

油滴運動の数理モデルとその数値計算法

長山 雅晴 (金沢大学大学院自然科学研究科)

1 はじめに

等温系において化学エネルギーを力学的エネルギーに直接変換する問題は生命のエネルギー変換を理解する上で非常に重要なテーマとなっている。この問題に対するアプローチとして、実空間上でのモデル系を提出し、その解析を行うことは有効な手段と考えられており、そのモデル系として界面活性剤を使った実験系が知られている。その中の1つに水面上に浮かぶ界面活性粒子(樟脳)の運動がある。樟脳粒子は表面張力を変化させることによって水面上で自発的に運動することが知られており、固形樟脳のスイッチング現象、2隻の樟脳舟の引き込み現象、樟脳酸舟の間欠運動等が提示されている。このような実験系のほかに、界面活性剤水溶液(STAC溶液)中での油滴(ニトロベンゼン液滴)運動の実験がある。負に帯電したガラス基板を陽イオン性界面活性剤溶液の中に入れると、ガラス基板上に疎水基を水相に向けた界面活性剤(SAT⁺)が吸着し、基板表面は親油性となる。そのガラス基板上に油滴をおくと、油滴はガラス基板上のSAT⁺を油滴中に溶かしながらほぼ等速運動する現象が観察される。我々はこれらの現象を再現する数理モデルを提出し、数理解析を行うことによって現象の発生機構を明らかにしてきた。

本研究で扱う現象は水面上を動く油滴(ペンタノール)の運動である。この液滴の運動は液滴の大きさに依存して、並進運動や油滴の分裂・合体現象を起こすことに特徴がある。これまで扱ってきた数理モデル化では油滴の分裂や合体を再現することができない。そこで、我々は分裂や合体を再現できる油滴運動の数理モデルを構築し、その運動の数理的機構を明らかにすることが目的である。

2 数理モデル

水面上に展開されるペンタノール分子膜のモデル方程式を次のような反応拡散方程式によって与える：

$$\frac{\partial v}{\partial t} = d\Delta v - h(v) + g(u, v). \quad (1)$$

ただし、 $h(v)$ はペンタノールの昇華を表す関数であり、例えば、 $h(v) = k_1 v$ とする。 k_1 は単位時間当たりの昇華率を表す。また、 $g(u, v)$ はペンタノール液滴から分子膜が供給される効果で

$$g(u, v) = \begin{cases} k_2(v_0 - v)u, & u > 0, \\ 0, & u = 0 \end{cases} \quad (2)$$

とする。ただし、 k_2, v_0 はそれぞれ供給率、ペンタノール分子膜の飽和濃度を表す。次にペンタノール液滴の運動方程式を導出する。 $u(t, x)$ を時刻 t 、場所 x での油滴の高さ、 T を油滴と気相間の表面張力とする。このとき、油滴が変形したときの弾性エネルギー(表面の弾性エネルギー)¹は

$$U_1 = \int_{\Omega} (T\sqrt{1 + |\nabla u|^2}) dx \quad (3)$$

となる。図1から油滴界面が移動するときのエネルギーは

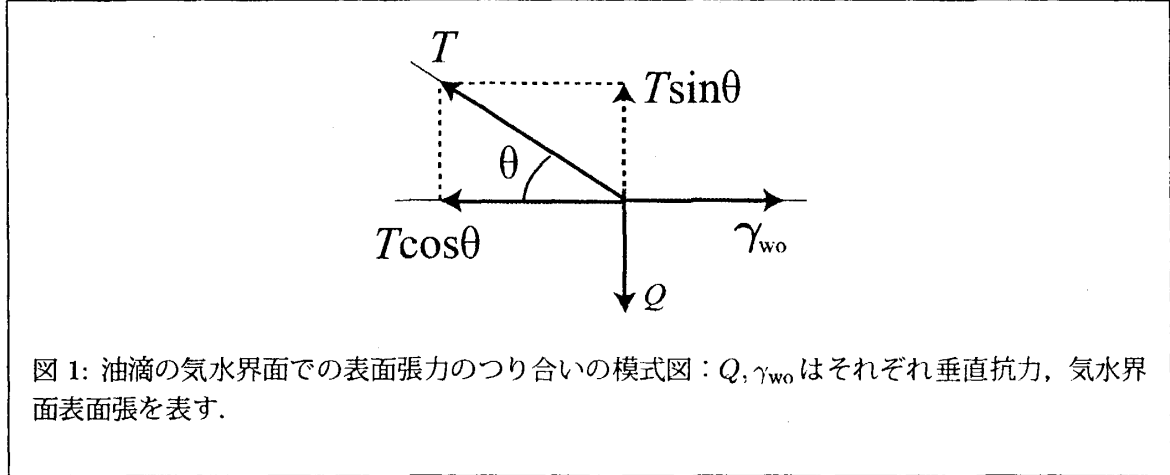
$$U_2 = \int_{\Omega} (\gamma_{wo}(v) - T \cos \theta) \chi_{u>0} dx = \int_{\Omega} \left(\gamma_{wo}(v) - T\sqrt{1 - (Q/T)^2} \right) \chi_{u>0} dx \quad (4)$$

¹本来ならば基準エネルギーとしてペンタノール分子膜のない気水界面の表面エネルギー $\gamma_{wo}(0)$ を弾性エネルギーから引かないといけない。

となる。ただし、

$$\chi_{u>0} = \begin{cases} 1, & u > 0, \\ 0, & u = 0. \end{cases} \quad (5)$$

である。また、油滴の運動エネルギーは



$$K = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \sigma \left(\frac{\partial u}{\partial t} \right)^2 \chi_{u>0} dx$$

となる。以上から次のラグランジアンを得る：

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(u) &= U_1 + U_2 - K \\ &= \int_{\Omega} \left(T \sqrt{1 + |\nabla u|^2} + (\gamma_{wo}(v) - T \sqrt{1 - (Q/T)^2}) \chi_{u>0} - \frac{\sigma}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial t} \right)^2 \chi_{u>0} \right) dx. \end{aligned}$$

また、液滴の膜の厚さが十分薄い (θ が十分小さい) と仮定することで次のようになる：

$$\mathcal{L}(u) = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \left(T |\nabla u|^2 + 2 \left(\gamma_{wo}(v) - T \left(1 - \frac{1}{2} \left(\frac{Q}{T} \right)^2 \right) \right) \chi_{u>0} - \sigma \left(\frac{\partial u}{\partial t} \right)^2 \chi_{u>0} \right) dx. \quad (6)$$

油滴の体積は実験においてほとんど変化しないことから、初期の油滴体積 V を保存する条件

$$V \equiv \int_{\Omega} u(0, x) dx = \int_{\Omega} u(t, x) dx \quad (7)$$

を課す。(6) から第一変分と inner variation をとると、次のような波動型自由境界問題が得られる：

$$\sigma u_{tt} = T \Delta u + \lambda, \quad (t, x) \in \Omega_{\tau} \cap \{u > 0\}, \quad (8)$$

$$T |\nabla u|^2 - \sigma (u_t)^2 = R(v), \quad (t, x) \in \Omega_{\tau} \cap \partial\{u > 0\}. \quad (9)$$

ただし、 $\Omega_{\tau} = \{(t, x) \in \mathbf{R}_+ \times \mathbf{R} \mid t \in (0, \tau), x \in \Omega\}$,

$$\lambda = \frac{1}{V} \int_{\Omega} (T |\nabla u|^2 + \sigma u u_{tt} \chi_{u>0}) dx, \quad (10)$$

$$R(v) = 2 \left(\gamma_{wo}(v) - T \left(1 - \frac{1}{2} \left(\frac{Q}{T} \right)^2 \right) \right) \chi_{u>0}. \quad (11)$$

ここで我々は、自由境界問題(8), (9)を近似した次の方程式を考える：

$$\chi_{u>0} \sigma u_{tt} = T \Delta u - R(v)(\chi^\varepsilon)'(u) + \lambda \chi_{u>0}. \quad (12)$$

この方程式に対して $\varepsilon \downarrow 0$ とすると、形式的には(8), (9)を導出することができるので、我々は油滴の数値モデルとして(12)を採用する。従って、我々はペンタノール液滴の数値モデルとして次の方程式系を得る：

$$\begin{cases} \frac{\partial v}{\partial t} = d \Delta v - k_1 v + g(u, v), \\ g(u, v) = \begin{cases} k_2(v_0 - v)u, & u > 0 \\ 0, & u = 0 \end{cases} \\ \chi_{u>0} \sigma u_{tt} = T \Delta u - R(v)(\chi^\varepsilon)'(u) + \lambda \chi_{u>0}, \\ \lambda = \frac{1}{V} \int_{\Omega} (T |\nabla u|^2 + \sigma u u_{tt} \chi_{u>0}) dx. \end{cases} \quad (13)$$

境界条件は

$$\frac{\partial v}{\partial n}(t, x) = \frac{\partial u}{\partial n}(t, x) = 0, \quad x \in \partial\Omega \quad \text{あるいは} \quad \frac{\partial v}{\partial n}(t, x) = u(t, x) = 0, \quad x \in \partial\Omega \quad (14)$$

とする。ただし n は $\partial\Omega$ の外向き法線ベクトルである。初期条件は

$$u(0, x) = u_0(x), \quad u_t(0, x) = 0.0, \quad v(0, x) = 0.0. \quad (15)$$

を与える。ただし、 $u_0(x)$ は Ω 上にコンパクト台を持つとする。

3 数値計算法 (離散勾配流法)

時間微分の係数が不連続関数である方程式(12)に対して差分化することや体積保存条件(7)を満たす差分方程式を導出することは困難である。そこで、非線形波動方程式(12)の数値計算を実行するために汎関数

$$J_n = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \left(\sigma \frac{|u_n - 2u_{n-1} + u_{n-2}|^2}{h^2} \chi_{u>0} + T |\nabla u|^2 + 2R(v) \chi^\varepsilon(u) \right) dx \quad (16)$$

の最小化関数を許容空間

$$\mathcal{K}_V = \left\{ u \in W^{1,2}(\Omega, \mathbf{R}); \quad \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad \text{あるいは} \quad u = 0 \text{ on } \partial\Omega, \quad \int_{\Omega} u dx = V \right\} \quad (17)$$

において探す数値計算法を採用する。この計算手法においては体積保存条件を自然な形で満たすことができる点に特徴がある。この計算手法を用いてモデル方程式(13)の数値計算を行った結果、油滴の等速運動を再現することができた。さらに、まだ不完全ではあるが分裂現象も再現することができた。