希薄系におけるマイクロスイマーのレオロジー挙動

化学プロセス工学コース　移動現象論分野　荊尾太雅

マイクロスイマーとは，粘性流体中を自己泳動する微小な物体の総称であり工学的な応用性に富んでいる．本研究では squirmer モデルを用いた直接数値計算を行い，希薄系での bottom heavy な性質を付加したマイクロスイマーの挙動を調べた．

1．緒言

マイクロスイマーの集団的な動的挙動を理解することは，バイオフィルムの形成の説明や DDS への応用などの工学的な用途に有用である．本研究では，直接数値計算を用いて，希薄系における，重心が球の中心からずれた (bottom heavy) マイクロスイマーの挙動を調べることを目的とした．

2．計算手法

マイクロスイマーのモデルとして，squirmer モデルを用いた．このモデルでは，粒子を球形とみなし，粒子表面において粒子と流体の速度差が式 (1) で表される境界条件を用いる [1]．

$$\boldsymbol{u}^s = B_1\left(\sin\theta + \frac{\alpha}{2}\sin 2\theta\right)\hat{\boldsymbol{\theta}} \tag{1}$$

ここで，$\boldsymbol{u}^s$ はスイマー表面の流れ場，B_1 はフーリエ級数の係数第 1 項，θ は動径ベクトルと推進方向との間の極角，$\hat{\boldsymbol{\theta}}$ は単位極角ベクトル，α はスイマーの種類を決定する定数である．$\alpha > 0$ では Puller 型，$\alpha = 0$ では Neutral 型，$\alpha < 0$ では Pusher 型を示す．直接数値計算は，squirmer モデルを SPM に組み込んで行った．SPM は固体と流体の 2 相のダイナミクス問題を効率的に計算する方法である [2]．流体の支配方程式として非圧縮性流体における Navier-Stokes 方程式 (2) を用いた．また，スイマーの時間発展は Newton-Euler 方程式 (4) で与えた．

1．Navier-Stokes 方程式

$$\begin{gathered}\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{u} = 0\\ \rho_{\mathrm{f}}\left(\partial_{\mathrm{t}} + \boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{\nabla}\right)\boldsymbol{u} = \boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{\sigma} + \rho_{\mathrm{f}}\left(\phi\boldsymbol{f}_{\mathrm{p}} + \boldsymbol{f}_{\mathrm{sq}} + \boldsymbol{f}_{\mathrm{s}}\right)\end{gathered} \tag{2}$$

ここで，t は時間，$\boldsymbol{u}$ は全速度場，ρ_{f} は流体の質量密度，$\boldsymbol{\sigma}$ は流体の応力テンソル，$\phi\boldsymbol{f}_{\mathrm{p}}$ は粒子の剛直性を保証する体積力，$\boldsymbol{f}_{\mathrm{sq}}$ はスイマーの泳動による力，$\boldsymbol{f}_{\mathrm{s}}$ は式 (3) のように表される速度を流体に生じさせる外力である．

$$v_x(y) = \begin{cases}\dot{\gamma}(-y - L_y/2) & (-L_y/2 < y \le -L_y/4)\\ \dot{\gamma}y & (-L_y/4 < y \le L_y/4)\\ \dot{\gamma}(-y + L_y/2) & (L_y/4 < y \le L_y/2)\end{cases} \tag{3}$$

ここで，$\dot{\gamma}$ はせん断速度，y は系の y 座標，L_y は系の y 軸方向の大きさである．

2．Newton-Euler 方程式

$$\begin{gathered}\dot{\boldsymbol{R}}_i = \boldsymbol{V}_i, \quad \dot{\boldsymbol{Q}}_{\boldsymbol{i}} = \mathrm{skew}(\boldsymbol{\Omega}_{\boldsymbol{i}})\cdot\boldsymbol{Q}_{\boldsymbol{i}}\\ M_p\dot{\boldsymbol{V}}_i = \boldsymbol{F}_i^{\mathrm{H}}, \quad \boldsymbol{I}_p\cdot\dot{\boldsymbol{\Omega}}_i = \boldsymbol{N}_i^{\mathrm{H}} + \boldsymbol{N}_i^{\mathrm{b.h.}}\end{gathered} \tag{4}$$

ここでスイマー i について，$\boldsymbol{R}_i$ は位置，$\boldsymbol{V}_i$ は速度，$\boldsymbol{Q}_{\boldsymbol{i}}$ は回転行列，$\boldsymbol{\Omega}_i$ は角速度，$\mathrm{skew}(\boldsymbol{\Omega}_{\boldsymbol{i}})$ は $\boldsymbol{\Omega}_i$ の交代行列を示す．M_{p} と $\boldsymbol{I}_{\mathrm{p}}$ はそれぞれスイマーの質量と慣性モーメントを表す．$\boldsymbol{F}_i^{\mathrm{H}}$ は流体から受ける力，$\boldsymbol{N}_i^{\mathrm{H}}$ は流体から受けるトルクである．球形粒子の場合，N^{H} は式 (5) で表される．

$$\boldsymbol{N}^{\mathbf{H}} = 4\pi\mu a^3\dot{\gamma} \tag{5}$$

ここで，μ は流体の粘度，a は球形粒子の半径，$\dot{\gamma}$ はせん断速度である．$\boldsymbol{N}_i^{\mathrm{b.h.}}$ は bottom heavy な性質により生じるトルクで，式 (6) によって計算される [3]．

$$\boldsymbol{N}^{\mathrm{b.h.}} = \frac{4}{3}\pi a^3\rho h\boldsymbol{e}\times\boldsymbol{g} \tag{6}$$

ここで，a はスイマーの半径，ρ は流体の密度，h は球の中心と重心との距離，$\boldsymbol{e}$ はスイマーの方向ベクトル，$\boldsymbol{g}$ は重力である．

3．結果と考察

一つの直径 5Δ のスイマーについて，$64\Delta\times128\Delta\times64\Delta$ の矩形システムでシミュレーションを行った．このシステムでは，y 軸方向に重力がかかり，x 軸方向にせん断がかかっている．ここで，Δ は格子間隔と単位長さである．通常の球形粒子と Puller 型/Pusher 型の 3 種について，せん断の大きさと粒子の進行方向および回転の有無を表したものが Fig.1 である．

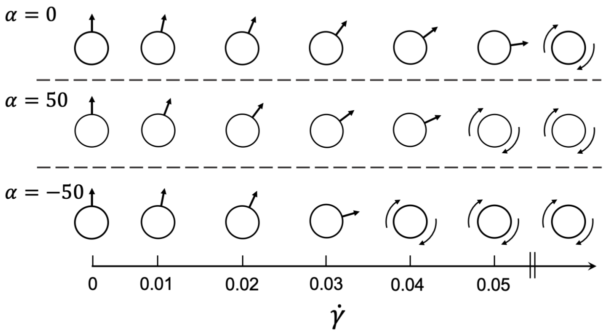

Fig. 1 Simulation snapshots

ここで，$\dot{\gamma}$ はせん断速度を表す．矢印は粒子の進行方向を表し，曲がった矢印は粒子が回転していることを表す．粒子にかかるトルクのうち $N^{\mathrm{b.h.}}$ が支配的な時，粒子の進行方向がある角度で固定され，N^{H} が支配的な時，粒子は回転すると考えられるが，その傾向が読み取れる．球形粒子の場合，シミュレーションによって分かった粒子の進行方向が固定されるギリギリの $\dot{\gamma}$ の値と，式 (5) と (6) の和が 0 であるとして求まる $\dot{\gamma}$ がよく一致していることが確認できた．

4．結言および今後の展望

マイクロスイマーのモデルに squirmer モデルを採用し，スイマーに bottom heavy な性質によるトルクの影響を付与した上で粒子の挙動を解析した．その結果，通常の球形粒子については理論的な値をよく示すことを確認できた．流体の粘度に注目して解析を行うこと，およびスイマーの体積分率が大きい場合について解析を行うことが今後の課題である．

参考文献

[1] N. Oyama，J. J. Molina, and R. Yamamoto, *Phys. Rev. E*, **112**, 1389-1397 (2017).

[2] Y. Nakayam and R. Yamamoto, *Phys. Rev. E*, **71**，036707 (2005).

[3] T. Ishikawa and T. J. Redley, J. *Fluid Mech.*, **588** (2007).

指導教員名　　　山本　量一　　　　　　　印