

マイクロスイマー 2 成分系のダイナミクス

化学プロセス工学コース 移動現象論分野 堀米厚志

マイクロスイマーとは、バクテリアのように流体中を自己推進する微小な物体の総称である。工学的にも応用性に富んでいるが、それらの集団運動を予測し制御するためには複雑な流体力学的相互作用を考慮する必要があるが、未だに理解が進んでいない。本研究では、squirmer モデルを用いた直接数値計算を行い、拘束空間内における Puller 型/Pusher 型 2 成分系の挙動を調べた。

1. 緒言

マイクロスイマーの拘束空間内における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標的薬物送達システムの設計などの工学的な用途に有用である。単成分系マイクロスイマーの動的挙動については解析されており、特に Puller 型は拘束空間内において進行波のように特徴的な集団運動を示すことが判明している^[1]。本研究では、直接数値計算を用いて、拘束空間内における Puller 型/Pusher 型 2 成分系の挙動を調べることが目的とした。

2. 計算手法

マイクロスイマーのモデルとして、squirmer モデルを採用した。このモデルでは、球状粒子で異なる泳動形態を表現するために、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]。

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

ここで、 \mathbf{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、 α はスイマーのタイプを与える定数、 θ は動径ベクトルと推進方向との間の極角、 $\hat{\theta}$ は単位極角ベクトルである。 $\alpha < 0$ では推進方向に伸張流場を生成する Pusher 型、 $\alpha = 0$ で潜在的な流れ場で泳ぐ Neutral 型、 $\alpha > 0$ で推進方向に収縮流場を生成する Puller 型を示す (Fig.1)^[1]。

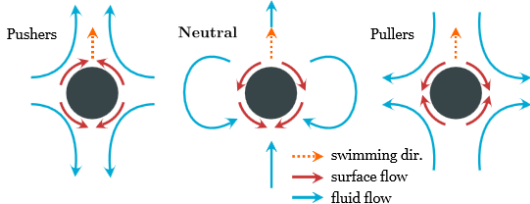


Fig. 1 Schematic representation of the squirmer model

直接数値計算は、squirmer モデルを SPM に組み込んで行った。SPM は流体力学を用いた固体/流体 2 相ダイナミクス問題の効率的な計算方法である^[2]。流体の支配方程式として非圧縮性流体における Navier-Stokes 方程式を用い、スイマーの時間発展は Newton-Euler 方程式 (3) で与える。

1. Navier-Stokes 方程式

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (2)$$

$$\rho_f (\partial_t + \mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \rho_f (\phi_p \mathbf{f}_p + \mathbf{f}_{sq}) \quad (2)$$

ここで、 \mathbf{u} は全速度場、 ρ_f は流体の質量密度、 t は時間、 $\boldsymbol{\sigma}$ は応力テンソル、 ϕ_p は $[0, 1]$ の値を連続的に持つ界面関数、 $\phi_p \mathbf{f}_p$ は粒子の剛直性を保証する体積力、 \mathbf{f}_{sq} は流体との速度差を生じる力である。

2. Newton-Euler 方程式

$$\dot{\mathbf{R}}_i = \mathbf{V}_i, \quad \dot{\mathbf{Q}}_i = \text{skew}(\boldsymbol{\Omega}_i) \cdot \mathbf{Q}_i, \quad (3)$$

$$M_p \dot{\mathbf{V}}_i = \mathbf{F}_i^H + \mathbf{F}_i^C, \quad \mathbf{I}_p \cdot \dot{\boldsymbol{\Omega}}_i = \mathbf{N}_i^H$$

ここでスイマー i について、 \mathbf{R}_i は位置、 \mathbf{V}_i は速度、 $\boldsymbol{\Omega}_i$ は角速度を示す。 \mathbf{Q}_i は回転行列、 M_p はスイマーの

質量、 \mathbf{F}_i^H は流体力、 \mathbf{F}_i^C は粒子間直接的相互作用による力、 \mathbf{I}_p は慣性モーメント、 \mathbf{N}_i^H はトルクである。

3. 結果と考察

直径 4Δ 、 $\alpha \pm 0.5$ の squirmer について、体積分率を 0.13 として $64\Delta \times 160\Delta \times 64\Delta$ の矩形システムでシミュレーションを行った。このシステムは x 方向と z 方向には周期的であるが、 y 方向には $y = 1\Delta$ と $y = 159\Delta$ の位置に配置された球状粒子の平行壁に挟まれている (Fig.2)。ここで、 Δ は格子間隔と単位長さである。また、Puller 型/Pusher 型 2 成分の組成比を変えて計算を行った場合の局所密度の時間発展を Fig.3 に示す。

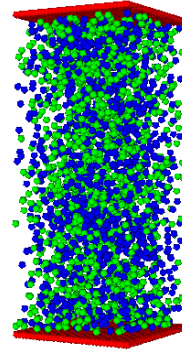


Fig. 2 Simulation snapshot

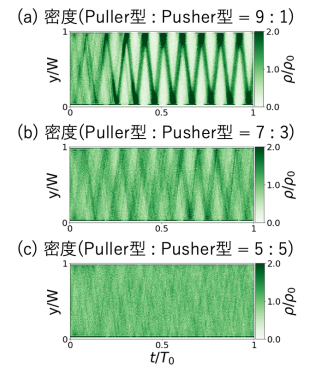


Fig. 3 Time evolution of local density

ここで、 $W (= 160\Delta)$ は y 方向のシステムサイズ、 T_0 は全計算時間、 ρ は局所密度、 ρ_0 は平均密度である。Fig.3 より、拘束空間内における Puller 型の分率が高いほど、より進行波が明確に発生することが確認できた。そして、Puller 型の分率が低くなるにつれて進行波の発生は抑制され、次第に進行波の発生が確認できなくなることも確認された。Puller 型の分率が高いときは同方向に推進する Puller 型の個体数も多く、そのため Puller 型が運動するに従って生じる推進方向への収縮流場の影響を多大に受けて互いに引き付け合うことが、squirmer 全体が疎密波のような集団運動を引き起こす要因になるのではないかと考えられる。

4. 結言

マイクロスイマーのモデルに squirmer モデルを採用し、平行壁に挟まれた矩形システムの中でマイクロスイマー 2 成分系の局所密度の時間発展の解析を行った。その結果、Puller 型の分率が多いほどシステム内における疎密波の形成傾向が強まることを定量的に示した。

参考文献

- [1] N.Oyama, 博士論文, (2017).
- [2] Y. Nakayama, K. Kim, and R. Yamamoto, *The European Physical Journal E*, **26**, 361-368 (2008).