

自己推進粒子集団の非線形ダイナミクス

太田隆夫

Takao Ohta

東京大学大学院理学系研究科物理学専攻

Department of Physics, The University of Tokyo

豊田理化学研究所

Toyota Physical and Chemical Research Institute

1 はじめに

近年、非線形科学の基礎的問題として自己推進する粒子系の研究が盛んになっている。集団運動については、Vicsek らが 1995 年に導入したモデル [1] が契機となってその後、多くの研究が行われてきた。かれらは有限の速度をもつ点粒子の集団を考え、その速度方向は回りの粒子の速度方向の平均で決まるとした。向きの決定に小さなノイズを加えたモデルでは粒子密度を大きくするか、あるいは、ノイズ強度を下げると各々の粒子が乱雑な向きの運動から方向を揃えた運動への転移が起こることを示した。

一方では、孤立した 1 個の自己推進粒子の運動についても注目が集まってきている。このときは点粒子、あるいは剛体粒子では（アクティブブラウン運動を除いて）面白いことは期待できない。バクテリアの泳動から明らかなように、自己推進する生体系では必ず形の変化を伴っている。すなわち、変形可能な柔らかな粒子の自己駆動では重心の運動と変形の非線形相互作用が重要である。実際、泳ぐバクテリアについては流体力学的研究が古くからなされている。培地上を這う生体細胞でも変形が重心の移動を起こしているのは

明らかである。最近の実験では細胞が培地に及ぼす力の分布とその時間変化や、速度と変形の時間相関が測定されている [2]。また、細胞内部で運動に関与する化学分子の濃度の時空間変化と細胞の変形との関係も明らかにされている [3]。非生物系でも、水溶液に浮かんだ油滴がマランゴニ効果で自己推進する場合には、速度の大きさに伴って油滴が円形から三日月型へ変形することが知られている。これらの実験に対して、そのおのおのに適用される理論モデルは提案されているが、全体を統括的に理解しようとする試みはほとんど存在しない。本稿では私たちが最近行っている、系の詳細に依らない普遍的なアプローチを紹介する。

2 孤立自己推進粒子のダイナミクス

変形する自己推進粒子の運動を考察しよう。簡単のため、2次元空間に置かれた円形の粒子の変形を考える。重心から粒子の表面までの距離を $R(\theta, t)$ と表し、それをフーリエ級数展開する。 θ は x 軸からの角度である。

$$R(\theta) = R_0 + \delta R(\theta, t), \quad (1)$$

$$\delta R(\theta, t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} z_n(t) e^{in\theta}. \quad (2)$$

R_0 は円の半径である。 R_0 は一定であると仮定して $n = 0$ 成分はゼロとおく。また、 $n = \pm 1$ 成分は重心の平行移動を表すが、それは重心速度 \vec{v} で考慮するので (2) の総和から省く。その結果、取り入れるべき最低のフーリエ振幅は $z_{\pm 2}(t)$ である。これの発展方程式を書き下してもいいのではあるが、フーリエ振幅による表現は2次元空間に限られる欠点がある。任意の空間で変形粒子に対する有効な理論を作るため、次の2階対称テンソル S_{ij} を導入しよう。

$$S_{11} = -S_{22} = z_2 + z_{-2}, \quad S_{12} = S_{21} = i(z_2 - z_{-2}). \quad (3)$$

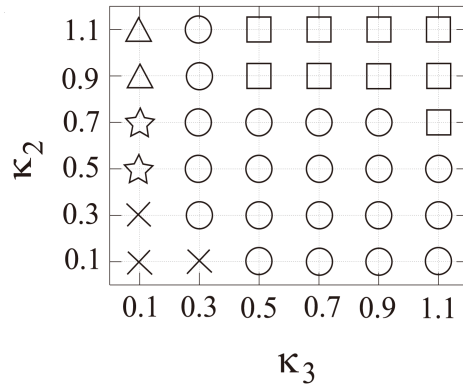


図 1: 2次元空間中での自己推進粒子の相図。□の領域では直進運動、○の領域では回転運動、△の領域ではジグザグ運動、☆の領域ではカオス運動が現れる。文献 [5] より転載。

$\text{Tr}S = 0$ である。このテンソルは楕円変形を表現する。 $n = \pm 3$ のモードから 3 階の対称テンソル U_{ijk} を以下のように構成しよう。

$$\begin{aligned} U_{111} = z_3 + z_{-3}, U_{222} &= -i(z_3 - z_{-3}), U_{111} = -U_{122} = -U_{212} = -U_{221}, \\ U_{222} &= -U_{112} = -U_{121} = -U_{211} \end{aligned} \quad (4)$$

U_{ijk} は 120 度回転対称な変形を表す。

ベクトル \vec{v} 、2 階の対称テンソル S 、および、3 階の対称テンソル U の時間発展方程式は、系が一様等方であれば現象論的に書き下すことができ、低次の非線形項のみ考慮すると次のようになる。

$$\frac{d}{dt} v_i = \gamma v_i - \vec{v}^2 v_i - a_1 S_{ij} v_j, \quad (5)$$

γ が負のとき速度ゼロが安定解であり、正のとき有限速度が安定解である。係数 a_1 は定数である。 S と U に対する方程式は \vec{v} から対称テンソルを構成することを考え、また、ベクトルと 3 階テンソルから 2 階テンソルを作ることなどを考慮すると

$$\frac{d}{dt} S_{ij} = -\kappa_2 S_{ij} + b_1 \left(v_i v_j - \frac{1}{2} \vec{v}^2 \delta_{ij} \right) + b_2 U_{ijk} v_k - b_3 (S_{mn} S_{mn}) S_{ij}, \quad (6)$$

$$\frac{d}{dt} U_{ijk} = -\kappa_3 U_{ijk} + d_1 \left[v_i v_j v_k - \frac{v_\ell v_\ell}{4} (\delta_{ij} v_k + \delta_{ik} v_j + \delta_{jk} v_i) \right]$$

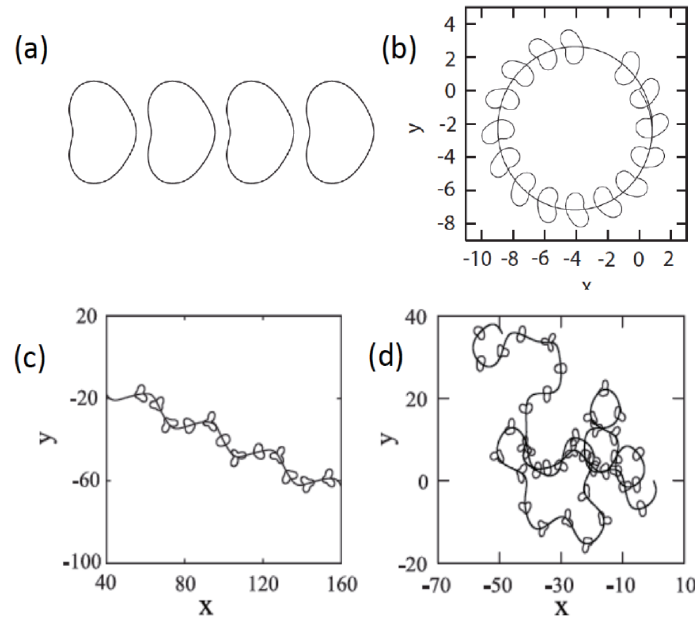


図 2: (a) 左から右への直線運動。(b) 時計回りの回転運動。(c) 左から右へのジグザグ運動。(d) カオス運動。文献 [7] より転載。

$$+ \frac{d_2}{3} \left[S_{ij} v_k + S_{ik} v_j + S_{jk} v_i - \frac{v_\ell}{2} (\delta_{ij} S_{k\ell} + \delta_{jk} S_{i\ell} + \delta_{ki} S_{j\ell}) \right]. \quad (7)$$

となる [4, 5]。ただし、3 次の非線形性まで取り入れるとしても、すべての項を書き下すと複雑になるので (6)、(7) では多くの項を省略している。変形の時間スケールを決める係数 κ_2 と κ_3 は正であり、その他の係数も b_1 以外は全て正であると仮定する。

ベクトルとテンソルで表現された方程式 (5)、(6)、(7) は 2 次元空間での粒子を想定しているが、3 次元の場合でも係数の小さな変更で同じ形になる便利さがある。また、非線形反応拡散方程式において、孤立したドメインのドリフト分岐点近傍でこれらの方程式を実際に導出することができる [6]。そのとき、すべての係数を反応拡散系のパラメータの関数として具体的に与えられる。

a_1 , b_1 などの係数を固定し変形の緩和率 κ_2 と κ_3 を変化させたときに数値的の得られた非平衡相図を図 1 に示す [5]。粒子は速度方向に垂直に伸長するようパラメータ b_1 の符号を選んである。四角で示した領域では直進運動、丸の領域では回転運動、三角の領域では

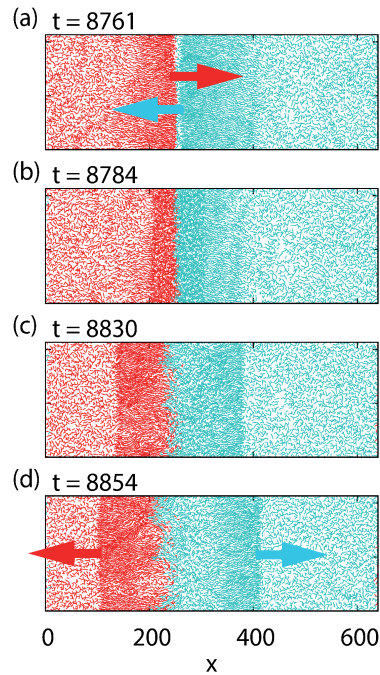


図 3: 伝播する波の正面衝突におけるソリトンの挙動。小さな点が1個の粒子を表わす。(a)は衝突直前のスナップショットであり、矢印のように左のバンドは右へ、右のバンドは左へ進んでいる。(b)は衝突時のスナップショット。右側のバンドが左側のバンドより少し大きい(幅が広い)ことに注意されたい。衝突後、(d)のように左のバンドは左へ、右のバンドは右へ進む。文献 [10] より転載。

ジグザグ運動、星形の領域ではカオス運動が現れる。 \times のパラメータでは数値的不安定性のため明確なことが言えない。それぞれの運動の様子を図2にまとめてある。図2(a)ではバナナ型に変形した粒子が右に定速度で動いている。図2(b)では同じくバナナ型に変形した粒子が閉じた円軌道を時計回りに回転している。図2(c)のジグザグ運動では約60度の角度の方向転換を周期的に繰り返しながら、左から右へ進んでいる。もちろん、この軌道の変化に応じて粒子も周期的変形を繰り返す。図2(d)のカオス運動では、軌道不安定性の指標であるリャプノフ指数が正であることを数値的に確認してある。

3 自己推進粒子集団のダイナミクス

柔らかな粒子集団でどのような秩序状態が現れるかを検討しよう。先の節で述べた柔らかな自己推進粒子の重心と楕円変形の運動方程式 (5)、(6) をそれぞれの粒子に適用し、さらに

(A) 粒子間距離の関数としてガウス型の斥力相互作用と楕円変形した粒子の向きをそろえる配向相互作用を導入し、

(B) 各々の粒子の速度は周りの粒子密度の増加関数である、

として秩序状態のダイナミクスを調べる [8]。(B) についてはバクテリアの集団運動で実際に観察されている。3 階の対称テンソル U は簡単のため考えない。各々の粒子は速度方向に伸長するようにパラメータを設定する。これらの条件下で、粒子密度がある程度大きいところで無秩序状態から秩序状態への転移が起こる。注目すべきことは転移点近傍で一様な秩序状態は安定ではなく、無秩序状態の中に細長い密度の高い秩序状態が発生しそれが伝播することである。Vicsek らのモデルでも伝播する秩序バンドが現れることが知られている [9]。しかし、Vicsek らのモデルとの大きな違いは、柔らかな粒子集団が形成するバンドは正面衝突で壊れないことである。その例を図 3 に示す。(a) の衝突直前の二つのバンドが (b) で衝突し、それが跳ね返って (c)、離れさって行く (d)。周期境界条件なので (d) の二つのバンドはそのうち再度、正面衝突する。60 回以上衝突してもバンドは壊れないことを数値的に確認してある。バンドの正面衝突で個々の粒子は混じり合わないが、大きなバンドと小さなバンドの衝突では、バンドの大きさの交換が起こり、あたかも互いに通り抜けるように振る舞う。図 3 では大きさの異なるバンドの衝突であるが、衝突のたびに大きさの違いがすこしづつなくなり、最終的には大きさが同じバンドの衝突になる。

非線形散逸系であたかもソリトンのような振る舞いが起こるのは驚きである。この現象には粒子の変形が本質的に重要である。つまり、方程式 (6) の緩和率 κ_2 を大きくするとバンドは存在はするが衝突で安定でなくなる [10]。

4 おわりに

柔らかな自己推進粒子系の個別運動と集団運動についてできるだけ簡単なモデルを導入し、主として数値的にその解の振る舞いを調べた。1個の孤立した粒子でも、変形と並進の非線形相互作用のため多彩な運動形態が現れる。しかし、これらと生体細胞の運動を比較するためにはモデルの改良とさらなる解析が必要である。集団運動では伝播するバンドの出現と衝突におけるソリトンの振る舞いがみられた。散逸系の波のソリトン挙動については、自己推進粒子系以外で、実験による報告が皆無ではないが理論解析は進んでいない。今後の一つの方向は相互作用する柔らかな自己推進粒子集団の連続場モデルを導入し、それがソリトンの孤立波を解として持つかを調べることであろう。

参考文献

- [1] T. Vicsek, *et al*: Phys. Rev. Lett. **75** (1995) 1226.
- [2] H. Tanimoto and M. Sano: Biophys. J. **106** (2014) 16.
- [3] D. Taniguchi, *et al*: Proc. Natl. Acad. Sci. USA **110** (2013) 5016.
- [4] T. Ohta, T. Ohkuma: Phys. Rev. Lett. **102** (2009) 154101.
- [5] T. Hiraiwa, *et al*: Europhys. Lett. **91** (2010) 2001.
- [6] T. Ohta, *et al*: Phys. Rev. E **80** (2009) 056203.
- [7] 太田隆夫、日本物理学会誌 2015年5月号
- [8] S. Yamanaka and T. Ohta: Phys. Rev. E **89** (2014) 012918.
- [9] H. Chaté, *et al*: Phys. Rev. E **77** (2008) 046113.
- [10] S. Yamanaka, T. Ohta: Phys. Rev. E **90** (2014) 042927.