

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 27 年 6 月 18 日現在

機関番号：13301

研究種目：基盤研究(B)

研究期間：2011～2014

課題番号：23340024

研究課題名(和文)衝突・剥離・付着現象の変分法的アプローチによる数理解析

研究課題名(英文)Variational approach to collision, detachment and adhesion

研究代表者

小俣 正朗(Omata, Seiro)

金沢大学・数物科学系・教授

研究者番号：20214223

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 13,700,000円

研究成果の概要(和文)：本研究は、弾性体・流体などの動力学相互作用をエネルギー系として記述し、変分法に基づいた数学的解法とシミュレーション技法を確立することを目標としていた。相互作用として付着・剥離・衝突を想定する。対象物が体積保存するなど大域的制約条件が付く場合を取り扱った。

このために、エネルギー法(Lagrangian)に基づく方法論である離散勾配流法を導入した。これは時間差分空間微分型汎関数を用いて双曲型方程式の近似解の構成に変分の直接法を用いるものである。この方法は偏微分方程式に比べて大域的情報を含めやすい。弾性体の振動などを記述する場合に優れている。非局所効果や不連続性のある諸問題の解析も行った。

研究成果の概要(英文)：We have studied the motion of elastic body, fluid and their interaction. We used energy formula and variational method for solving these problems. The main target was hyperbolic free boundary problems which can be treated the motion of bubble even with junctions. Our method is based on the discrete Morse flow, which is defined by "time difference space differential" type functionals. We have constructed approximate solutions for hyperbolic free boundary problems and in easy cases we could show the existence of the solution.

The other feature of this problem is that we can add global constraints such as volume preserving constraint. We also developed numerical algorithm based on this idea.

研究分野：偏微分方程式論

キーワード：偏微分方程式 変分問題 数値解析 双曲型自由境界問題

1. 研究開始当初の背景

本研究は、固体表面上の液滴、水面上の泡などの**動力学と相互作用**を(数学的)エネルギーを用いて記述し、**変分法に基づいた数学的解法**とシミュレーション技法(**計算技術**)を**確立**することを目標としていた。構造物の相互作用として付着・剥離・衝突を想定する。この問題では対象物が体積保存するなど大域的制約条件が付く場合も取り扱う。そこで、エネルギー法(ラグランジェアン)に基づく方法論を導入した。これは大域的情報を含めやすい。しかし、解の存在と正則性を得るために強力な武器である最小化法が使えない。この困難を克服し、運動・時間発展を伴う諸現象で、非局所効果や不連続性のある諸問題の解析方法を流体などの**連成解析**も視野に入れて統合的に扱う解析手法・数値解析アルゴリズムの開発を目指していた。

研究開始時から注目された問題であった。

2. 研究の目的

本研究は、平面上の石けん膜や液滴・互いに張り付き合う持つ石けん膜(今後2次元モデルをもとにジャンクションのある石けん膜と呼ぶ)など弾性体・流体が動力学的相互作用を起こす現象のモデリングと、変分的手法に基づく解析法と数値計算法を開発することが目標である。

一方、数学的には、**接触・衝突**を表現するには、**不連続点**、**微分不可能**が出現する系で考察しなければならない。(スカラーであれば、解のグラフが「折れる」「切れる」などの特異集合を持つものたちである。)このようなエネルギー集中現象として、調和写像の**defect**、**液晶のvortex**などが知られている。本研究は解に特異構造を持ちうる、「平面上の石けん膜の**振動問題**」、「ジャンクションを持つ石けんの泡たちの解析」を行うことを目指している。ジャンクションとは膜または曲線が相互に接触している場所で、ここになんらかの「自由境界」が出現する。数学的な標語で言うと局所的には**双曲型(波動型)自由境界問題**を取り扱うこととなる。

さらに、本研究の対象物は「体積不変」などという状況が想定される。また、衝突を想定する場合、「位置エネルギー」などで大域的情報に規制されることが予測される。このような場合、各点での運動方程式である偏微分方程式で表現できる範疇を逸脱することが予想できる。そこで、変分的取り扱いのラグランジェアン

$$L = S_{\text{Shape}} + U_{\text{Potential}} - K_{\text{Kinetic}}$$

を用いる。これを離散勾配流で時間差分の近似エネルギーに変換するなどして強い非線形性や非局所性などを克服することをめざした。我々の問題は、以下の3点に特徴を持つ。

(1)形状エネルギー S と運動エネルギー K について障害物(水面など)との衝突によ

るエネルギー**消滅条件**が付く

(2)体積保存や対象物同士の衝突(泡同士など)の解析のために重心位置などの

大域的制約条件が入る

(3)対象物同士の接触(**相互作用**)場所に**自由境界**を生ずることがある

代表的な例として、「液滴付着現象のダイナミクス」を見てみよう。液滴と平面の接触条件としてシャープな接触角を考えると方程式がデルタ測度(ラドン測度になることを期待している)を含む。Lagrangian は以下のようになる:

$$L(u) = \int_{\{u>0\}} (|u|^2 + Q^2 - u_t^2) dx$$

これより action の第一変分を体積保存条件下で計算すると、方程式は次のようになる:

$$\int_{\{u>0\}} u_{tt} = u + \int_{\{u>0\}} (u u_{tt} + |u|^2) dx$$

($\int_{\{u>0\}}$ は集合 $\{u>0\}$ の特性関数で $\int_{\{u>0\}}$ は集合 $\{u>0\}$ の境界 $\{u>0\}$ 上にサポートを持つ測度、最後の積分はラグランジュ乗数にあたる。) この方程式のタイプを述べれば、**非局所項とデルタ測度を外力に持つ退化双曲型方程式**となる。これが目標となる方程式の一つである。一次元の場合の可解性について検討は研究代表者が一部解決した。

3. 研究の方法

このような問題群に対して、**離散勾配流法**は非常に有効である。これは、時間差分・空間微分型汎関数:

$$J_n(u) := \int (1/h^2) |u - 2u_{n-1} + u_{n-2}|^2 dx + I(u) \quad n = 1, 2, \dots$$

を用いる方法論である(I は元となる定常問題の汎関数)。これらの汎関数の minimizer たちを時間方向に補間したものが双曲型の近似解になり、この極限($h \rightarrow 0$)で真の弱解を構成する。大域的制限が付いていても、許容関数空間の制限だけで済むのが特徴である。

真の解(存在すれば)はラグランジェアンの停留点となる。これは数値解析法としてもエネルギー最小化法を波動型方程式に応用した新たな方法になっている。これらの計算は並列分散処理系と相性が良いので、分散処理系を構築してソルバーの開発も目指す。さらに連成解析などでも有効なエネルギーに基づく数値解法を構築する

4. 研究成果

まず、付着・剥離現象においては

$$L(u) = \int_{\{u>0\}} (|u|^2 + Q^2 - u_t^2) dx$$

の第一変分は特性関数の不連続性により計算できない。しかしながら、停留点を与える関数の正則性などを仮定して、方程式の情報を引き出すことが出来る場合はある。ところが、本研究の対象物のように衝突・体積保存といった大域的条件が付くと、偏微分方程式以外のアプローチが有用になる場合がある。そのアプローチのひとつが **ラグランジェアン**

の直接的取り扱いと方程式群との連成解析を扱う方法である。このようにして、付着物表面をスカラー関数のグラフで表した。これにより、体積保存条件付き双曲型自由境界問題が導入された。また、平面に付着した液滴の挙動への応用も行った。

また、内部構造をもつ対象の衝突解析も行った。(将来的には交通事故における頭蓋内の衝撃解析を行うことができると期待している。)

さらに弾性・塑性・粘性などの連続体としての構造パラメータや多孔性・通水性(細胞膜の物性)比重(浮力)や粘着力など臓器相互関係などを含む方程式の研究も行った。

また、リングのバウンスの弾性振動方程式を導出し、数値的に妥当な計算結果を得た。

さらにジャンクションを持つ界面の運動についての有効なアルゴリズムを得た。これには体積保存条件も付加できて、多重の泡の動力学へ応用した。

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22件:査読付き)

[1] 小俣正朗 双曲型自由境界問題の数理解析及び数値解析(付着・剥離・衝突の数理解析) to appear in 数学(岩波書店 日本数学会編集)) 2015.

[2] S. Nakata, M. Nagayama, H. Kitahata, N. J. Suematsu and T. Hasegawa, "Physicochemical design and analysis of self-propelled objects that are characteristically sensitive to interfacial environments, *Physical Chemistry Chemical Physics*, 7(2015), 10326-10338.

DOI : 10.1039/C5CP00541H.

[3] Svadlenka, Karel; Ginder, Elliott; Omata, Seiro; A variational method for multiphase volume-preserving interface motions. *J. Comput. Appl. Math.* 257 (2014), 157-179.

[4] S.-I. Ei, K. Ikeda, M. Nagayama and A. Tomoeda, "Application of a center manifold theory to a reaction-diffusion system of collective motion of camphor disks and boats", *Mathematica Bohemica* 139(2), 2014, 363-371.

[5] Y. Kobayashi, Y. Sanno, A. Sakai, Y. Sawabu, M. Tsutsumi, M. Goto, H. Kitahata, S. Nakata, J. Kumamoto, M. Denda, M. Nagayama, "Mathematical modeling of calcium waves induced by mechanical stimulation in keratinocytes" *PLoS ONE* 9(3)(2014): e92650. DOI : 10.1371/journal.pone.0092650.

[6] 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, DOI: 10.1016/j.physd.2014.01.005.

[7] M. Denda, S. Denda, M. Tsutsumi, M. Goto, J. Kumamoto, M. Nakatani, K. Takei, H. Kitahata, S. Nakata, Y. Sawabu, Y. Kobayashi, M. Nagayama, "'Frontiers in epidermal barrier homeostasis - an approach to mathematical modeling of epidermal calcium dynamics'", *Experimental Dermatology*, 23(2014), 79-82, DOI : 10.1111/exd.12302.

[8] M.Kazama, S. Omata, T.Nagasawa, A.Kikuta, K. Svadlenka *A global model for impact of elasticshells and its numerical implementation*, **Adv. Math. Sci. Appl.**, **23**, 1 (2013) 93-108.

[9] S. Nakata, T. Miyaji T. Ueda, T. Sato, Y. S. Ikura, S. Izumi and M. Nagayama, "Reciprocating motion of a self-propelled object on a molecular layer with a local minimum and a local maximum isotherm", *Journal of Physical Chemistry C*, 117(2013) 6346-6352, DOI: 10.1021/jp400971h.

[10] T. Hirashima, Y. Hosokawa, T. Iino and M. Nagayama, "On Fundamental Cellular Processes for Emergence of Collective Epithelial Movement", *Biology Open*, 2(7)2013, 660-666, DOI: 10.1242/bio.20134523.

[11] H. Kitahata, K. Iida and M. Nagayama, "Spontaneous motion of an elliptic camphor particle", *Physical Review E*, 87(2013)010901, DOI:10.1103/PhysRevE.83.056207.

[12] M. Yadome, K.-I. Ueda and M. Nagayama, "Chaotic motion of propagating pulses in the Gray-Scott model", *Physical Review E*, 83(2011) 056207, DOI: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevE.83.056207>.

[13] S.Omata, *Numerical treatment for phenomena related to adhesion, exfoliation and collision*,

Gakuto Intern. Ser. Math. Sci. Appl., **35** 151-159 (2011).

[14] C.F.Naa, S.Omata, M.Kazama, *Stochastic moving particle semi-implicit for wave simulation*, **Gakuto Intern. Ser. Math. Sci. Appl.**, **34** 175-187 (2011).

[15] R.Kurnia, S.Omata, M.Kazama, *The stochastic smoothed particle hydrodynamics to overcome energy loss*, **Gakuto Intern. Ser. Math. Sci. Appl.**, **34** 157-174 (2011).

[16] P.H.Gunawan, S.Omata, K.Ohara, M.Kazama, *Droplet collision via the SPH method with surface tension*, **Gakuto Intern. Ser. Math. Sci. Appl.**, **34** 151-156 (2011).

[17] E. Ginder, S. Omata, K. Svadlenka

A variational method for diffusion-generated area-preserving interface motion **Theoretical and Applied Mechanics** Japan, Volume 60, (2011) 265-270

[18] Katsuyuki Ishii, S.Omata, *Convergence of the Approximation Scheme to American Option Pricing via the Discrete Morse Semiflow*, **Appl. Math. Optim.** Vol 64 (2011) 363-415

[19] M.Nagayama, K-I.Ueda and M.Yadome, "Numerical approach for transient dynamics of oscillatory pulses in a bistable reaction-diffusion system", *Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics*, 27(2) (2010) 295-322, DOI:10.1007/s13160-010-0015-8.

[20] N.J.Suematsu, Y.Ikura, M.Nagayama, N.Kawagishi, M.Nakamura, H.Kitahata, M.Murakami and S.Nakata, "Mode-switching of the self-motion of a camphor boat depending on the diffusion distance of camphor molecules", *Journal of Physical Chemistry*, 114(2010) 9876-9882, DOI: 10.1021/jp101838h.

[21] K.Iida, N.J.Suematsu, Y.Miyahara, H.Kitahata, M.Nagayama and S.Nakata, "Experimental and theoretical studies on the self-motion of a phenanthroline disk coupled with complex formation", *Physical Chemistry Chemical Physics*, 12(2010) 1557-1563, DOI: 10.1039/B918691C.

[22] M.Tsutsumi, H.Kitahata, S.Nakata, Y.Sanno, M.Nagayama and M.Denda, "Mathematical analysis of intercellular calcium propagation induced by adenosine triphosphate", *Skin Research and Technology*, 16(2010) 146-150, DOI: 10.1111/j.1600-0846.2009.00420.x.

[学会発表](計14件)

[1] 第15回北海道大学電子研国際シンポジウム(北海道札幌市) Seiro Omata, *Mathematical Structure and Numerical Analysis of Oscillating Droplets* 2014.12.17 Invited Plenary talk.

[2] 日本数学会秋期総合分科会企画特別講演(広島県東広島市) 小俣正朗「液滴・泡の数理」2014.9.25

[3] The 38th Sapporo Symposium on Partial Differential Equation(北海道札幌市) 2013年8月21日(水)~8月23日(金) Seiro Omata, *Mathematical modeling and numerical treatment of adhesion, exfoliation and collision*

[4] The fifth international symposium on computational science, Yogyakarta, 15-16 May 2012.(インドネシア), Seiro Omata On a new numerical method for multiphase area-preserving mean curvature

motion of interfaces, Seiro Omata and Svadlenka Karel Invited Plenary talk

[5] 5th Polish-Japanese Days on Nonlinear Analysis in Interdisciplinary Sciences, Kyoto, Japan, 2012年11月5-9日(京都府京都市), Seiro Omata, *Mathematical modeling and numerical treatment of adhesion, exfoliation and collision*, Invited Plenary talk

[6] 9th AIMS international conference on Dynamical system, Differential equations and Application, July 1st - 5th 2012, Orlando, Florida(アメリカ合衆国). Seiro Omata *Mathematical and computational aspects of problems involving adhesion, detachment, and collision*

査読付きプロシーディングス(発表済み)

[P1] Yasuaki Kobayashi, Yusuke Sawabu, Satoshi Ota and Masaharu Nagayama, "Mathematical model for epidermal homeostasis", *Mathematical Progress in Expressive Image Synthesis II: (Proceedings of the Symposium 2014, 九州大学(福岡県・博多市)11月12日~14日(2014)H. Ochiai, K. Anjyo (Eds.), in press.*

[P2] Yasuaki Kobayashi and Masaharu Nagayama, "Mathematical model of epidermal structure", *Applications + Practical Conceptualization + Mathematics = fruitful Innovation: Proceedings of the Forum of Mathematics for Industry 2014 九州大学(福岡県・博多市)11月12日~14日(2014)), R.S. Anderssen et al. (Eds.), in press.*

[P3] 長山雅晴, 若井健, 小林康明, 西慧, 井倉 S. 弓彦, 中田聡, "樟脳円盤の集団運動に対する計算機援用解析", 計算工学講演会(広島国際会議場(広島県・広島市)2014年6月11日~13日)論文集, 19(2014).

[P4] 長山雅晴, 小林康明, 澤武裕輔, 中田聡, 北畑裕之, 後藤真紀子, 堤も絵, 傳田光洋, "表皮構造の数理モデル", 計算工学講演会(東京大学(東京都・目黒区), 2013年6月19日~21日)論文集, 18(2013).

[P5] 飯田溪太, 北畑裕之, 長山雅晴, "樟脳粒の自発運動: 粒子形状と運動の関係について", 計算工学講演会(東京大学(東京都・目黒区), 2013年6月19日~21日)論文集, 18(2013).

[P6] 長山雅晴, 安宅正, "樟脳船運動に現れる渋滞現象について", 計算工学講演会(東京都)論文集, 17(2012).

[P7] 飯田溪太, 北畑裕之, 長山雅晴, "Numerical simulation of camphor motions at the air-water interface", 計算工学講演会(京都教育文化センター(京都府・京都市)2012年5月29日~31日)論文集, 17(2012).

[P8] 長山雅晴, 坂井昭彦, 中田聡, 北畑裕之, 傳田光洋, "角層形成の数理モデル", 計算工

学講演会（東京大学柏キャンパス（千葉県・柏市）2011年5月25日～27日）論文集，16(2011).

[P9] 長山雅晴，上田肇一，矢留雅亮，"反応拡散系に現れるカオスパルス波"，計算工学講演会（九州大学医学部（福岡県・福岡市）2010年5月26日～28日）論文集，15(2010).

〔図書〕(計1件)

[1] 応用数理ハンドブック(日本応用数理学会編) ブラック–ショールズの離散モデル (p200-203) 担当 2013.

〔産業財産権〕

出願状況(計 0 件)

取得状況(計 0 件)

〔その他〕

ホームページ等

6. 研究組織

(1) 研究代表者

小俣 正朗

(金沢大学理工研究域数物科学系教授)

研究者番号：2021144223

(2) 研究分担者

長山 雅晴 (北海道大学電子科学研究所教授)

研究者番号：203114289