

令和元年6月24日現在

機関番号：32682

研究種目：基盤研究(C) (特設分野研究)

研究期間：2015～2018

課題番号：15KT0099

研究課題名(和文) The Interfacial and Free-Boundary Dynamics of Active Matter

研究課題名(英文) The Interfacial and Free-Boundary Dynamics of Active Matter

研究代表者

Ginder Elliott (Ginder, Elliott)

明治大学・総合数理学部・専任准教授

研究者番号：30648217

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,600,000円

研究成果の概要(和文)：界面型アクティブマターの数理モデリングの研究を行い、フィラメント形状の界面活性剤の化学実験を設計し、この現象の特徴を調べました。主要な実験は、自由境界問題を用いてモデル化し、界面活性剤を表すために曲線型デルタ関数を使用しました。また数理解析、モデル方程式の定常解および進行解の存在と安定性を調べました。そして、モデル方程式のシミュレーションを行うための近似解法を設計し、シミュレーションを用いて数理モデルを化学系の実験的な観察と比較しました。結論として、提案したモデルが化学系の主な特性を捉えることが立証でき、曲線型デルタ関数が界面型アクティブマターを記述するのに効果的であることが立証できました。

研究成果の学術的意義や社会的意義

界面運動は、科学および工業的の応用において、社会の発展には欠かせない重要なテーマです。界面の動きを数理的な特性から理解することは、応用範囲を広げる基盤をつくることに繋がります。このような研究で使われる通常のデルタ関数は、点質量(point mass)の設定でよく利用されていますが、本研究では界面型アクティブマターの応用のため、線質量(line mass, ハウスドルフ測度)の数理科学および計算手法を開発しました。これにより、様々な分野での問題点や開発において、詳細な視点から合理的に分析が可能となることを期待しています。

研究成果の概要(英文)：We researched the mathematical modeling of interfacial active matter. A chemical system of surfactant filaments was designed and experimentally investigated. The system was modeled using free boundary problems, where line mass delta functions (Hausdorff measures) were used to express the location of surfactant filaments. A mathematical analysis of the model equations was performed, where the existence and stability of stationary and traveling pulse solutions was addressed. Numerical methods for performing simulations of the model equations were designed and implemented. Here, finite element methods and immersed boundary techniques were used. Simulations were used to compare the mathematical model with experimental observations of the chemical system. Overall, we showed that the proposed model is able to capture the main properties of the chemical system. We also showed that line masses are an effective in describing interfacial active matter.

研究分野：応用数学

キーワード：active matter free boundary problems interfacial dynamics physical chemistry mathematical modeling

様式 C-19, F-19-1, Z-19, CK-19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

空間パターンは、バクテリア・コロニーから交通渋滞に至るまで、自然界から自然社会においてさまざまな場面で見受けられます。そのため科学全体を通して広く研究され続け、自然界のパターン形成の研究は、数理科学のテーマとしてもアクティブマター (active matter) と呼ばれる研究分野へ導かれました。用語としての「アクティブマター」というのは、その物質が周囲の環境に応じて移動しながら、他のアクティブマターに反応し進化し続ける物質を意味します。多くの研究におけるアクティブマターは、小さな変形不可能な物体としてモデル化されています。これに関連する研究としては、粘菌 (slime mold) のパターン形成や Viscek モデルなどが含まれ、私たちの身近な生活でも触れていることでしょう。そこで本研究では、数理科学の観点を通して、変形可能なアクティブマターをフィラメントや他の界面として記述されている設定で着目し研究を始めました。

2. 研究の目的

化学実験で見られる「active matter」界面現象のモデリングと、それに伴う数理科学の研究を目指しました。目的を具体的に表現すると、界面型アクティブマター (interfacial active matter) の化学実験を設計した上で、それに対応する現象の数理モデリングおよび数理解析を行う研究です。最も初めに主となる課題としては、界面型アクティブマターをモデル方程式に取り入れるための数学構造を見つけることです。そのために、数理解析の側面としてこの研究では、「co-dimension 1」の界面を表現可能とする数理構造の構築に着目しました。また、モデル方程式の進行パルス解の存在と、その安定性についても調べました。数理モデリングでは、この数理構造を実現する計算手法と、有限要素法のアルゴリズム開発を目標とした研究も同時に進めていきました。さらに、実験のシミュレーションを行うための計算手法の開発にも着手し、そのモデル方程式の解の構造解析を進めました。これらの研究結果を用いて、化学実験のシミュレーションを行い、計算結果を通して実際の現象を比較することにより、数学の理論、計算の技術、そして対象となる化学実験の現象について学際的に研究を探索していきました。

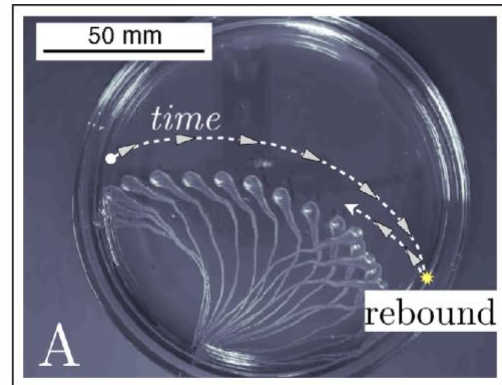


図 A : 実験結果

3. 研究の方法

この研究を進めるにあたり、フィラメントの形状にした接着剤の水面上での自発運動の実験を入念に調べることから研究を進めました。実験でのフィラメントをシャーレの端に取り付けることによって、複数の種類の現象を観察し記録しました。フィラメントの同期振動の原因について着目しつつも、実験上のパラメータを調べていきました。その次のステージとして、これらのデータを総合するために実験の数理モデルを設計しました。モデル方程式においては、有限要素法を使用し、計算上で表現しました。これによりモデル方程式は界面型のデルタ関数が入っているため、自由境界問題であることが明らかとなり、アクティブマターで成り立つ境界条件が現れました。この条件においては jump condition となったため、近似解法にて取り扱う必要が出てきました。これに応じて、界面型アクティブマターを数理的に表現するための埋め込み境界法を導入しました。これらの研究工程を踏まえ、モデル方程式の妥当性を確認するシミュレーションを行いました。また、定常解および進行パルス解を求める自由境界問題を解析し、線形安定性解析により、研究結果からの解の安定性を調べることにしました。

4. 研究成果

本研究では、化学、計算技術、数理科学の三つの側面において成果を上げることができました。

(1) 化学分野においては、水面上で動き出す界面活性剤フィラメント (cemedine-c strings) を実験により発見しました (図 A をご参照ください)。この界面現象のモデリングを行なった結果モデル方程式の弱形式でデルタ関数 (line masses) を用いると、手軽に co-dimension 1 の界面を表現できることが分かりました。また、モデル方程式の定常解および進行解の存在を解析的に証明することにも成功しました。この作成したモデル方程式の弱形式を数値的に解く近似解法を用いた結果、定常解と進行解の存在を数値的にも確認することができました。本研究の

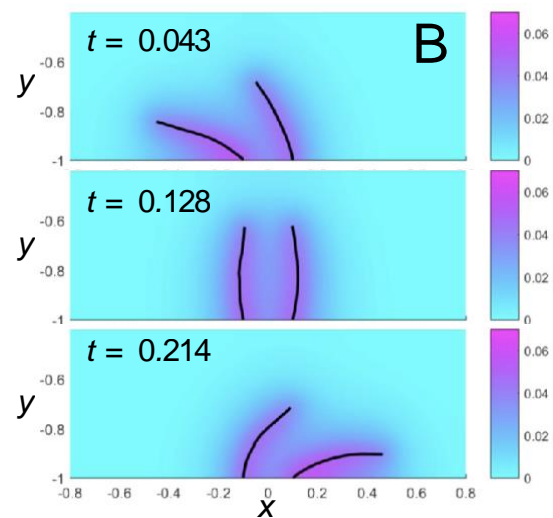


図 B : シミュレーション結果

計算手法を用いた図 B は、1 次元のモデル方程式の進行解を表します。周期境界条件のもとでこの関数は、形状を保ちながら、左から右へ進むことを示すことができました。以下は、本研究で提案したモデル方程式です。

$$\begin{cases} u_t = \Delta u - ku + \sum_{i=1}^n \delta_{\Gamma_i} & t > 0, (x, y) \in \Omega \\ m\ddot{x}_i + \mu\dot{x}_i = f_1 + f_2 + f_3 & t > 0, s \in (0, 1) \\ \frac{\partial u}{\partial \nu} = 0 & t > 0, (x, y) \in \partial\Omega \\ x_i(0, t) = a_i & t > 0 \\ x_i(s, 0) = x_0(s), \dot{x}_i(s, 0) = v_0(s) & s \in (0, 1). \end{cases} \quad (1)$$

上記の関数 u は界面活性剤の濃度、 x_i は曲線 Γ_i の媒介変数表示、 δ_{Γ_i} は曲線上のデルタ関数、 f_1, f_2, f_3 はそれぞれ u の勾配、曲率の項、曲線の長さを保存するラグランジュ乗数に対応する外力です。

(2) 計算技術の成果においては、曲線上デルタ関数を数値的に取り扱うための新しい計算手法を構築することに成功しました。通常、界面現象におけるシミュレーションでは、界面追求法 (front tracking) という計算手法を使用しています。しかし、このアプローチを使用すると界面は、ノードの集まりとして表現されているため、数値計算を行う際に数値的な不安定性が浮かんでくるのが知られています。従って、我々はこの不安定性に着目し、その難点を避けるために埋め込み境界法 (immersed boundary method, IBM) を導入し、界面の形状を level set 関数を通して表すことにしました。その結果、モデル方程式の source term となるデルタ関数を IBM 法で表現するための計算手法と有限要素法のアルゴリズム開発などを実現化することができました。図 B は、本研究の近似解法を使用したモデル方程式のシミュレーション結果を表示しています。2つの黒線は、時間 t と共に界面活性剤の濃度勾配に従って動きを表している事が確認されています。

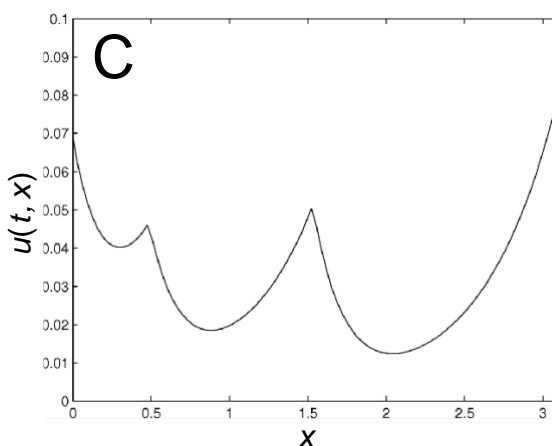


図 C : 進行解の形状

(3) 最後に本研究において数理解学的に、モデル方程式の定常解と進行解を求めることができました。実験においても定常解と進行解の特徴について研究を進めました。これと同時に、定常解と進行解の安定解析を行うことで、該当する固有値問題を数値的に解くことに成功し、この結果はフィラメントが閉曲線のモデル方程式へ導かれました。その設定の定常解と進行解の存在も数理的に示すことに、大きな研究成果を生み出せました。さらに、複数のフィラメント (図 D を参照) を使用した実験結果では、周期的に動くような行動が見うけられました。そのため、モデル方程式における周期解の存在は、いっそう精密な新しい研究課題と本課題の数理解析の研究につながると考えています。

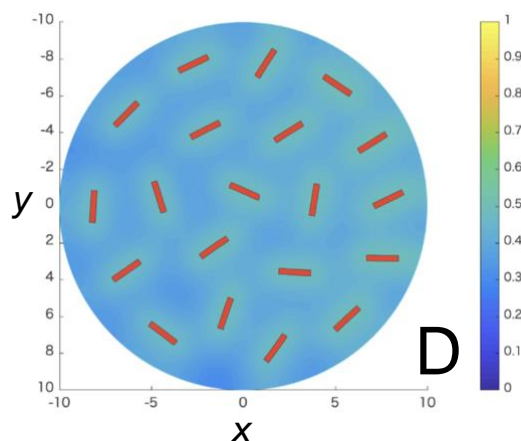


図 D : 複数アクティブマターの定常解

5. 主な発表論文等

[雑誌論文] (計 2 件)

- ① E. Ginder, T. Minomo, M. Nagayama, S. Nakata, H. Yamamoto “Traveling pulse solutions in a point mass model of diffusing particles” Computer Methods in Materials Science, 17 (2017), 111-121.
- ② E. Ginder, K. Kayahara, M. Kuze, M. Nagayama, S. Nakata, H. Nishimori. “Synchronization of self-propelled soft pendulums.” Soft Matter, 14 (2018), 3791-3798.

[学会発表] (計 6 件)

- ① E. Ginder, Mathematical Soft Matter Seminar “Variational approaches to the analysis and modeling of interfacial motions” 2017.
- ② E. Ginder, Equadiff 2017 “A line mass approach to the modeling of interfacial active matter” 2017.
- ③ E. Ginder, MIMS International Conference on Reaction-diffusion system, theory and applications “A line mass approach to some active matter systems” 2017.
- ④ E. Ginder, International Conference CoMFoS16. “Modeling of interfacial active matter: a line mass approach” 2016.
- ⑤ E. Ginder, Tongji University Workshop on Applied Mathematics. “A line mass approach to the modeling of some interfacial active matter” 2015.
- ⑥ E. Ginder, 日本応用数理学会 2015 年度年会. 「Patterns in some string and rod-like active matter systems」 2015.

〔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：
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：
国内外の別：

〔その他〕

ホームページ等

<http://amth.mind.meiji.ac.jp/>

6. 研究組織

(1) 研究分担者

研究分担者氏名：中田聡

ローマ字氏名：Nakata Satoshi

所属研究機関名：広島大学

部局名：統合生命科学研究科

職名：教授

研究者番号 (8 桁)：50217741

(2) 研究協力者

研究協力者氏名：

ローマ字氏名：

※科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。