有限領域に閉じ込められた樟脳粒の自己駆動運動

小谷野由紀

千葉大学大学院 理学研究院 物理学研究部門

概要

水面に樟脳粒を浮かべると、樟脳粒の自己駆動運動が見られる。この樟脳-水系では、様々な水面形状及び粒子形状を実現することができ、自己駆動系の実験系として幅広く研究されてきた。本稿では、2次元の円形領域に樟脳粒を閉じ込めたときの樟脳粒の運動について、数理モデルを少数自由度の力学形に縮約し、分岐解析を行った結果を紹介する。

Self-propelled motion of a camphor particle confined in a finite region

Yuki Koyano

Department of Physics, Graduate School of Science, Chiba University

Abstract

A camphor-water system is known as a system where a camphor particle exhibits self-propulsion on water surface. The camphor-water system is useful for investigating the self-propelled motion, because various shapes of the camphor particle and various geometries of the water chamber can be realized. In the present paper, motions of a camphor particle confined in a two-dimensional circular region are discussed. We reduced a mathematical model and performed bifurcation analysis.

1 はじめに

自由エネルギーを運動エネルギーへ変換し、自発的に運動する粒子は自己駆動粒子と呼ばれる。水面に浮かべた樟脳粒は水面の表面張力を変化させることで自己駆動することが知られており[1]、物理化学的な駆動メカニズムを持つ自己駆動系の一例である。樟脳粒は樟脳分子を水面に拡散し、水面に樟脳分子濃度場を形成する。樟脳分子は界面活性剤としてはたらくため表面張力が空間的に不均一となり、樟脳粒は表面張力場の異方性に従って動く。樟脳分子の拡散ダイナミクスは反応拡散系と捉えることができ[2]、これまで様々な研究がなされてきた[3,4]。

物理化学的な系は、日常にみられる自己駆動系よ りシンプルであることが多く、自己駆動運動のメカ ニズムについてその素過程が理解しやすい利点や、 制御しやすく理想的な条件を整えやすい利点がある。 細胞や魚といった生物や、自動車などの社会活動に 見られる流れなど日常に見られる現象が自己駆動系 として研究される中で、人工的に作製された物理化 学的な系を研究する意義は、まさにそのシンプルさ にあると考える。筆者はこれまで、自発的に系の対 称性が破れることで現れる自己駆動運動について数 理モデルと実験の両側面から研究を行ってきた。具 体的な実験系として物理化学系である樟脳-水系を用 いることで、数理解析と対応させた物理パラメータ の変更が容易になる。

自己駆動系における対称性の破れは、力学系の分 岐構造で説明することができる。力学系は系の持つ 対称性を引き継ぐため、分岐構造も系の対称性と強 く関わりがある。筆者はこれまで、反転対称性のあ る1次元有限区間や、反転対称性・回転対称性のある2次元円形領域に閉じ込められた樟脳粒の運動について解析を行ってきた[5,6]。本稿では、反転対称性・回転対称性のある空間2次元系における自己駆動粒子の運動について述べる。まず、系の対称性から考えられる一般的なモデル力学系を構築し、系の中心に静止する状態から運動状態への分岐を調べた結果を述べる[7]。次に、具体的な系として、円形領域に閉じ込めた樟脳粒の運動について述べる[6]。

2 反転対称性・回転対称性のある空間2次元系内の自己駆動粒子

これまでの研究では、並進対称性のある系では並 進運動 [2, 8] が、反転対称性のある空間 1 次元系で は系の中心周りで往復運動 [5] が見られることが明 らかとなっている。しかし、反転対称性と回転対称 性のある 2 次元系では、回転運動・振動運動など複 数の候補が考えられ、どの運動が安定に現れるか自 明でない。 2 次元空間内の自己駆動粒子の運動を記 述する一般的なモデル力学系を構築し分岐解析を行 うことで、回転解と振動解の存在条件と線形安定性 条件を調べる。

2.1 モデル力学系

自己駆動粒子の位置を $x = {}^{t}(x_1, x_2)$, 速度を $v = {}^{t}(v_1, v_2)$ とする。重心位置の変化を運動方程式で表すこととする。このとき駆動力が反転対称性と回転対称性を満たすとする。反転対称性は軸の符号反転に対して力学系が不変になること、回転対称性とは原点を中心として軸を回転させたときに力学系が不変になることを指す。また、原点近傍での運動でかつ速度が十分に遅いという条件を課すこととする。以上の仮定のもと、自己駆動粒子の重心の運動方程式を求めると、

$$\begin{cases} \dot{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{v} & (1a) \\ \dot{\boldsymbol{v}} = -\boldsymbol{x} + b\boldsymbol{v} + c|\boldsymbol{x}|^2\boldsymbol{x} + k|\boldsymbol{v}|^2\boldsymbol{v} + h|\boldsymbol{v}|^2\boldsymbol{x} \\ + n|\boldsymbol{x}|^2\boldsymbol{v} + j(\boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{v})\boldsymbol{x} + p(\boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{v})\boldsymbol{v} & (1b) \end{cases}$$

となる。ここで、原点での静止状態が不安定化したときに、 $\lim_{t\to\infty}|r|=\infty$ とならない軌道を考えたいため、調和ポテンシャル中に閉じ込められた自己駆動粒子であることを仮定し、単振動のタイムスケールを 1 ととった。

2.2 弱非線形解析

弱非線形解析を行う。単振動を引き起こす項を主要項として、振動のタイムスケール t と振幅や振動数の変化のタイムスケール $T=\varepsilon t\ (0<\varepsilon\ll 1)$ を分離する。ここで、 $x={}^{\rm t}(x_1,x_2)$ を次のようにおく。

$$\begin{cases} x_1 = r_1(T)\cos(t + \phi_1(T)) & (2a) \\ x_2 = r_2(T)\cos(t + \phi_2(T)) & (2b) \end{cases}$$

これは、単振動の振幅と位相が主要項以外の摂動項によって単振動よりも十分遅いタイムスケールで変化することを表している。式 (2) を式 (1) に代入し、 ε の次数ごとに式を分離する。このとき、力学系の非線形項を ε オーダーとする。 ε の 1 次のオーダーの式を求めると、振幅 r_1 , r_2 と位相 $\phi = \phi_1 - \phi_2$, $\phi_+ = \phi_1 + \phi_2$ についての式を得る:

$$\frac{dr_1}{dt} = \mu r_1 + \alpha r_1^3 + (\beta + \delta \cos 2\phi + \eta \sin 2\phi) r_1 r_2^2,$$
(3)

$$\frac{dr_2}{dt} = \mu r_2 + \alpha r_2^3 + (\beta + \delta \cos 2\phi - \eta \sin 2\phi) r_1^2 r_2,$$
(4)

$$\frac{d\phi}{dt} = \eta(r_1^2 - r_2^2)(1 - \cos 2\phi) - \delta(r_1^2 + r_2^2)\sin 2\phi,$$
(5)

$$\frac{d\phi_{+}}{dt} = (\zeta + \eta \cos 2\phi)(r_1^2 + r_2^2) + \delta(r_1^2 - r_2^2)\sin 2\phi.$$
 (6)

ここで、 $\mu=b/2$, $\alpha=(3k+n+j)/8$, $\beta=(k+n)/4$, $\delta=(k-n+j)/8$, $\eta=-(c-h+p)/8$, $\zeta=-(5c+3h+p)/8$ とおいた。 $r_1,\,r_2,\,\phi$, ϕ_+ それぞれの時間発展方程式の右辺には $r_1,\,r_2,\,\phi$ だけが表れるので、この 4 変数の力学系は本質的に 3 変数の力学系であり、以降では 3 変数 (r_1,r_2,ϕ) の力学系として議論する。

2.3 回転運動/振動運動の存在条件と線形 安定性

3変数 (r_1, r_2, ϕ) の力学系において、 $r_1 = 0, r_2 = 0$ の周りで線形安定性解析を行うと、 $\mu = 0$ (b/2 = 0) でダブルホップ分岐が起きることがわかる。ここで、振幅がゼロ $(r_1 = r_2 = 0)$ のとき、位相 ϕ は定義できないことを使った。

次に、安定な回転運動と振動運動が存在する条件 を求める。ここでは、スーパークリティカルダブル ホップ分岐を通じて生じる微小半径の回転運動、微小 振幅の振動運動について考える。ここで、回転運動は x_1 - x_2 平面において原点を中心とする円軌道を等速で動く運動、振動運動は x_1 - x_2 平面において原点を中心位置とする振動運動とし、それぞれに対応する解を回転解、振動解と呼ぶこととする。3 変数 (r_1, r_2, ϕ) の力学系において、回転解・振動解はそれぞれ、固定点(平衡点) $(r_{\text{rot}}, r_{\text{rot}}, \pm \pi/2)$, $(r_{\text{osc}}\cos\psi, r_{\text{osc}}\sin\psi, 0)$ として表現できる。ただし、 r_{rot} , r_{osc} は力学系(3)-(5) から決まる正の定数、 ψ は任意の定数である。 r_{rot} , r_{osc} の存在条件や、固定点の線形安定性を調べると、以下の安定な回転解、振動解の存在に必要な条件が得られる。安定な回転解の存在条件は、

$$\begin{cases} k+n < 0, & (7a) \\ k-n+j < 0, & (7b) \end{cases}$$

安定な振動解の存在条件は、

$$\begin{cases} 3k + n + j < 0, & (8a) \\ k - n + j > 0, & (8b) \end{cases}$$

となる。以上の条件式 (7) と (8) には、モデル力学系 (1) に含まれていたパラメータ (2) に含まれない。これは、(2) に含まれない。これは、(2) に合まれない。これは、(2) が全て (2) のとき、保存量が存在することと対応すると考えられる。また、(2) のオーダーでは安定な回転解・振動解が共存するパラメータ領域は存在しないこともわかる。

3 円形領域に閉じ込められた樟脳 粒の運動

前節で得られた結果は、系の対称性のみを仮定して得られた結果である。本節では現実の自己駆動系に適用する。ここでは、円形形状の水面に閉じ込められた樟脳粒を考える。

3.1 数理モデル

図 1 に示すように、半径 R の 2 次元円形の水面に樟脳粒を閉じ込めた系を考える。樟脳粒の運動に関する数理モデルは樟脳粒の位置の時間発展を記述する 2 階常微分方程式と、水面の樟脳分子濃度の時間発展を記述する偏微分方程式からなる [2]。ここでは無次元化によって含まれるパラメータの個数を最小にしたモデルを紹介する。 2 次元極座標における樟脳粒の重心位置 $\rho=(\rho(t),\phi(t))$ の時間発展方程式は、

$$\sigma \frac{d^2 \boldsymbol{\rho}}{dt^2} = -\xi \frac{d\boldsymbol{\rho}}{dt} + \boldsymbol{F} \tag{9}$$

と与える。パラメータ σ と ξ は樟脳粒の単位面積あたりの質量および水面をすべるときの抵抗係数である。ここで、表面張力由来の駆動力 $\mathbf{F} = \mathbf{F}(c; \boldsymbol{\rho})$ は樟脳粒の周囲にかかる表面張力を線積分で足しあわせる:

$$F = \lim_{\epsilon \to +0} \frac{1}{S} \int_{\partial \Omega} \gamma \left(c(\boldsymbol{\rho} + \epsilon \boldsymbol{n}) \right) \boldsymbol{n} d\ell.$$
 (10)

ここで、n は樟脳粒の周囲 $\partial\Omega$ での法線ベクトルであり、S は樟脳粒が水面と接する面積である。一方、樟脳分子の濃度場 c=c(r,t) の時間発展方程式は、

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial \theta^2}\right)c - c + f \qquad (11)$$

と与える。ここで円形領域の任意の位置を $\mathbf{r}=(r,\theta)$ と表し、樟脳粒からの供給を f と定義した:

$$f(\mathbf{r}; \boldsymbol{\rho}) = \delta(\mathbf{r} - \boldsymbol{\rho}). \tag{12}$$

但し、 $\delta(\cdot)$ はディラックのデルタ関数を表す。また、式 (11) にはノイマン境界条件を課す。

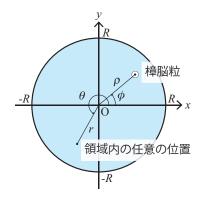


図 1: 系の概略図。粒子の重心位置と、領域内の任意の点を 2 次元極座標でそれぞれ、 $\boldsymbol{\rho}=(\rho,\phi)$, $\boldsymbol{r}=(r,\theta)$ と表現する。

3.2 濃度場の縮約

時に 樟脳粒を円形領域の中心位置に固定すると、水面 上に系の中心に関して軸対称な定常濃度場が形成される。このときの定常濃度場は駆動力を生じないが、 樟脳粒の位置をずらす、速度を与えるなどの摂動を が、 横脳粒の位置をずらす、速度を与えるなどの摂動を が、 横脳粒の位置をずらす、速度を与えるなどの摂動を が、 横脳粒ので置きが非対称になり駆動力を生む。そこ で、 樟脳粒の系の中心からのずれや、速度、加速度 は十分に小さいとして、濃度場を定常濃度場周りで 展開し、駆動力を計算する。そのようにして得られ (9) た駆動力は樟脳粒の位置や速度、加速度の関数とな るので、式 (9) に代入することで樟脳粒の位置と速度についての力学系を得る。

まず、境界条件を満たす濃度場の解を構築するた めに、波数展開を行う。2次元極座標において、動 径方向は第1種ベッセル関数で、角度方向は三角関 数で展開する。ここで、動径方向は濃度場の境界条 件を満たす基底のみで展開する。波数空間に移行す ると、グリーン関数 $g_{mn}(t)$ を容易に求めることが できる。ここで、m, n は動径、角度方向の波数で ある。グリーン関数を用いると、任意の樟脳分子濃 度場はその時間積分として得ることができる。樟脳 分子濃度場は供給元である樟脳粒の軌道に依存する が、現在の濃度場に大きく寄与するのは現在時刻の 近傍の軌道である。そこで時間について濃度場の展 開を行うと、現在の位置、速度、加速度などの軌道 の時間微分を用いて表現される濃度場を得る[9]。こ こで、時間微分の高次項は無視する。展開された濃 度場を実空間に戻して駆動力を計算すると、樟脳粒 の位置 ρ に関する 2 階の常微分方程式を得る:

$$\ddot{\boldsymbol{\rho}} = -\boldsymbol{\rho} + (B - \Xi)\dot{\boldsymbol{\rho}} + C|\boldsymbol{\rho}|^2\boldsymbol{\rho} + H|\dot{\boldsymbol{\rho}}|^2\boldsymbol{\rho} + J(\boldsymbol{\rho}\cdot\dot{\boldsymbol{\rho}})\boldsymbol{\rho} + K|\dot{\boldsymbol{\rho}}|^2\dot{\boldsymbol{\rho}} + N|\boldsymbol{\rho}|^2\dot{\boldsymbol{\rho}} + P(\boldsymbol{\rho}\cdot\dot{\boldsymbol{\rho}})\dot{\boldsymbol{\rho}}.$$
(13)

ここで、各項の係数 B, C, H, J, K, N, P は樟脳粒 が浮かべられた水面の半径 R と質量密度 σ の関数、 Ξ は σ の関数であり、解析的に求まる。

3.3 分岐解析

縮約方程式 (13) は、力学系 (1) と同様の関数形となっており、前節で得られた解析結果を適用することができる。まず、静止状態 $(\rho,\dot{\rho})=(0,0)$ まわりでの線形安定性解析により、 $B>\Xi$ のときにダブルホップ分岐を通じて静止状態が不安定化し、自発的な運動が生じることがわかった。また、条件式 (7), (8) が満たされるとき、スーパークリティカルダブルホップ分岐を通じて、微小半径の回転運動、微小振幅の振動運動が現れることが明らかとなっている。実際に条件式 (7), (8) が満たされるかどうか調べると、水面半径 R がある臨界水面半径 R_0 より小さいときに安定な回転運動の存在条件 (7) が満たされることがわかった。

4 まとめ

本稿では、自発的に対称性を破って動く自己駆動 粒子について、特に反転対称性と回転対称性のある 空間2次元空間内での運動について、対応する力学系とその分岐構造について解析した結果を示した。特に、静止状態が不安定化する分岐点近傍のみに着目して議論してきたが、2節で導入した力学系(1)をダブルホップ分岐の分岐点から離れたところで数値計算を行うと準周期的な軌道が得られることがわかっている[7]。準周期的な軌道の詳細な解析については、明治大学池田幸太准教授、宮路智行准教授、東北大学義永那津人准教授、千葉大学北畑裕之准教授と現在共同研究中である。

謝辞 2節の内容は、東北大学 義永那津人准教授、 千葉大学 北畑裕之准教授との共同研究 [7]、また、3 章の内容は、明治大学 末松 J. 信彦准教授、千葉大 学 北畑裕之准教授との共同研究 [6] に基づいて執筆 しています。本研究は物質・デバイス領域共同研究 拠点の共同研究プログラム(20181023)及び JSPS 科研費 JP17J05270 の助成を受けています。

参考文献

- S. Nakata, Y. Iguchi, S. Ose, M. Kuboyama,
 T. Ishii and K. Yoshikawa, Langmuir, 13, (1997), 4454.
- [2] M. Nagayama, S. Nakata, Y. Doi and Y. Hayashima, Physica D, 194, (2004), 151.
- [3] M. Mimura, T. Miyaji and I. Ohnishi, Hiroshima Math. J., 37, (2007), 343.
- [4] S-I. Ei, K. Ikeda, M. Nagayama and A. Tomoeda, Math. Bohem. 8, (2015), 847.
- [5] Y. Koyano, T. Sakurai and H. Kitahata, Phys. Rev. E, 94, (2016), 042215.
- [6] Y. Koyano, N. J. Suematsu, and H. Kitahata, arXiv, (2018) 1806.04961.
- [7] Y. Koyano, N. Yoshinaga and H. Kitahata, J. Chem. Phys., 143, (2015), 014117.
- [8] Y. Koyano, M. Gryciuk, P. Skrobanska, M. Malecki, Y. Sumino, H. Kitahata and J. Gorecki, Phys. Rev. E, 96, (2017), 012609.
- [9] T. Ohta, T. Ohkuma and K. Shitara, Phys. Rev. E, 80, (2009), 056203.