

平成 30 年 4 月 23 日現在

機関番号：14301

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2014～2017

課題番号：26870224

研究課題名(和文) 接触角ダイナミックスの数理

研究課題名(英文) Mathematical analysis of contact angle dynamics

研究代表者

SVADLENKA KAREL (Svadlenka, Karel)

京都大学・理学研究科・准教授

研究者番号：60572188

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,700,000円

研究成果の概要(和文)：流体による濡れ現象に代表される発展自由境界問題の数学的理解とそれに続く幅広い応用の展開を目指し、本研究では運動する界面ネットワークの解析手法のための土台を確立した。とくに、エネルギー勾配流によるネットワーク運動とエネルギーを保存する振動運動の数値解法の基となる近似法を提案し、その数学的な根拠を与え、近年の研究で注目される特異性や制約条件を含む界面ネットワーク運動のシミュレーションを可能にするアルゴリズムを開発した。これらの成果は細胞組織形成の研究や新材料開発においてより高度なシミュレーションを可能にした。

研究成果の概要(英文)：With the purpose of mathematical understanding of evolutionary free boundary problems, represented by the wetting phenomenon, and development of a wide range of applications following this theoretical understanding, in this research I established the basis of analysis methods for moving interfacial networks. In particular, I proposed approximation methods forming the ground for numerical solution of interfacial network motion due to energy gradient descent and oscillatory energy-preserving motion, provided their mathematical justification and, based on these, developed algorithms for simulations of network evolutions including singularities and constraints, which are topics recently receiving attention in the research community. These results facilitate higher-level simulations in tissue morphogenesis research, development of new materials, etc.

研究分野：応用数学

キーワード：界面ネットワーク運動 数値解析 レベルセット法

### 1. 研究開始当初の背景

液滴の固体上の運動のような、流体を含む三つ以上の異なる物質が一箇所で交わる発展現象において、表面エネルギーの最小性、ヒステレシス、三重線の弾性や先行薄膜の出現など、接触角のダイナミクスに影響する要因が複数存在することが知られている。しかし、研究開始当初の時点では、実際の界面運動ではそれぞれの要因がどのような役割を持ち、お互いにどのように組み合わせられているのか、その仕組みは十分に理解されていなかった。このような理解を深めることができれば、ナノテクノロジーや熱伝導や生物における細胞組織形成の研究など、様々な分野で新材料や新技術の開発への応用が可能となる。これらの要因のうち影響が最も大きいものを特定し、主要な要因の役割を明らかにするためには、様々な数理モデルの数学解析と、それに基づいた数値シミュレーションが不可欠であることを認識した。

### 2. 研究の目的

本研究の目的は、接触角を含む界面の運動の実用的なモデルを開発しモデルの数学的・数値計算的な解析を行うことにより、接触角のダイナミクスに関係する要因を探り、その影響を解明することである。その際、表面エネルギーの最小性やヒステレシスなど、すでに物理的な観点から知られている要因に加え、界面の慣性という新しい要因を提案し、それぞれの要因の効果を数学的に厳密に記述し、計算モデルを構築する目標を掲げた。

### 3. 研究の方法

接触角のダイナミクスにおいて重要な役割をもつ要因を特定し実用可能なモデルを構築するためには、要因の選定・要因の数学解析・モデルの構成・数値計算の実装・モデルの検証というステップを実験データと合致する結果を得るまで繰り返し行うアプローチをとった。最初は表面エネルギーの最小性と界面の

慣性という要因を用いたモデルを検討し、これらの要因の数値解析に重点を置いた。

数学的には接触角の運動は発展自由境界問題と深い関係にある。放物型自由境界問題は楕円型理論の延長線上にあり解析が進んでいるが、本研究で主に扱う双曲型自由境界問題についての結果が僅かなため、この問題群の解析は純粋数学の観点からも重要な課題である。そのため、研究を進めるにあたり、常に双曲型問題の理解につながる部分問題や解析手法を目指すこと意識した。

### 4. 研究成果

本研究を通して、数値計算において利用できる適切な近似法を考察する方向から攻める方法で、接触角ダイナミクスの問題の部分的な解決に貢献した。

具体的には、変形中に起こる位相変化などの特異性を扱うことのできるレベルセットによる表現に着目し、接触角の運動が代表例となる多相発展問題をベクトル値関数の等高面を用いて近似できることを示し、このアプローチの数学解析を行い、実装可能な数値スキームを開発した。特に、接合点における収束が重要な新しい結果である。

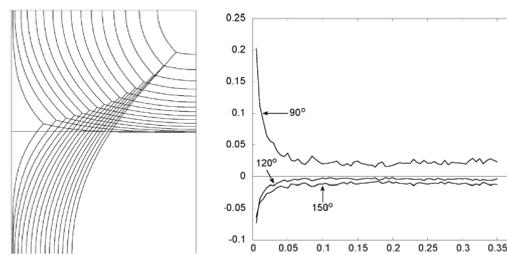


図 1. 接合点における数値スキームの近似精度の解析 (以下、論文 5 より転載)

次に、接触角の運動問題においてそれぞれの界面の表面張力が異なる特徴、そして相の体積が保存される制約条件を数学的に扱う方法を提案し、対応する数値解法の解析を行った。これにより、細胞組織の形成のような実際問題の界面モデルによる数値実装が可能

となった。

慣性（界面の加速度）を考慮しない従来のモデルでは運動中の接触角は一定で面白いダイナミクスが見られないことから、研究の後半では界面の形状に依存する加速度の効果を調べた。この種の最も単純なモデルである双曲型平均曲率流でさえ位相変化まで踏み込んだ数値解析は行われていなかったが、本研究ではレベルセット法に基づいた近似を開発した。

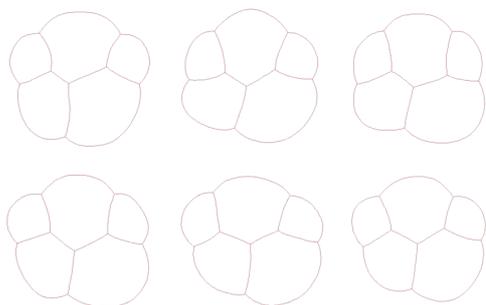


図 2. 体積保存する双曲型界面ネットワーク運動の数値計算結果（以下、論文 2 に関する）

最後に、この双曲型界面運動の数値解析と接触角問題で求められる多相設定や体積に関する拘束条件に対応するための高度化に専念し、これらの要素を含む正しい近似法を確立した。さらに、他研究者が並行して得た結果を取り入れ、応用上で重要となる非等方的な界面エネルギーへ拡張した。

以上の通り、接触角ダイナミクスを完全に説明する数学的な理論という本研究の最終目標には至っていないが、数学的な根拠をもつ汎用的な近似法の開発により、現象のシミュレーションの正確な再現を可能にしただけでなく、理論を完成させるのに必要な知見も得た。これからはこの土台を活用して、最終目標に近づけていきたい。

## 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 11 件）

- ① Nur Shofianah, K. Svadlenka, R. Z. Mohammad, *Numerical method for the simulation of contact angle dynamics*, AIP Conference Proceedings, 査読有, 1913:1, 2017. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.5016654>
- ② E. Ginder, K. Svadlenka, *Wave-type threshold dynamics and the hyperbolic mean curvature flow*, Japan J. Indust. Appl. Math., 査読有, 33(2), pp. 501-523, 2016. DOI: <https://doi.org/10.1007/s13160-016-0221-0>
- ③ E. Ginder, K. Svadlenka, 変分法による界面運動のシミュレーション, 計算工学, 査読無, Vol. 20, No. 3, pp. 5-8, 2015.
- ④ K. Svadlenka, 曲率による界面運動の数値解法の一般化, 計算工学講演会論文集, 査読有, Vol. 20, 2015.
- ⑤ Nur Shofianah, R. Z. Mohammad, K. Svadlenka: *Simulation of triple junction motion with arbitrary surface tensions*, IAENG International Journal of Applied Mathematics, 査読有, Vol. 45, No. 3, pp. 235-244, 2015. URL: [http://www.iaeng.org/IJAM/issues\\_v45/issue\\_3/IJAM\\_45\\_3\\_09.pdf](http://www.iaeng.org/IJAM/issues_v45/issue_3/IJAM_45_3_09.pdf)
- ⑥ R. Z. Mohammad, K. Svadlenka, *Multiphase volume-preserving interface motions via localized signed distance vector scheme*, Discrete and Continuous Dynamical Systems - Series S, 査読有, Vol. 8, No. 1, pp. 969-988, 2015. DOI: [10.3934/dcdss.2015.8.969](https://doi.org/10.3934/dcdss.2015.8.969)
- ⑦ N. Shofianah, R. Z. Mohammad, K. Svadlenka, *On a numerical method for*

- the simulation of contact angle dynamics*, Proceedings of Computational Engineering Conference JSCES, 査読有, Vol. 19, 2014. URL: [https://www.researchgate.net/publication/277078032\\_On\\_a\\_Penalization\\_Method\\_for\\_an\\_Evolutionary\\_Free\\_Boundary\\_Problem\\_with\\_Volume\\_Constraint](https://www.researchgate.net/publication/277078032_On_a_Penalization_Method_for_an_Evolutionary_Free_Boundary_Problem_with_Volume_Constraint)
- ⑧ E. Ginder, K. Svadlenka, *On an algorithm for curvature-dependent interfacial acceleration*, Proceedings of Computational Engineering Conference JSCES, 査読有, Vol. 19, 2014.
- ⑨ R. Z. Mohammad, K. Svadlenka, *On a penalization method for an evolutionary free boundary problem with volume constraint*, Advances in Mathematical Sciences and Applications, 査読有, Vol. 24 No. 1, pp. 85-101, 2014.
- ⑩ K. Svadlenka, E. Ginder, S. Omata: *A variational method for multiphase volume-preserving interface motions*, Journal of Computational and Applied Mathematics, 査読有, Vol. 257, pp. 157-179, 2014. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cam.2013.08.027>

[学会発表] (計 23 件)

- ① K. Svadlenka, Simulation of interfacial motion with non-constant tensions, A3 Workshop on Fluid Dynamics and Material Science, Qingdao, China, 2017年
- ② K. Svadlenka, On hyperbolic mean curvature flow with junctions, Free Boundary Problems and Nonlinear PDEs, Hokkaido University, 2017年
- ③ K. Svadlenka, 非線形発展問題に対する

- 時間半離散化法について (特別講演), 日本数学会 2014 年度会, 学習院大学
- ④ K. Svadlenka, Models and Computational Methods for Moving Interface Networks, ICWOMAA 2017, Malang, 2017年
- ⑤ K. Svadlenka, Numerical analysis of moving interfaces: the level-set and phase-field approaches, IMI workshop: Mathematics in Interface, Dislocation and Structure of Crystals, Kyushu University, 2017年
- ⑥ K. Svadlenka, Numerical approximation of hyperbolic mean curvature flow, Equadiff 2017, Minisymposium MS21 - Moving boundaries and complex phenomena II, Slovak Technical University, Bratislava, Slovakia, 2017年
- ⑦ K. Svadlenka, Method of thresholds for numerical approximation of interface network motion, OIST Mini Symposium: Viscoelasticity and Dissipative Dynamics of Rods and Membranes, 2017年
- ⑧ K. Svadlenka, Numerical approximation of multiphase interface evolution, A3 Workshop on Soft Matter 2017, Tohoku University, 2017年
- ⑨ K. Svadlenka, Mathematical challenges in tissue formation related to interface network dynamics, A3 foresight workshop "Modeling and Simulation of Hierarchical and Heterogeneous Flow Systems with Applications to Material Science", Tohoku University, 2016年
- ⑩ K. Svadlenka, Applications of thresholding methods for interface motion, CoMFoS16: Mathematical

Analysis of Continuum Mechanics and Industrial Applications II, Kyushu University, 2016年

- ⑪ K. Svadlenka, On a penalty method for volume preserving interface motions, Soft Matter Workshop, Beihang University, China, 2016年
- ⑫ K. Svadlenka, The wetting problem: Its history and present tasks, Second Joint Workshop of China-Japan-Korea A3 Foresight Program, Xiamen University, 2015年
- ⑬ K. Svadlenka, 曲率による界面運動の数値解法の一般化, 第20回計算工学講演会, つくば国際会議場, 2015年
- ⑭ K. Svadlenka, Numerical and mathematical analysis of evolution problems related to wetting phenomena, A3 joint Workshop on Fluid Dynamics and Material Science, 北京大学, 2015年
- ⑮ K. Svadlenka, 界面ネットワークの平均曲率流の数値計算, 新時代の科学技術を牽引する数値解析学, 京都大学数理解析研究所RIMS 研究集会, 2014年

〔図書〕 (計 0 件)

〔産業財産権〕

○出願状況 (計 0 件)

名称：  
発明者：  
権利者：  
種類：  
番号：  
出願年月日：  
国内外の別：

○取得状況 (計 0 件)

名称：  
発明者：  
権利者：  
種類：  
番号：  
取得年月日：

国内外の別：

〔その他〕  
ホームページ：  
<https://www.math.kyoto-u.ac.jp/~karel/index.html>

6. 研究組織

(1) 研究代表者  
シュワドレンカ・カレル (Svadlenka Karel)  
京都大学・理学研究科・准教授  
研究者番号：60572188

(2) 研究分担者  
( )

研究者番号：

(3) 連携研究者  
( )

研究者番号：

(4) 研究協力者  
( )