せん断場における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、せん断場での 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、せん断場における、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].

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

ここで、 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.

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

$$\nabla \cdot \boldsymbol{u} = 0$$

$$ho_{\mathrm{f}} \left(\partial_{\mathrm{t}} + \boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{\nabla} \right) \boldsymbol{u} = \boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{\sigma} +
ho_{\mathrm{f}} \left(\phi \boldsymbol{f}_{\mathrm{p}} + \boldsymbol{f}_{\mathrm{sq}} + \boldsymbol{f}^{\mathrm{shear}} \right)$$

ここで、t は時間、u は全速度場、 $\rho_{\rm f}$ は流体の質量密度、 σ 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、 $\phi f_{\rm p}$ は粒子の剛直性を保証する体積力、 $f_{\rm sq}$ はスイマーの泳動による力、 $f^{\rm shear}$ 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.

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

2. Newton-Euler 方程式

$$\dot{\boldsymbol{R}}_{i} = \boldsymbol{V}_{i}, \quad \dot{\boldsymbol{Q}}_{i} = \operatorname{skew}(\boldsymbol{\Omega}_{i}) \cdot \boldsymbol{Q}_{i}$$

$$M_{p}\dot{\boldsymbol{V}}_{i} = \boldsymbol{F}_{i}^{H}, \quad I_{p} \cdot \dot{\boldsymbol{\Omega}}_{i} = \boldsymbol{N}_{i}^{H} + \boldsymbol{N}_{i}^{\text{b.h.}}$$
(4)

ここでスイマーiについて, R_i は位置, V_i は速度, Q_i は回転行列, Ω_i は角速度, $\mathrm{skew}(\Omega_i)$ は Ω_i の交代行列を示す. M_p と I_p はそれぞれスイマーの質量と慣性モーメントを表す. F_i^H は流体から受ける力, N_i^H は流体から受けるトルク, $N_i^\mathrm{b.h.}$ は bottom heavy な性質によって生じるトルクである.

3. 結果と考察

直径 5Δ の一つのスイマーについて、 $64\Delta \times 128\Delta \times 64\Delta$ の矩形システムでシミュレーションを行った. このシステムでは、x 軸方向にせん断がかかっている (Fig.1). ここで、 Δ は格子間隔と単位長さである. また、粒子にかかる bottom heavy な性質によるトルクの時間発展を Fig.??に示す.

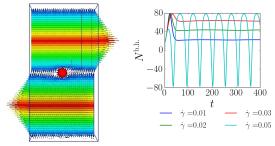


Fig. 1 Simulation snap- Fig. 2 Time evolution of bottom heaviness torque

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.ここで,である.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).