希薄系でのマイクロスイマーのダイナミクス

化学プロセス工学コース　移動現象論分野　荊尾太雅

マイクロスイマーとは，バクテリアのように粘性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り，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，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．本研究では，直接数値計算を用いて，希薄系における，重心が中心からずれた bottom heavy な性質を持つ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 モデルを採用した．このモデルでは，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，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，$\hat{\boldsymbol{\theta}}$ 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．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 (2) を用い，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

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

ここで，t は時間，$\boldsymbol{u}$ は全速度場，$\rho_{\rm f}$ は流体の質量密度，$\boldsymbol{\sigma}$ は流体の応力テンソル，ϕ は [0，1] の値を連続的に持つ界面関数，$\phi\boldsymbol{f}_{\rm p}$ は粒子の剛直性を保証する体積力，$\boldsymbol{f}_{\rm sq}$ はスイマーの泳動による力，$\boldsymbol{f}^{\rm s}$ 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

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

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，${\rm skew}(\boldsymbol{\Omega}_{\boldsymbol{i}})$ は $\boldsymbol{\Omega}_i$ の交代行列を示す．$M_{\rm p}$ と $\boldsymbol{I}_{\rm p}$ はそれぞれスイマーの質量と慣性モーメントを表す．$\boldsymbol{F}_i^{\rm H}$ は流体から受ける力，$\boldsymbol{N}_i^{\rm H}$ は流体から受けるトルクである．球形粒子の場合 $N^{\rm H}$ は式 (5) で表される．

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

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．$\boldsymbol{N}_i^{\rm b.h.}$ は bottom heavy な性質によって生じるトルクで，式 (6) によって計算される [3]．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．

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

3. 結果と考察

直径 5Δ の一つのスイマーについて，64$\Delta\times$128$\Delta\times$64Δ 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 Pusher 型/Puller 型の 3 種について，せん断の大きさと粒子の進行方向の関係を表したものが図である．

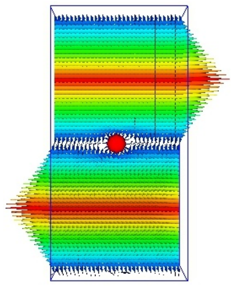

Fig. 1 Simulation snapshot

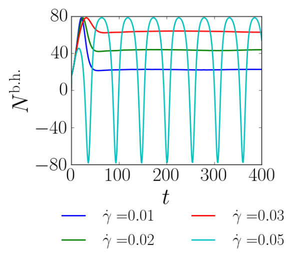

Fig. 2 Time evolution of bottom heaviness torque

ここで，$\dot\gamma$ はせん断速度を表す．球形粒子の場合，式 (5) と (6) が等しいとして求まる $\dot\gamma$ と，シミュレーション結果がよく一致していることが確認できた．bottom heavy な性質から生じるトルクの項を新たに追加することで，系にかかる重力の逆向きに進もうとするスイマーの性質を再現することができた．

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).
[3] hoge

指導教員名　　山本　量一　　　　印