

樟脳型自己駆動粒子モデル

大澤智興¹

¹九州工業大学大学院 情報工学研究院 物理情報工学研究系

概要

水に浮かべた樟脳粒は、直線的な運動を引き起こすため、自己駆動粒子として考えられる。この特徴的な運動を動的フロアフィールドモデルを用いてモデル化を行った。動的フロアフィールドモデルを用いると、樟脳粒の存在していた位置から回避する移動ルールを構成することができる。このモデルの数値計算では、直進性を再現することができた。さらに、本モデルを解析的に計算すると、樟脳強度分布を求めることができ、この直進性のメカニズムも理解できた。

A model of camphor-type self-driven particle

Chikoo Oosawa¹

¹ Department of Physics and Information Engineering, Graduate School of Information Engineering, Kyushu Institute of Technology

Abstract

Camphor particle floating on water is recognized as self-driven particle. A wide variety of motions of camphor particles has been modeled by partial differential equations. Here the author proposes dynamic floor field model to deal with one of the motions, especially straight motion. With using the dynamic floor field model, self-avoiding rule can be formulated, leading to a model for the motion. Numerical results from the model can reproduce a typical behavior of camphor particle. In addition, analytical results show that mechanism of the motion is sensitive to difference of camphor intensity before and after particle.

1 はじめに

樟脳粒を水面に浮かべると、自己駆動粒子として振る舞うことが知られている [1-5]。樟脳分子は、樟脳粒から溶解し水の表面へ拡散するが、この樟脳の濃度が高い方が表面張力が低くなり、結果的に、樟脳粒は表面張力の大きい方へ、つまり樟脳濃度が低い方向へ移動する。このような自己駆動粒子は、(偏)微分方程式によりモデル化されてきた [1-5]。本報告では、人や動物などの自己駆動粒子間の追従現象を再現するために局所的引力相互作用として用いられている動的フロアフィールド (DFF) モデル [6] を樟脳粒の駆動力として用いたセルオートマトンモデ

ルを構築した。

2 樟脳粒の移動モデル

本モデルにおける時間と空間は離散化されている (図 1)。ここでは簡単のため空間は 1 次元に限定、さらに樟脳粒も 1 つのみの場合のみを考える。

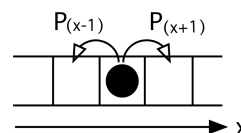


図 1: ●は樟脳粒を示す。粒の移動確率は式 (1), 式 (2) から求まる。

DFF モデルを用いて樟脳粒からの樟脳の溶解、拡散、消化をモデル化した (図 2,3)。DFF モデル [6] における粒子からの足跡 (f_p) を樟脳粒から溶解する樟脳強度と捉える。さらに、時間ステップ t 毎に樟脳粒から一定強度 $f_p (> 0.0)$ で溶解する (図 2)。DFF モデルの f_p と同様に、樟脳分子も x 軸の正負方向に等方的に拡散速度 $\alpha (0 \leq \alpha \leq \frac{1}{2})$ で拡散するとともに、空中へ昇華 (分解) することで、マス目から速度 $\delta (0 \leq \delta \leq 1)$ で減衰する (図 3)。

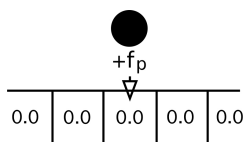


図 2: 樟脳の溶解: ●は樟脳粒を示す。マス目中の 0.0 は、初期樟脳強度である。

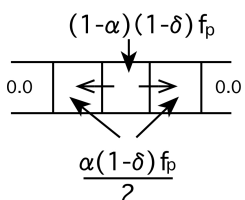


図 3: 拡散、昇華後の樟脳強度 I 分布

このように形成された樟脳強度 I 分布に依存して、樟脳粒は時間ステップ t 毎に粒の正または、負の方向にそれぞれ、確率 $P(x+1), P(x-1)$ で移動する (図 1)。具体的には、[6] にあるように、フェルミール (ソフトマックス関数) を用いて、

$$P(x+1) = \frac{\exp(k_D I(x+1))}{\exp(k_D I(x+1)) + \exp(k_D I(x-1))} \quad (1)$$

$$P(x-1) = \frac{\exp(k_D I(x-1))}{\exp(k_D I(x+1)) + \exp(k_D I(x-1))} \quad (2)$$

である。ここで、 $I(x+1), I(x-1)$ は、それぞれ樟脳粒の正側、負側の樟脳強度を示す。 k_D は樟脳粒の樟脳強度に対する選好度合いを示し、 $k_D < 0$ では、確率的に高強度を回避し、より低強度の方向に移動しやすくなる。このように DFF を用いた樟脳粒の自己駆動粒子モデルは、時間ステップ t 毎に、樟脳の溶解、拡散、昇華、樟脳粒の移動が含まれる反応拡散逸系である。

3 数値解

3.1 k_D 依存性

2 節に示した手続き実行時には、 L ステップ実行するために、1 次元 ($2L + 3$) 個のマス目を用意し、

その中心を樟脳粒の初期位置 ($x = 0$) とした。さらに、全てのマスの初期樟脳強度を 0.0 とした。図 4 は、 $t = 10^3$ まで計算し、その到達位置 x_t を求め、同様の計算を 10^3 回繰り返して、到達位置 x_t の頻度分布 f を示している。計算条件を $\alpha=0.5, \delta=0.1, f_p=1.0$ に固定し、 k_D は $-20.0, -10.0, -5.0, -1.0, 0.0$ へ変化させた場合を示している。 $k_D = 0.0$ では樟脳強度分布に依存しなくなり、ランダムウォーク (RW) となり、その分布は正規分布状になった。負の k_D では x_t の分布は、左右に広がり、より小さい負では、樟脳粒は右往左往することが少なくなり、ほぼ一方向に移動する頻度が上昇した。このように実験で観察される樟脳粒で見られる現象 [2,4] が再現できた。このような直進性のメカニズムを調べるために、3.2 節に示す条件で計算を行った。

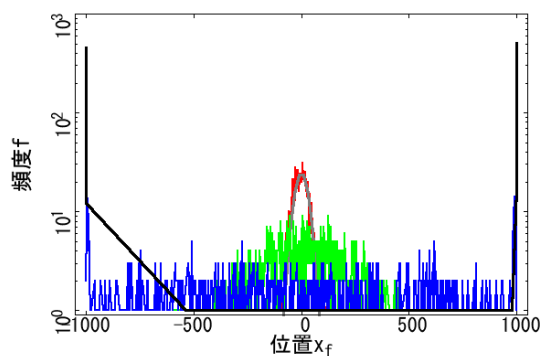


図 4: 到達位置 x_f の k_D 依存性、赤: $k_D = 0.0$ 、灰: $f \propto \exp(-x_f^2)$ 、緑: $k_D = -5.0$ 、青: $k_D = -10.0$ 、黒: $k_D = -20.0$ である。

3.2 δ 依存性

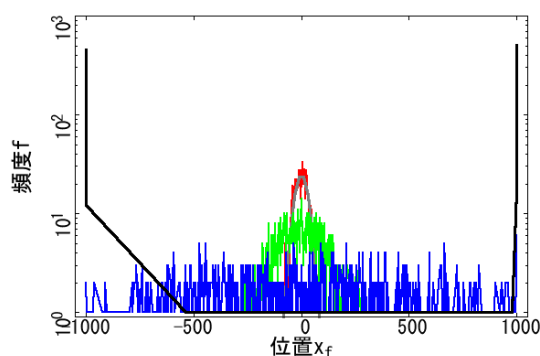


図 5: 到達位置 x_f の δ 依存性、赤: $\delta = 0.9$ 、灰: $f \propto \exp(-x_f^2)$ 、緑: $\delta = 0.5$ 、青: $\delta = 0.3$ 、黒: $\delta = 0.1$ である。

図5は、 $\alpha=0.5, k_D=-20.0, f_p=1.0$ に固定し、 δ を変化させた場合の結果を示している。大きい $\delta = 0.9$ では、昇華速度が大きく、RW に近くなることを示している (図6赤)。従って、図4, 図5は、高強度からの回避により直進性を獲得していることを示している。

4 解析解

4.1 式の導出

ここで、樟脳強度 I の時刻 t と位置 x を、 $I(t, x)$ と表記し、これを α, δ, f_p の関数として表現する。 $t = 0$ では、図3に示したように、

$$I(0, -1) = \frac{1}{2}\alpha(1 - \delta)f_p \quad (3)$$

$$I(0, 0) = (1 - \alpha)(1 - \delta)f_p \quad (4)$$

$$I(0, 1) = \frac{1}{2}\alpha(1 - \delta)f_p \quad (5)$$

となる。ここでは、3節において示したように、ほぼ一方向に移動した状況、つまり時間ステップ t 毎に右に1マス毎移動したと仮定して、解析的に強度分布 $I(t, x)$ を求めた (A.1, A.2)。

4.2 樟脳強度分布

図6は、 $t = 4$ における樟脳強度分布 $I(4, x)$ を、種々の α, δ で示した結果である。大きい δ (図6赤) では、粒前後の強度差が小さくなり、結果として、3節で示したように、その振る舞いが RW に近くなると理解できる。また小さい δ では、進行方向より後方の強度が高くなり、一方向へ移動する確率が上昇することが理解できる。図3や、式(3)~(5)に示すように、 $t = 0$ では、樟脳強度の空間的な対称性は保たれているが一旦、どちらか一方向に動き出すと、強度分布が形成され (A.1, A.2)、特に小さい δ では、進行方向を反転しづらくなることがわかる。

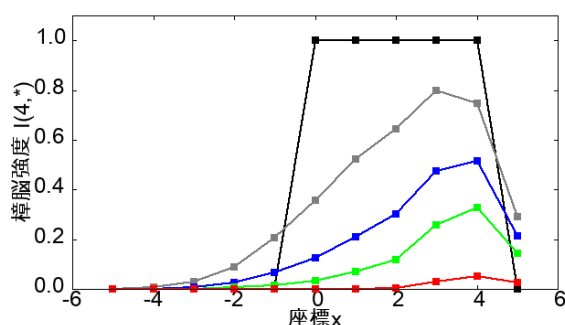


図6: $t = 4$ における解析解から得られた強度分布、 $x = 4$ に樟脳粒がある。移動確率に用いられるのは、 $x = 3$ と $x = 5$ の強度 I である。黒: $\alpha = 0.0, \delta = 0.0$ 、灰: $\alpha = 0.5, \delta = 0.1$ 、青: $\alpha = 0.5, \delta = 0.3$ 、緑: $\alpha = 0.5, \delta = 0.5$ 、赤: $\alpha = 0.5, \delta = 0.9$ である。

4.3 樟脳粒子の直進性

実験や微分方程式の解析 [4, 5] によると、樟脳粒を浮かべた溶液の粘度が低い (高温の溶液) 場合 [4] に直進性がみらる。本モデルの結果である、図4の $k_D (= -20.0)$ で樟脳粒の直進性がみられた。従って、本モデルは、低粘度 (高温) 溶液条件下の定性モデルに対応すると考えられる。

5 まとめ

DFE モデルを樟脳粒の推進の原因として用い、直進運動性をモデル化した。そのモデルを用いて数値解と樟脳強度 I の解析解を求め、それらの結果を比較し、直進する運動性の因果関係を説明した。図6のような強度分布 I に対応する樟脳濃度分布は、[2, 4, 5] にも示され、さらに、本モデルや [4] においても、式(1),(2)にあるように樟脳強度 I や樟脳濃度に駆動力が非線形に依存する仮定を採用しており、本モデルも定性的に適切なモデルであるといえる。

また δ が小さい条件では、空間に移動履歴が樟脳強度として記憶、蓄積され、結果として RW から遠ざかり非マルコフ性を獲得する自己駆動粒子モデルとみることができる。

本報告では、1次元上の単一粒子について述べたが、2次元上の追跡 (捕食)-逃避 (被食) 関係 [7] にある複数種かつ多粒子の条件にも適用した [8]。

参考文献

- [1] K.Nishi, K.Wakai, T.Ueda, M.Yoshii, Y.S.Ikura, H.Nishimori, S.Nakata, M.Nagayama, Phys.Rev.E **92**,022910(2015).
- [2] H.Nishimori, N.J.Suematsu, S.Nakata, J.Phys.Soc.Jpn. **86**,101012(2017).
- [3] Y.Matsuda, K.Ikeda, Y.Ikura, H.Nishimori, N.J.Suematsu, J.Phys.Soc.Jpn. **88**,093002(2019).
- [4] M.Nagayama, S.Nakata, Y.Doii, Y.Hayashima, Physica D **194**,151(2004).
- [5] Y.Koyano, T.Sakurai, H.Kitahata, Phys. Rev. E **94**,042215(2016).
- [6] A.Kirchner, K. Nishinari, A. Schadschneider, Phys. Rev. E **67**,056122(2003).
- [7] A.Kamimura, T.Ohira, New J.Phys. **12**,053013(2010).
- [8] C.Oosawa 2020 年度日本数理生物学会 (JSMB2020),PS25,p126.

A 解析解

A.1 $I(1, *)$ の式

$t = 1$ における強度分布を式 (6)~(10) に示す。拡散は時間ステップ t 毎に 1 マスごと広がるため、 $t = 1$ では下に示すように、 $I(1, -2) \sim I(1, 2)$ のように 5 つの式で表現できる。

$$I(1, -2) = \frac{1}{4}\alpha^2(1-\delta)^2 f_p \quad (6)$$

$$I(1, -1) = (1-\alpha)\alpha(1-\delta)^2 f_p \quad (7)$$

$\alpha = 0$ では、樟脳粒の進行方向と逆側では、図 6 黒のように、樟脳強度は 0 になる。

$$I(1, 0) = (1-\alpha)^2(1-\delta)^2 f_p + \frac{1}{4}\alpha^2(1-\delta)^2 f_p + \frac{1}{2}\alpha(1-\delta) \left(f_p + \frac{1}{2}\alpha(1-\delta)f_p \right) \quad (8)$$

$$I(1, 1) = \frac{1}{2}(1-\alpha)\alpha(1-\delta)^2 f_p + (1-\alpha)(1-\delta)(f_p + \frac{1}{2}\alpha(1-\delta)f_p) \quad (9)$$

$x = 1$ に樟脳粒がある。移動確率の計算に用いられるのは、 $I(1, 0)$ と $I(1, 2)$ である。

$$I(1, 2) = \frac{1}{2}\alpha(1-\delta) \left(f_p + \frac{1}{2}\alpha(1-\delta)f_p \right) \quad (10)$$

下線部で示した式 (8) の第 3 項は、式 (10) に一致する。つまり、 $\delta \neq 1$ では、常に $I(1, 0) > I(1, 2)$ となる。

A.2 $I(2, *)$ の式

$t = 2$ における樟脳強度分布を式 (11)~(17) に示す。拡散は時間ステップ t 毎に 1 マスごと広がるため、 $t = 2$ では下に示すように、 $I(2, -3) \sim I(2, 3)$ に示すように 7 つの式で表現できる。

$$I(2, -3) = \frac{1}{8}\alpha^3(1-\delta)^3 f_p \quad (11)$$

$$I(2, -2) = \frac{3}{4}(1-\alpha)\alpha^2(1-\delta)^3 f_p \quad (12)$$

$$I(2, -1) = \frac{1}{8}\alpha^3(1-\delta)^3 f_p + \frac{1}{2}\alpha(1-\delta) \left(\frac{1}{4}\alpha^2(1-\delta)^2 f_p + (1-\alpha)^2(1-\delta)^2 f_p + \frac{1}{2}\alpha(1-\delta) \left(\frac{1}{2}\alpha(1-\delta)f_p + f_p \right) \right) + (1-\alpha)^2\alpha(1-\delta)^3 f_p \quad (13)$$

$\alpha = 0$ では、樟脳粒の進行方向と逆側では、図 6 黒のように、樟脳強度は 0 になる。

$$I(2, 0) = \frac{1}{2}(1-\alpha)\alpha^2(1-\delta)^3 f_p + (1-\alpha)(1-\delta) \left(\frac{1}{4}\alpha^2(1-\delta)^2 f_p + (1-\alpha)^2(1-\delta)^2 f_p + \frac{1}{2}\alpha(1-\delta) \left(\frac{1}{2}\alpha(1-\delta)f_p + f_p \right) \right) + \frac{1}{2}\alpha(1-\delta) \left(\frac{1}{2}(1-\alpha)\alpha(1-\delta)^2 f_p + (1-\alpha)(1-\delta) \left(\frac{1}{2}\alpha(1-\delta)f_p + f_p \right) \right) \quad (14)$$

$$I(2, 1) = \frac{1}{2}\alpha(1-\delta) \left(\frac{1}{4}\alpha^2(1-\delta)^2 f_p + (1-\alpha)^2(1-\delta)^2 f_p + \frac{1}{2}\alpha(1-\delta) \left(\frac{1}{2}\alpha(1-\delta)f_p + f_p \right) \right) + (1-\alpha)(1-\delta) \left(\frac{1}{2}(1-\alpha)\alpha(1-\delta)^2 f_p + (1-\alpha)(1-\delta) \left(\frac{1}{2}\alpha(1-\delta)f_p + f_p \right) \right) + \frac{1}{2}\alpha(1-\delta) \left(\frac{1}{2}\alpha(1-\delta) \left(\frac{1}{2}\alpha(1-\delta)f_p + f_p \right) + f_p \right) \quad (15)$$

$$I(2, 2) = \frac{1}{2}\alpha(1-\delta) \left(\frac{1}{2}(1-\alpha)\alpha(1-\delta)^2 f_p + (1-\alpha)(1-\delta) \left(\frac{1}{2}\alpha(1-\delta)f_p + f_p \right) \right) + (1-\alpha)(1-\delta) \left(\frac{1}{2}\alpha(1-\delta) \left(\frac{1}{2}\alpha(1-\delta)f_p + f_p \right) + f_p \right) \quad (16)$$

$x = 2$ に樟脳粒がある。移動確率の計算に用いられるのは、 $I(2, 1)$ と $I(2, 3)$ である。

$$I(2, 3) = \frac{1}{2}\alpha(1-\delta) \left(\frac{1}{2}\alpha(1-\delta) \left(\frac{1}{2}\alpha(1-\delta)f_p + f_p \right) + f_p \right) \quad (17)$$

下線部で示した式 (15) の右辺第 3 項は、式 (17) に一致する。つまり、 $\delta \neq 1$ では、常に $I(2, 1) > I(2, 3)$ となる。