

自己駆動系の反応拡散モデル

Reaction-Diffusion Modeling for a Self-Propelled System

本橋 樹¹⁾ 北畑 裕之²⁾ 中田 聡³⁾ 榊原 航也⁴⁾ 高棹 圭介⁶⁾

物部 治徳⁷⁾ 中村 健一⁸⁾ 藤野 拓也⁹⁾ 長山 雅晴¹⁰⁾

Natsume Motohashi, Hiroyuki Kitahata, Satoshi Nakata, Koya Sakakibara, Keisuke Takasao,
Harunori Monobe, Ken-Ichi Nakamura, Takuya Fujino and Masaharu Nagayama

¹⁾北海道大学大学院理学院 (〒 060-0808 北海道札幌市北区北 8 条西 5 丁目, E-mail: motohashi.natsume.b9@elms.hokudai.ac.jp)

²⁾千葉大学大学院理学研究院 (〒 263-8522 千葉県千葉市稲毛区弥生町 1-33, E-mail: kitahata@chiba-u.jp)

³⁾広島大学大学院統合生命科学研究科 (〒 739-8526 広島県東広島市鏡山 1-3-1, E-mail: nakatas@hiroshima-u.ac.jp)

⁴⁾金沢大学理工研究域数物科学系 (〒 920-1192 石川県金沢市角間町, E-mail: ksakaki@se.kanazawa-u.ac.jp)

⁵⁾理化学研究所数理創造プログラム (iTHEMS) (〒 351-0198 埼玉県和光市広沢 2-1)

⁶⁾京都大学大学院理学研究科 (〒 606-8502 京都府京都市左京区北白川追分町, E-mail: k.takasao@math.kyoto-u.ac.jp)

⁷⁾大阪公立大学大学院理学研究科 (〒 599-8531 大阪府堺市中区学園町 1-1, E-mail: monobe@omu.ac.jp)

⁸⁾明治大学研究・知財戦略機構 (〒 164-8525 東京都中野区中野 4-21-1, E-mail: kenichi_nakamura@meiji.ac.jp)

⁹⁾広島大学大学院理学研究科 (〒 739-8526 広島県東広島市鏡山 1-3-1, E-mail: fujinotky@hiroshima-u.ac.jp)

¹⁰⁾北海道大学電子科学研究所 (〒 060-0812 北海道札幌市北区北 12 条西 7 丁目, E-mail: nagayama@es.hokudai.ac.jp)

This paper proposes a model using the volume-conserving Allen-Cahn equation for a self-propelled system consisting of a rigid body in which a gradient surface tension induces motion. This model is introduced the mechanism to represent the shape of an object in motion to the previous model. We realize it by introducing a function defined on a rotational coordinate whose origin is the barycenter of an object in motion to double-well potential. Furthermore, we derive a model using the interface equation by taking the singular limits. This paper also shows how to derive the reaction-diffusion model by L^2 gradient flow and the numerical results for both models.

Key Words : 自己駆動系, 数値モデル, 反応拡散方程式, 特異極限法, 界面方程式

1. はじめに

自由エネルギーを自らの駆動力に変換する物体を自己駆動体といい、自己駆動体からなる運動系を自己駆動系という。自己駆動系には鳥や魚の群れ、バクテリアの集団運動などが存在するが、本研究で対象としている系は、水面に置かれた物体が自ら界面活性剤分子を展開することで生まれる水の表面張力差で駆動すると考えられている系である。この系の典型例として樟脳の運動系が存在している。現在に至るまで様々なモデルが提案されており、数理的な理解が深まっている [1]~[3]。さらに、油滴やアルコールからなる液滴による運動系も知られており、それぞれ [4] や [5] でモデルが提案されている。樟脳のような固体からなる運動系と液滴からなる運動系は、運動物体の形状に注目すると、前者は変形しない運動系、後者は変形する運動系と区別することができる。両方の系に対してこれまでいくつかのモデルが個別に提案されているが、統一的に表現できるようなモデルはこれまで存在していなかった。このような状況の中、長山らは体積保存型の Allen-Cahn 方程式によるモデルを提案した [6]。体積保存型の Allen-Cahn 方程式を用いて運動を記述するという試みは、例えば細胞運動の方面で近年報告が上がっている [7,8]。細胞運動は形が定まっていないタイプの運動系であることから、[6] のモデルも物体形状が変化するタイプの自己

駆動系に対して提案されたものである。しかし、一部ではあるが物体形状が変化しないタイプの系も扱うことができるとの報告がされている。[6] で提案されたモデルは次のとおりである：

$$\begin{cases} \tau \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \sigma^2 \Delta \varphi + \frac{1}{\varepsilon^2} f(\mathbf{x}, t, \varphi, u; \varepsilon), \\ \frac{\partial u}{\partial t} = d_u \Delta u - (k_1 + k_2)u + k_3 s_0 \varphi. \end{cases} \quad (1)$$

ここで $\mathbf{x} \in \Omega \subset \mathbb{R}^2$ は位置を、 $t > 0$ は時刻を表す変数である。また、 φ は $0 \leq \varphi < 1/2$ の場合に水面を、 $1/2 \leq \varphi \leq 1$ の場合に自己駆動体を表す秩序変数であり、 u は界面活性剤分子濃度を表している。関数 $f(\mathbf{x}, t, \varphi, u; \varepsilon)$ は次のように定められている：

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}, t, \varphi, u; \varepsilon) &= f(\mathbf{x}, t, \varphi(\mathbf{x}, t), u(\mathbf{x}, t); \varepsilon) \\ &:= \varphi(1 - \varphi)(\varphi - a(S[\varphi](t), u, \varepsilon)) \end{aligned} \quad (2)$$

ただし、 $a(S[\varphi](t), u, \varepsilon)$ は次のように定められている：

$$a(S[\varphi](t), u, \varepsilon) := \frac{1}{2} + \varepsilon(-\gamma(u) + S[\varphi](t)), \quad (3)$$

$$\begin{cases} \gamma(u) := \frac{1}{1 + (u/u_1)^m} + \gamma_0, \\ S[\varphi](t) := \alpha \left(\int_{\Omega} \varphi(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} - \int_{\Omega} \varphi(\mathbf{x}, 0) d\mathbf{x} \right). \end{cases} \quad (4)$$

また、 $\varepsilon, \tau, \sigma, d_u, k_1, k_2, k_3, s_0, u_1, m, \gamma_0, \alpha$ は全て正のパラメータである。 $\gamma(u)$ は表面張力を、 $S[\varphi](t)$ は φ の初期の体積を保存するための項である。[6] では σ を小さな値で固定し τ を徐々に小さくしていくと、最初は円形やダンベル形状の定常解が現れるが、その後ペンタノール液滴の運動で観察されるような運動が現れることが報告されている。さらに、 σ を上記の場合と比べて大きくして固定し、同様に τ を小さくしていくと、円形で固定された状態の運動が現れることが報告されている。しかし、元々物体の形状が変化するタイプの運動系に対して提案されたモデルであったため、円形以外の形状で固定されたままの運動を記述することはできなかった。そこで、(1) のモデルに対して物体の形状を表現できるようなメカニズムを導入することで、物体形状が固定されたタイプの運動系のモデルを構築しようと考えた。本論文では物体形状を表現するというメカニズムを (1) 式に加えたモデルを提案し、そのモデルの数値計算例を紹介する。また、本モデルに対して特異極限を取ることで得られる界面方程式によるモデルに対しても数値計算を行ったので、その結果も紹介する。

2. 反応拡散モデル

本研究で提案しているモデルは次のとおりである：

$$\begin{cases} \tau \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \sigma^2 \Delta \varphi + \frac{1}{\varepsilon^2} f(\mathbf{x}, t, \mathbf{x}_c, \varphi, u, \theta_c; \varepsilon), \\ \frac{\partial u}{\partial t} = d_u \Delta u - (k_1 + k_2)u + k_3 s_0 \varphi, \\ \mu \frac{d\theta_c}{dt} = \int_{\Omega} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_c) \times \varphi(\mathbf{x}, t) \nabla \gamma(u) d\mathbf{x}. \end{cases} \quad (5)$$

ここで $\mathbf{x} \in \Omega \subset \mathbb{R}^2$ は位置を、 $t > 0$ は時刻を表す変数とする。また、 φ は $0 \leq \varphi < 1/2$ の場合に水面を、 $1/2 \leq \varphi \leq 1$ の場合に自己駆動体を表す秩序変数であり、 u は界面活性剤分子濃度、 θ_c は自己駆動体の回転角である。モデル (5) 内の関数 $f(\mathbf{x}, t, \mathbf{x}_c, \varphi, u, \theta_c; \varepsilon)$ の定義は次のとおりである：

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}, t, \mathbf{x}_c, \varphi, u, \theta_c; \varepsilon) \\ = f(\mathbf{x}, t, \mathbf{x}_c(t), \varphi(\mathbf{x}, t), u(\mathbf{x}, t), \theta_c(t); \varepsilon) \\ := \varphi(1 - \varphi)(h^2(\xi)(\varphi - 1/2) + \varepsilon a(S[\varphi](t), u)), \end{aligned} \quad (6)$$

ただし

$$\xi = \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta_c & \sin \theta_c \\ -\sin \theta_c & \cos \theta_c \end{pmatrix} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_c) \quad (7)$$

であり、 $h(\xi)$ は $h(\xi) \neq 0$ を満たす関数である。また、 $a(S[\varphi](t), u)$ は次のように定めている：

$$a(S[\varphi](t), u) := \gamma(u) + S[\varphi](t), \quad (8)$$

$$\begin{cases} \gamma(u) := \frac{\gamma_0}{1 + (u/u_0)^2} + \gamma_1, \\ S[\varphi](t) := \alpha \left(\int_{\Omega} G(\varphi(\mathbf{x}, 0)) d\mathbf{x} - \int_{\Omega} G(\varphi(\mathbf{x}, t)) d\mathbf{x} \right). \end{cases} \quad (9)$$

ただし、 $G(\varphi) = \varphi^2(3 - 2\varphi)$ である。 $\gamma(u)$ は水に対する表面張力を表しており、 $S[\varphi](t)$ は正のパラメータ α が十分大きな場合に成り立つ、初期の体積を保存するための項である。

(1) モデル (5) の導出

モデル (5) は L^2 勾配流の方法によって導出することが可能である。次のようにエネルギー汎関数を定める：

$$E(\varphi) := E_g(\varphi) + E_d(\varphi) + E_p(\varphi) + E_s(\varphi), \quad (10)$$

$$\begin{cases} E_g(\varphi) := \int_{\Omega} \frac{\varepsilon \sigma^2}{2} |\varphi(\mathbf{x}, t)|^2 d\mathbf{x}, \\ E_d(\varphi) := \int_{\Omega} h^2(\mathbf{x}) \frac{W(\varphi)}{\varepsilon} d\mathbf{x}, \\ E_p(\varphi) := \frac{\alpha}{12} \left(\int_{\Omega} G(\varphi(\mathbf{x}, 0)) d\mathbf{x} - \int_{\Omega} G(\varphi(\mathbf{x}, t)) d\mathbf{x} \right)^2, \\ E_s(\varphi) := \frac{1}{6} \int_{\Omega} (1 - G(\varphi)) \gamma(\mathbf{x}) d\mathbf{x}. \end{cases} \quad (11)$$

ただし、 $W(\varphi) = \varphi^2(1 - \varphi)^2/4$ である。 E_g は勾配からの寄与に関するエネルギー、 E_d は $\varphi = 0, 1$ を安定に保つために必要なダブルウェルポテンシャル、 E_p は初期の体積を保存するためのエネルギー、 E_s は水面において表面張力から得られるエネルギーである。定めたエネルギー汎関数 (10) に対して第一変分を計算すると次のようになる：

$$\begin{aligned} & \frac{d}{d\eta} E(\varphi + \eta\psi) \Big|_{\eta=0} \\ &= - \int_{\Omega} \left\{ \varepsilon \sigma^2 \Delta \varphi + \frac{1}{\varepsilon} h^2(\mathbf{x}) \varphi(1 - \varphi)(\varphi - 1/2) \right. \\ & \quad \left. + \alpha \left(\int_{\Omega} G(\varphi(\mathbf{x}, 0)) d\mathbf{x} - \int_{\Omega} G(\varphi(\mathbf{x}, t)) d\mathbf{x} \right) \varphi(1 - \varphi) \right. \\ & \quad \left. + \gamma(\mathbf{x}) \varphi(1 - \varphi) \right\} \psi d\mathbf{x} \\ &=: - \int_{\Omega} \frac{\delta E}{\delta \varphi} \psi d\mathbf{x}. \end{aligned} \quad (12)$$

ここで $\varepsilon \tau \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \frac{\delta E}{\delta \varphi}$ とおくと

$$\frac{dE}{dt} = - \int_{\Omega} \frac{\delta E}{\delta \varphi} \frac{\partial \varphi}{\partial t} d\mathbf{x} = -\varepsilon \tau \int_{\Omega} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial t} \right)^2 d\mathbf{x} \leq 0$$

が成り立つ。したがって、エネルギーが時間に関して単調減少するように方程式を与えることができる。そ

の後、関数 h と γ の変数をそれぞれ回転座標系 ξ と界面活性剤分子濃度 $u(\mathbf{x}, t)$ に変換することでモデル (5) の第一式が得られる。

モデル (5) の第三式について、まずは次のように回転角 θ_c に関する運動方程式を与える：

$$I \frac{d^2 \theta_c}{dt^2} = -\mu \frac{d\theta_c}{dt} + \int_{\Gamma(t)} \gamma(u)(\mathbf{x} - \mathbf{x}_c) \times \mathbf{v} d\ell. \quad (13)$$

ただし、 $\Gamma(t)$ は自己駆動体の境界を表している。すなわち

$$\Gamma(t) := \{ \mathbf{x} \in \Omega \mid \varphi(\mathbf{x}, t) = 1/2 \}$$

である。また、 \mathbf{v} は $\Gamma(t)$ の外向き単位法線ベクトル、 $d\ell$ は線素、 I は慣性モーメント、 μ は回転に関する粘性抵抗である。ここで、 $\mathbf{v} = (v_1, v_2)^T$ と表し、 $\mathbf{r} = (r_1, r_2)^T = \mathbf{x} - \mathbf{x}_c$ とおく。このとき、(13) 式の積分内の演算 $\mathbf{r} \times \mathbf{v}$ は

$$\mathbf{r} \times \mathbf{v} = r_1 v_2 - r_2 v_1 = \begin{pmatrix} -r_2 \\ r_1 \end{pmatrix} \cdot \mathbf{v} =: \mathbf{s} \cdot \mathbf{v}$$

と変形できるので、発散定理を用いることで

$$\begin{aligned} \int_{\Gamma(t)} \gamma(u) \mathbf{r} \times \mathbf{v} d\ell &= \int_{\Gamma(t)} \gamma(u) \mathbf{s} \cdot \mathbf{v} d\ell \\ &= \int_{\Omega^{\text{in}}(t)} \nabla \cdot (\gamma(u) \mathbf{s}) d\mathbf{x} \\ &= \int_{\Omega^{\text{in}}(t)} \nabla \gamma(u) \cdot \mathbf{s} d\mathbf{x} \\ &= \int_{\Omega^{\text{in}}(t)} \mathbf{r} \times \nabla \gamma(u) d\mathbf{x} \end{aligned} \quad (14)$$

と変形することができる。ただし、 $\Omega^{\text{in}}(t)$ は自己駆動体内部領域を表している。すなわち

$$\Omega^{\text{in}}(t) := \{ \mathbf{x} \in \Omega \mid 1/2 \leq \varphi(\mathbf{x}, t) \leq 1 \}$$

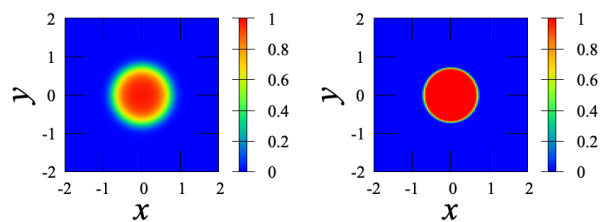
である。(14) 式を (13) 式に代入し慣性項を無視することで

$$\mu \frac{d\theta_c}{dt} = \int_{\Omega^{\text{in}}(t)} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_c) \times \nabla \gamma(u) d\mathbf{x} \quad (15)$$

を得る。さらに、 ε が十分小さな正の数である場合、 $\varphi \approx 0$ または $\varphi \approx 1$ を満たし、 $0 < \varphi < 1$ を満たす領域は十分小さくなる (図-1)。したがって、(15) 式の積分内に φ を挿入することで、近似的に積分領域を Ω 全体に拡張することができる：

$$\mu \frac{d\theta_c}{dt} = \int_{\Omega} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_c) \times \varphi(\mathbf{x}, t) \nabla \gamma(u) d\mathbf{x}.$$

以上より、モデル (5) の第三式を導出することができる。



(a) ε が大きい場合

(b) ε が小さい場合

図-1: ε の値の大きさに応じた遷移層の厚み

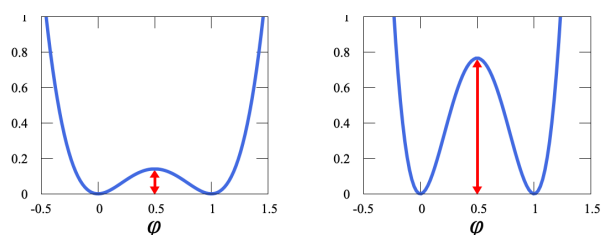
(2) 物体形状の表現方法

先行研究で提案されたモデル [6] をベースにモデル (5) を構築した。元々提案されていたモデルとの変更点は大きく 3 つ存在する。それは回転運動の式を導入したこと、関数 $G(\varphi)$ を導入しモデル (5) を L^2 勾配流による方法で導出できるようにしたこと、物体形状を表現するために関数 h を導入したことである。関数 h を導入するというアイディアは [7] から得られたが、ここではそのメカニズムを紹介する。

関数 h は前節で構築したエネルギー E_d の中で、次のようにして導入された：

$$E_d(\varphi) = \int_{\Omega} h^2(\mathbf{x}) \frac{W(\varphi)}{\varepsilon} d\mathbf{x}.$$

ただし、 $W(\varphi) = \varphi^2(1 - \varphi)^2/4$ である。 $W(\varphi)$ のグラフはよく知られている通り、 $\varphi = 0, 1$ で底、 $\varphi = 1/2$ で山を持つような概形をしている。このとき、 $h \times W(\varphi)$ というグラフは、 h の値の大きさによって $\varphi = 0$ と $\varphi = 1$ を遷移するためのエネルギー的な障壁の高さが変動する (図-2)。さらに、 h の変数を回転座標系 ξ にすることで、自己駆動体の運動に付随するように h を動かすことができる。以上のようなメカニズムで、運動する物体の形状を表現することを可能としている。関数 $h(\xi)$ の具体例は図-3 に載せた。



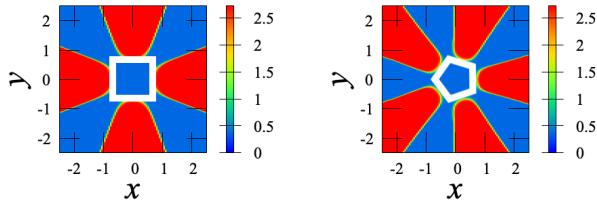
(a) h の値が小さい場合

(b) h の値が大きい場合

図-2: $h^2(\mathbf{x}) \times W(\varphi)$ のグラフ。赤い矢印が $\varphi = 0$ と $\varphi = 1$ の間を移り合うための障壁の高さに該当する

3. 界面モデル

モデル (5) は $\varphi = 0$ と $\varphi = 1$ の間に遷移層と呼ばれる、 φ の値が急激に変化する領域が現れる。遷移層を持つ反応拡散方程式に対して、特異極限法という $\varphi = 0, 1$ を隔てる境界が満たす運動方程式 (界面方程式) を導



(a) 正方形形状

(b) 正五角形形状

図-3: 関数 h の具体例. 白線は自己駆動体と水面の境界 $\Gamma(t)$ を表している. $h(\xi_1, \xi_2) = \exp(p \tanh(h_0(\xi_1, \xi_2) + qh_1(\xi_1, \xi_2)))$ ($p, q > 0$) で定義された関数であり, $h_0(\xi_1, \xi_2) = 5(\xi_1^2/a^2 + \xi_2^2/b^2 - 1)$ ($a, b > 0$), (a) $h_1(\xi_1, \xi_2) = \xi_1^4 - 6\xi_1^2\xi_2^2 + \xi_2^4$, (b) $h_1(\xi_1, \xi_2) = \xi_1^5 - 10\xi_1^3\xi_2^2 + 5\xi_1\xi_2^4$ である

出する方法が存在する. それをモデル (5) の第一式に適用することで, 次の界面モデルを得ることができる:

$$\begin{cases} \tau V = -\sigma^2 \left(\kappa + \frac{\partial}{\partial \nu} \log h(\xi_0) \right) \\ \quad + \frac{\sqrt{2}\sigma}{h(\xi_0)} \left(\gamma(u) + \alpha (|\Omega^{\text{in}}(0)| - |\Omega^{\text{in}}(t)|) \right), \\ \frac{\partial u}{\partial t} = d_u \Delta u - (k_1 + k_2)u + k_3 s_0 F(\mathbf{x}, \Omega^{\text{in}}(t)), \\ \mu \frac{d\theta_c}{dt} = \int_{\Omega^{\text{in}}(t)} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_c) \times \nabla \gamma(u) d\mathbf{x}. \end{cases} \quad (16)$$

ただし, $\varepsilon \downarrow 0$ の極限によって

$$\lim_{\varepsilon \downarrow 0} \varphi(\mathbf{x}, t; \varepsilon) = \begin{cases} 1 & (\mathbf{x} \in \Omega^{\text{in}}(t)), \\ 0 & (\mathbf{x} \in \Omega^{\text{out}}(t)) \end{cases} \quad (t \geq 0)$$

を満たすものと仮定し, $h(\xi)$ は少なくとも C^1 級の関数であると仮定した. ここで, $\Omega^{\text{out}}(t)$ は水面の領域を表している. すなわち

$$\Omega^{\text{out}}(t) := \{ \mathbf{x} \in \Omega \mid 0 \leq \varphi(\mathbf{x}, t) < 1/2 \}$$

である. また, κ, V, ν はそれぞれ $\Gamma(t)$ における曲率, 法線速度, 外向き単位法線ベクトルを表しており, $\partial/\partial \nu$ は法線方向微分を表している. $\mathbf{x}_0 \in \Gamma(t)$ であり

$$\begin{aligned} \xi_0 &= \begin{pmatrix} \cos \theta_c & \sin \theta_c \\ -\sin \theta_c & \cos \theta_c \end{pmatrix} (\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}_c), \\ F(\mathbf{x}, \Omega^{\text{in}}(t)) &:= \begin{cases} 1 & (\mathbf{x} \in \Omega^{\text{in}}(t)), \\ 0 & (\mathbf{x} \in \Omega^{\text{out}}(t)), \end{cases} \\ |\Omega^{\text{in}}(t)| &:= \int_{\Omega^{\text{in}}(t)} d\mathbf{x} \quad (t \geq 0) \end{aligned}$$

と定めている.

4. 数値計算結果

(1) 反応拡散モデルの場合

モデル (5) に対して数値計算を行なった結果を紹介する. 図-4(a) は楕円形状自己駆動体の並進運動解を, 図-4(b) はそれに付随する関数 $h(\xi)$ の様子を示している.

[2] によれば, 楕円形状の物体は短軸方向への並進運動が生じやすいことが知られており, 本モデルにおいてもその様子を確認することができている. ただし, 楕円形状を表現するための関数として

$$h(\xi_1, \xi_2) = \exp(p \tanh(h_0(\xi_1, \xi_2) + qh_1(\xi_1, \xi_2))), \quad (17)$$

$$\begin{cases} h_0(\xi_1, \xi_2) = 5 \left(\frac{\xi_1^2}{a^2} + \frac{\xi_2^2}{b^2} - 1 \right), \\ h_1(\xi_1, \xi_2) = \xi_1^2 - \xi_2^2 \end{cases} \quad (18)$$

を用いている. ただし, a, b, p, q は全て正のパラメータである.

さらに, (17) 式の中にあるパラメータ q の値を調整すると, 図-5(a) のようなダンベル形状自己駆動体の並進運動解を得ることもできる. 図-5(b) はそれに付随する関数 h の様子である. また, (18) 内の関数 h_1 を

$$h_1(\xi_1, \xi_2) = \xi_1^3 - 3\xi_1\xi_2^2 \quad (19)$$

に変更することで, 三角形形状自己駆動体の運動も表現が可能である (図-6).

(2) 界面モデルの場合

モデル (16) に対しても数値計算を行った. ただし, 用いた関数 h は (17) 式である. 特に, (18) 式を用いることで楕円形状自己駆動体とダンベル形状自己駆動体の並進運動解を得ることができる (図-8). また, $h_1(\xi_1, \xi_2)$ として (19) 式を用いることで三角形形状自己駆動体の運動も得ることができる (図-9).

5. まとめ

[6] で提案された体積保存型の Allen-Cahn 方程式をもとに, 物体形状が変化しないタイプの自己駆動系のモデルを提案した. 本モデルでは自己駆動体の重心を原点とした回転座標系によって記述される関数 $h(\xi)$ を導入したことにより, 楕円やダンベル, 三角形といった様々な形状を表現することを可能にした. また, [6] で提案された体積保存型の Allen-Cahn 方程式を用いたモデルは L^2 勾配流による方法で導出することができていなかったが, 関数 $G(\varphi)$ を導入することでそれを可能にした. さらに, Allen-Cahn 方程式に対して特異極限を取ることで界面方程式を導出し, 界面方程式によるモデルも構築した. 双方のモデルで数値計算を行った結果, 楕円形状とダンベル形状, また三角形形状自己駆動体の運動を再現することができた.

謝辞: 本研究は科学研究費補助金 (JP23K20808, JP22K03425, JP23H00086, JP23K20815, JP20H02712, JP21H00996, JP24K22324, JP23K03180, JP23H00085, JP24K00531) および, 「物質・デバイス領域共同研究拠点」の共同研究プログラム (No. 20244003, 20254003, 20241009) の助成を受けたものです. また, 本研究は京都大学数理解析研究所国際共同利用・共同研究拠点の支援を受けて行われました.

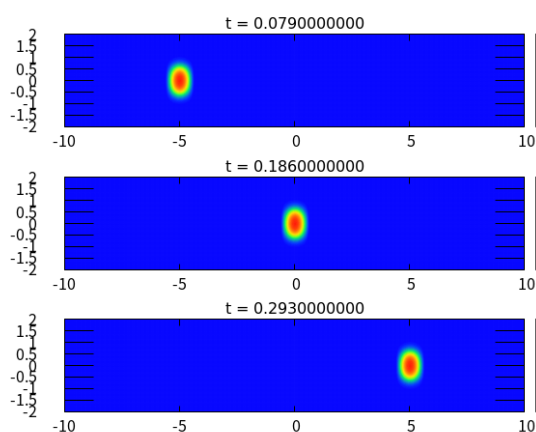
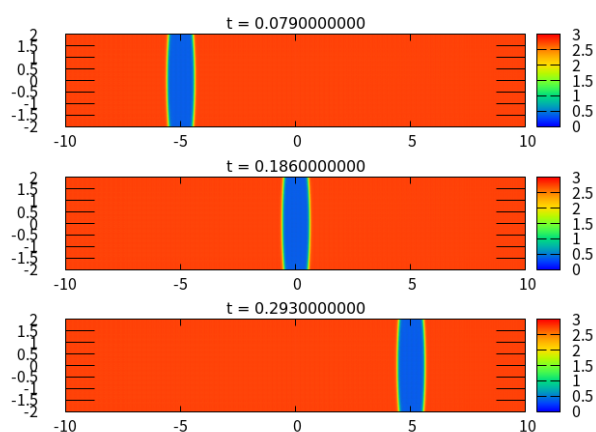
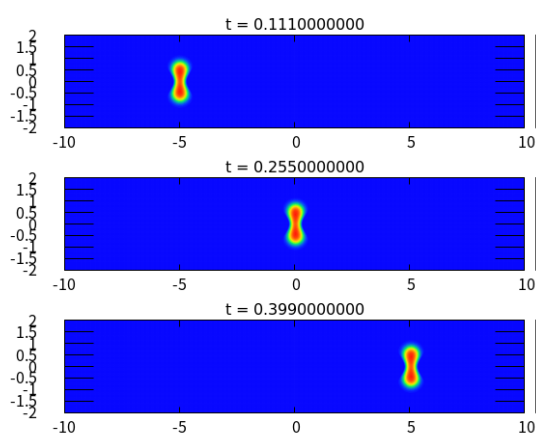
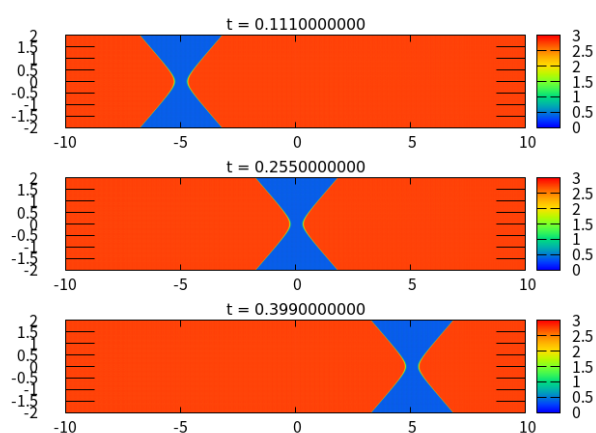
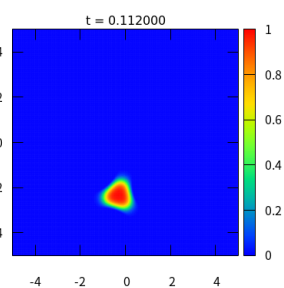
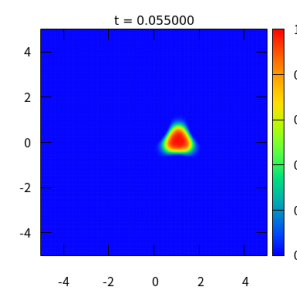
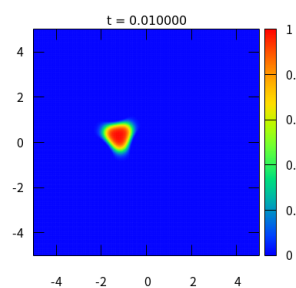
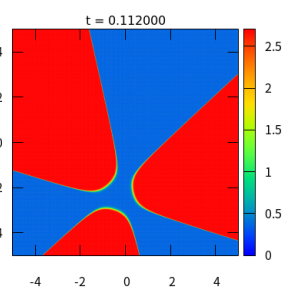
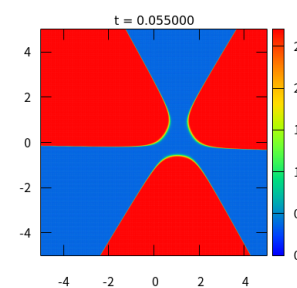
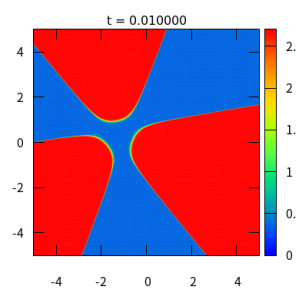
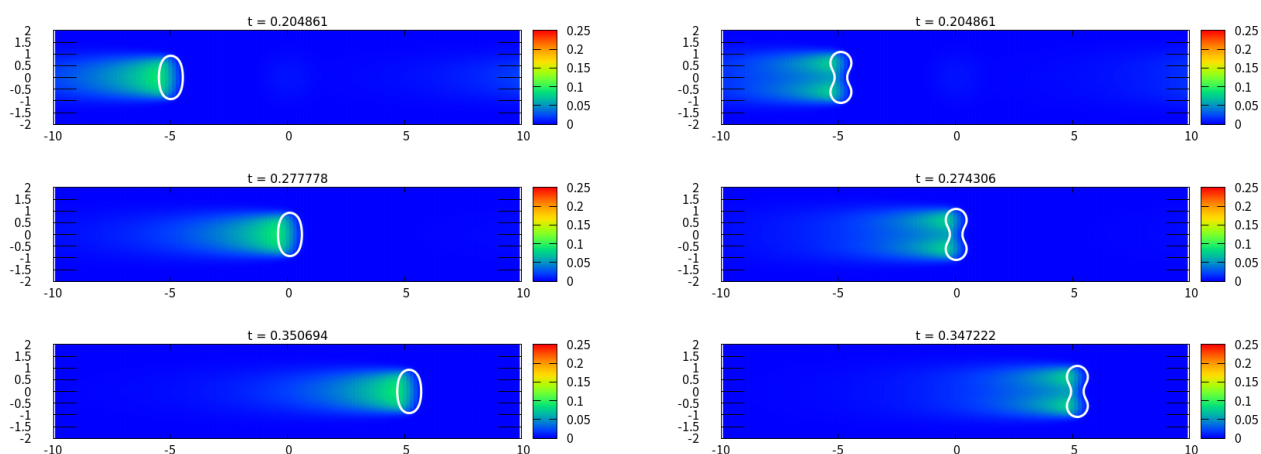
(a) φ の時間発展の様子(b) (a) に付随する関数 h の様子図-4: 楕円形状自己駆動体の短軸方向並進運動解. パラメータは $a = b = 0.8, p = 1, q = 7.5$ (a) φ の時間発展の様子(b) (a) に付随する関数 h の様子図-5: ダンベル形状自己駆動体の短軸方向並進運動解. パラメータは $a = b = 0.8, p = 1, q = 40$ 

図-6: 三角形形状自己駆動体の回転運動解

図-7: 図-6 に付随する関数 h の様子. パラメータは $a = b = 0.8, p = 1, q = 7.5$



(a) 楕円形状自己駆動体の短軸方向並進運動解

(b) ダンベル形状自己駆動体の短軸方向並進運動解

図-8: 界面モデル (16) の計算結果. ただし, ヒートマップは界面活性剤分子濃度を表している

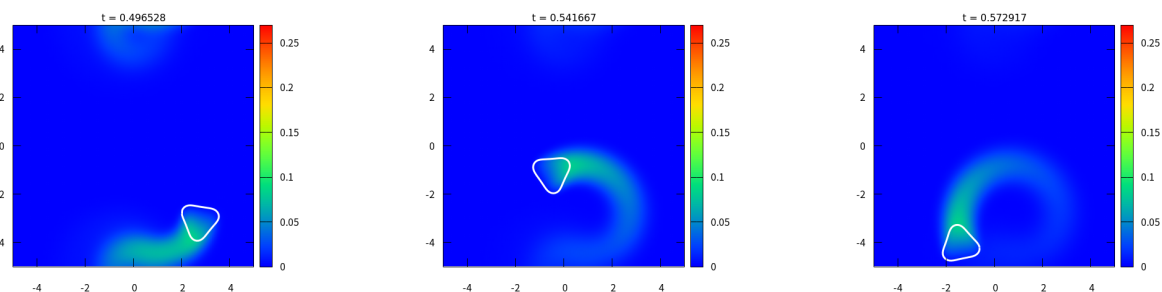


図-9: 界面モデル (16) の計算結果. ただし, ヒートマップは界面活性剤分子濃度を表している

参考文献

- [1] M. Nagayama, S. Nakata, Y. Doi, and Y. Hayashima, *A theoretical and experimental study on the unidirectional motion of a camphor disk*, Physica D 194 (2004) 151–165
- [2] K. Iida, H. Kitahata, and M. Nagayama, *Theoretical study on the translation and rotation of an elliptic camphor particle*, Physica D 272 (2014) 39–50
- [3] K. Nishi, K. Wakai, T. Ueda, M. Yoshii, Y. S. Ikura, H. Nishimori, S. Nakata, and M. Nagayama, *Bifurcation phenomena of two self-propelled camphor disks on an annular field depending on system length*, Phys. Rev. E 92, 022910 (2015)
- [4] U. Thiele, K. John, and M. Bär, *Dynamical Model for Chemically Driven Running Droplets*, Phys. Rev. Lett. 93 (2004) 027802
- [5] K. H. Nagai, K. Tachibana, Y. Tobe, M. Kazama, H. Kitahata, S. Omata, and M. Nagayama, *Mathematical model for self-propelled droplets driven by interfacial tension*, J. Chem. Phys. 144, 114707 (2016)
- [6] M. Nagayama, H. Monobe, K. Sakakibara, K.-I. Nakamura, Y. Kobayashi, and H. Kitahata, *On the reaction–diffusion type modelling of the self-propelled object motion*, Sci. Rep. 13, 12633 (2023)
- [7] M. Akiyama, M. Nonomura, A. Tero, and R. Kobayashi, *Numerical study on spindle positioning using phase field method*, Phys. Biol. 16, 016005 (2019)
- [8] M. Nonomura, *Study on Multicellular Systems Using a Phase Field Model*, PLoS ONE 7, e33501 (2012)
- [9] K.-I. Nakamura, H. Matano, D. Hilhorst, and R. Schätzle, *Singular Limit of a Reaction-Diffusion Equation with a Spatially Inhomogeneous Reaction Term*, J. Statistical Physics 95(5/6)1165–1185 (1999)