初と最後の頁 012202/1~10
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevE.103.012202	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Era Katsutomo, Koyano Yuki, Hosaka Yuto, Yasuda Kento, Kitahata Hiroyuki, Komura Shigeyuki	4. 巻 133
2. 論文標題 Autonomous elastic microswimmer	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 EPL (Europhysics Letters)	6. 最初と最後の頁 34001/1~7
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1209/0295-5075/133/34001	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Maiti Arnab, Koyano Yuki, Kitahata Hiroyuki, Dey Krishna Kanti	4. 巻 109
2. 論文標題 Activity-induced diffusion recovery in crowded colloidal suspensions	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Physical Review E	6. 最初と最後の頁 054607/1-9
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevE.109.054607	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

〔学会発表〕 計13件 (うち招待講演 2件 / うち国際学会 5件)

1. 発表者名 Yuki Koyano and Hiroyuki Kitahata
2. 発表標題 Anomalous diffusion under a reciprocal convective flow
3. 学会等名 STATPHYS28 (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 小谷野由紀
2. 発表標題 相互作用する2つの自発回転子にみられる同期現象の数理
3. 学会等名 札幌非線形現象研究会2023
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Yuki Koyano
2. 発表標題 Synchronization of two interacting active rotors
3. 学会等名 Advanced core-to-core network for the physics of self-organizing active matter (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 小谷野由紀, 北畑裕之
2. 発表標題 樟脳回転子の運動にみられる同期現象
3. 学会等名 日本物理学会第78回年次大会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 小谷野由紀
2. 発表標題 往復する振動対流の下での拡散・移流
3. 学会等名 札幌非線形現象研究会2022
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Yuki Koyano and Hiroyuki Kitahata
2. 発表標題 Imperfect bifurcation in the rotation of a propeller-shaped camphor rotor
3. 学会等名 The 5th Symposium on International Joint Graduate Program in Material Science (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Yuki Koyano
2. 発表標題 Anomalous diffusion and transport by a reciprocal convective flow
3. 学会等名 Poland-Japan symposium on spatio-temporal self-organization 2022 (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Yuki Koyano
2. 発表標題 Imperfect bifurcation in the rotation of a propeller-shaped camphor rotor
3. 学会等名 RIMS Workshop "Mathematical Mechanobiology" (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 小谷野 由紀, 北畑 裕之
2. 発表標題 往復する振動対流の下での拡散挙動
3. 学会等名 日本物理学会2021年秋季大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Yuki Koyano
2. 発表標題 Bifurcation structure in a self-rotating camphor particle system
3. 学会等名 Poland-Japan symposium on spatio-temporal self-organization 2021
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 小谷野由紀, 内田就也
2. 発表標題 固体基板上的自己駆動液滴の自走・合体ダイナミクス
3. 学会等名 日本物理学会第77回年次大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 小谷野 由紀, 北畑 裕之
2. 発表標題 プロペラ型樟脳粒子の自転運動にみられる不完全分岐
3. 学会等名 日本物理学会第76回年次大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 小谷野 由紀, 北畑 裕之, 中田 聡, Jerzy Gorecki
2. 発表標題 周期的な停止操作の下で自発的に回転方向を変える回転子
3. 学会等名 日本物理学会2020年秋季大会
4. 発表年 2020年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
--	---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関		
インド	インド工科大学ガンディーナガル校		