

複雑流体としての生物粒子分散系の数値解析

大阪大学大学院 工学研究科 機械工学専攻 山本 剛宏

Takehiro Yamamoto

Division of Mechanical Engineering, Graduate School of Engineering,
Osaka University

1 緒言

複雑流体 (complex fluids) は、流体内部に分子・原子レベルよりも大きな構造を持つ流体の総称で、高分子流体、液晶、ミセル分散系 (界面活性剤溶液)、コロイド粒子分散系、エマルションなどがその代表例である。複雑流体は、水や空気などのニュートン流体とは異なる特異な流動挙動を示すことが知られている。そして、そのような特異な流動挙動は、流動中の流体内部構造の変化 (流動誘起構造) に起因すると考えられる。したがって、近年の複雑流体の流動解析では、流体内部構造を考慮した解析が注目されている。実験では、光学測定による構造・分子配向の測定や流動複屈折の測定が行われている。数値解析では、マイクロシミュレーション、メソスケールシミュレーションやそれらとマクロ流動解析のカップリング計算などが行われている。

一方、生物の集団運動 [1] やアクティブマターの運動 [2] においても、様々な構造が形成されることが知られている。それらの構造の中には、複雑流体の内部構造で見られるものと類似した構造が見られたり、構造形成のメカニズムに、複雑流体における構造形成と共通したものも見られる。通常のコロイド粒子分散系では、粒子は流体からの力や粒子間の相互作用によって運動する、言わば受動粒子であるのに対して、微生物等を一種の粒子と考えれば、それは自ら運動することができる能動粒子と呼ぶことができる。微生物等の生物の懸濁液を運動能を有する能動粒子の分散系として捉えることで、複雑流体の流動解析手法を適用し、解析モデルを作成することが可能ではないか、というのが本研究遂行の動機である。

ここでは、走光性微細藻類を取りあげ、筆者らがこれまでに複雑流体の流動誘起構造の解析に適用してきた MPCD (Multi Particle Collision Dynamics) 法的一种である SRD (Stochastic Rotation Dynamics) 法を用いた走光性微細藻類分散系の数値解析モデルを提案し、それを用いた計算例を紹介する。

2 SRD 法による走光性微細藻類分散系のモデル

2.1 走光性

ここでは、走光性微細藻類を光量によって移動速度を変える能動粒子として表現する。流路中の微細藻類分散系に外部から照射された光は、微細藻類により一部が吸収され、流路内の光量は照射光量から減衰する。ここでは、Lambert-Beer 則 (1) により流路内の光量を計算した [3, 4, 5]。

$$I(z) = I_S \exp\left(-\alpha \int_{\gamma} n ds\right) \quad (1)$$

ここで、 z は光を照射する壁面からの距離、 I_S は光源の光量、 α は減衰係数、積分 $\int_{\gamma} ds$ は光を照射した流路壁面から流路内の位置 z までの線積分を表す。微細藻類粒子の速度 v_{photo}^{n+1} は次式で与えられる。

$$v_{photo}^{n+1} = w_c \langle \mathbf{p} \rangle \quad (2)$$

$$\langle \mathbf{p} \rangle = T(I^*) \hat{\mathbf{z}} \quad (3)$$

ここで、 w_c は微細藻類の走光性による最大速度を示す定数、 $\hat{\mathbf{z}}$ は光源方向の単位ベクトルである。 I^* は後述の $T(I)$ が最小値となるときの値が1となるように正規化した光量である。 $T(I^*)$ は次式で定義される。

$$T(I^*) = 0.8 \sin \left[\frac{3}{2} \pi \chi(I^*) \right] - \sin \left[\frac{1}{2} \pi \chi(I^*) \right] \quad (4)$$

$$\chi(I^*) = I^* \exp[\beta(I^* - 1)] \quad (5)$$

ここで、 β は定数である。 $T(I^*) = 0$ となる光量 I^* において速度 v_{photo} はゼロとなる。図1に $\beta = -0.1$ のときの $T(I^*)$ を示す。

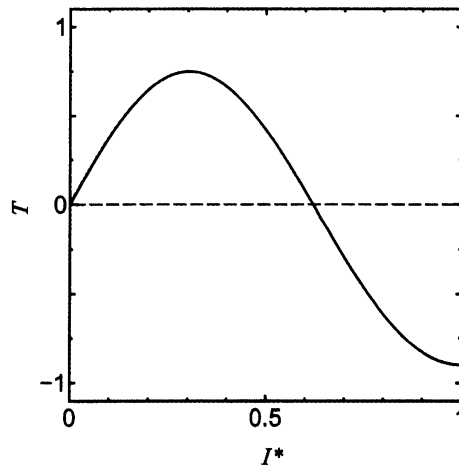


図 1: 走光性関数 $T(I^*)$ ($\beta = -0.1$)

2.2 Stochastic Rotation Dynamics 法

SRD 法では、溶媒を多数の仮想的な質点粒子（溶媒粒子）の集まりとして表現し、計算領域を複数個の格子に分割した collision セル内で、粒子間の衝突を考える。このとき、衝突は粒子間の運動量の交換により表現する。SRD 法は、粒子の衝突による運動量の交換を行う collision ステップと、粒子の移動を行う streaming ステップから成り、これらを繰り返し行うことで計算を進める。

Collision step では、粒子速度 v_{SRD} は次式で表される [6].

$$v_{SRD}^{n+1} = u^n + R(v^n - u^n) \quad (6)$$

ここで、 u は格子内の質量中心の速度ベクトル、 R はランダムな方向への一定角度の回転を表す行列である。ただし、同一格子内においては各粒子の回転の方向は同じにする。回転の角度は溶媒の動粘度、格子幅、時間刻み、格子あたりの粒子数に関係して決定される。

Streaming step では、式 (7) に基づいて溶媒粒子の位置 r を更新する。

$$r^{n+1} = r^n + v_{SRD}^n \Delta t \quad (7)$$

ここで、 Δt は時間刻みである。

2.3 カップリング

微細藻類粒子を仮想流体粒子の一部として扱い、collision ステップで微細藻類にも擬似的な衝突を行わせる。そして、微細藻類粒子の運動の計算と溶媒粒子の運動の計算をカップリングする。このとき、溶媒粒子の速度更新は次式により行う。

$$v_s^{n+1} = u^n + R(v_s^n - u^n) \quad (8)$$

$$u^n = \left(\sum_{solvent}^{grid} m_s v_s + \sum_{algae}^{grid} m v \right) / \left(\sum_{solvent}^{grid} m_s + \sum_{algae}^{grid} m \right) \quad (9)$$

ここで、 v_s 、 m_s は溶媒粒子の速度と質量、 v 、 m は微細藻類粒子の速度と質量を表す。また、総和記号 $\sum_{solvent}^{grid}$ 、 \sum_{algae}^{grid} は、それぞれ collision セル内における溶媒粒子、微細藻類粒子に関する総和を表す。また、微細藻類粒子の速度 v は、次式により更新する。

$$v^{n+1} = u^n + R(v^n - u^n) + v_{photo}^{n+1} \quad (10)$$

Streaming ステップでは、微細藻類粒子と溶媒粒子について、それぞれ

$$r_s^{n+1} = r_s^n + v_s^n \Delta t \quad (11)$$

$$r^{n+1} = r^n + v^n \Delta t \quad (12)$$

により位置の更新を行う。ここで、 r_s 、 r は溶媒粒子、微細藻類粒子の位置ベクトルを示す。

2.4 流路内流れ

数値解析は図 2 に示すような 2 次元平行平板間流れに対して行った。座標軸は流れ方向に x 軸、速度勾配方向に z 軸をとり、計算領域はそれぞれの方向に L 、 H の長方形領域を考えた。境界条件として、壁面ですべりなし境界条件を与えるために、各粒子に対して bounce-back 条件を適用する。また、流れ方向に周期境界条件を考え、上流側と下流側の境界では、各粒子に対して drawn-back 条件を与える。計算領域は 32×32 の collision セルに分割した。

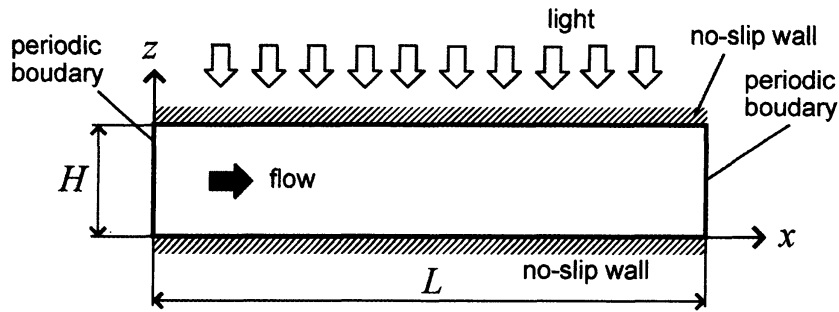


図 2: 流路概形と境界条件

圧力駆動流れを計算するために、圧力勾配の大きさに相当する仮定の加速度 g を各粒子に適用する。このとき、式 (8) に後述の仮定加速度 g を導入して

$$\mathbf{v}_s^{n+1} = \mathbf{u}^n + R(\mathbf{v}_s^n - \mathbf{u}^n) + g\Delta t \quad (13)$$

とする。主流方向に一定の圧力勾配 $-dp/dx$ を考える。このとき、溶媒粒子にはたらく力との釣り合いを考えると、加速度 g の大きさは、

$$g = -\frac{1}{\rho} \frac{dp}{dx} \quad (14)$$

で与えられる。ここで、 ρ は流体の密度である。したがって、ニュートン流体の平均速度 U の 2 次元平行平板間流れを SRD 法を用いて再現するためには、

$$g = \frac{12\nu}{H^2} U \quad (15)$$

となる。ここで、 ν は溶媒の動粘度である。

また、温度一定の条件を満たすようにサーモスタットを用いて、溶媒粒子速度のスケールリングを行った。

2.5 初期条件

溶媒粒子に関しては、初期の位置ベクトルを一様乱数を用いてランダムに配置する。初期速度ベクトルは、分散が $k_B T/m_s$ となるような Maxwell-Boltzmann 分布から各速度成分を与える。藻類粒子の初期の位置ベクトルも溶媒粒子と同様に一様乱数を用いて行うが、初期の速度ベクトルは $\mathbf{0}$ とする。

3 結果と考察

モデルパラメーターと計算条件を表 1 に示す。微細藻類に関するパラメーターは文献値 [7, 8] を参考に決定した。周囲流体には水を想定した値を用いている。光は $z=H$ の壁面側から一様に照射し、壁面上の光度を I_s^* とする。

表 1: モデルパラメーターおよび計算条件

Parameters	Symbols	Values
channel length (cm)	L	5
channel height (cm)	H	1
normalized light intensity	I_s^*	0.4, 0.6, 1
number of algal particles	N	2×10^8
number of solvent particles per cell	M_s	20
mass of an algal particle (g)	m	5.25×10^{-10}
density of a solvent (g/cm ²)	ρ	1.0
mean free path (cell/step)	λ	0.3
kinematic viscosity of solvent (cm ² /s)	ν	8.93×10^{-3}
time step (s/step)	Δt	1.0×10^{-2}
extinction coefficient	α	9.63×10^{-6}
parameter for T	β	9.63×10^{-6}
velocity scale of algae (cm/s)	w_c	100×10^{-4}

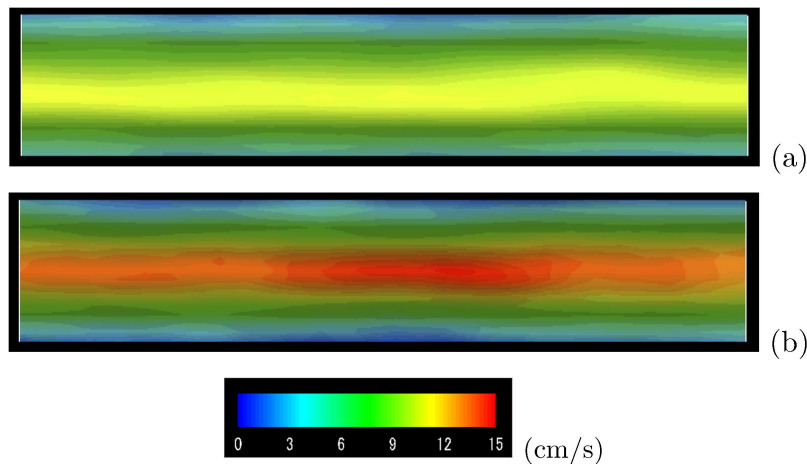


図 3: 流れ方向速度 u の分布図 ($-dp/dx=0.235$ Pa/m, $I_s^*=0.4$, $N=2 \times 10^8$, $t=(a)$ 0.6 s, (b) 10 s)

図 3 に $-dp/dx=0.235$ Pa/m, $I_s^*=0.4$, $N=2 \times 10^8$ のときの流れ方向流速 u の分布を示す。走光性により z 方向に微細藻類の密度分布が生じ、流れ方向に微細藻類の密度分布が変化するために、速度分布のうねりが現れている。

図 4, 5 に $-dp/dx=0.0586, 0.117$ Pa/m, $I_s^*=0.6, 1$, $N=2 \times 10^8$ のときの微細藻類の数密度分布と流れ方向速度分布を示す。これらは計算領域の中央における分布の時間平均を取ったものである。ここで、数密度は初期平均数密度 n_0 で規格化し、速度分布は時間平均速度 U_{avg} を初期平均速度 U で規格化している。また、図 5 中の破線はニュートン流体

の速度分布を示している。図4に示すように、圧力勾配の絶対値が小さいほど、数密度分布が広い分布になっていることが分かる。本計算条件では、数密度分布は流路中央付近にピークがあるが、非対称となり、 z の大きい側に分布が偏っている。数密度分布に対応して、速度分布も非対称になっている。また、数密度が高くなる中央付近で平らな速度分布となり、shear-thinning 粘性を有する非ニュートン流体の速度分布と類似の形状になっている。

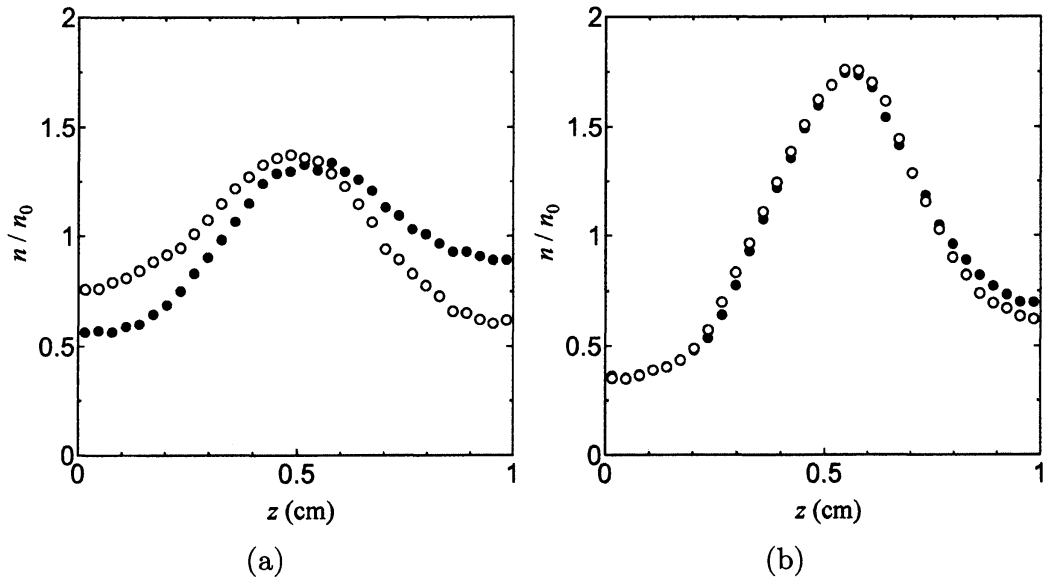


図4: 数密度分布: $-dp/dx=(a)$ 0.0586, (b) 0.117 Pa/m, $N=2 \times 10^8$, $\circ I_s^*=0.6$, $\bullet I_s^*=1$

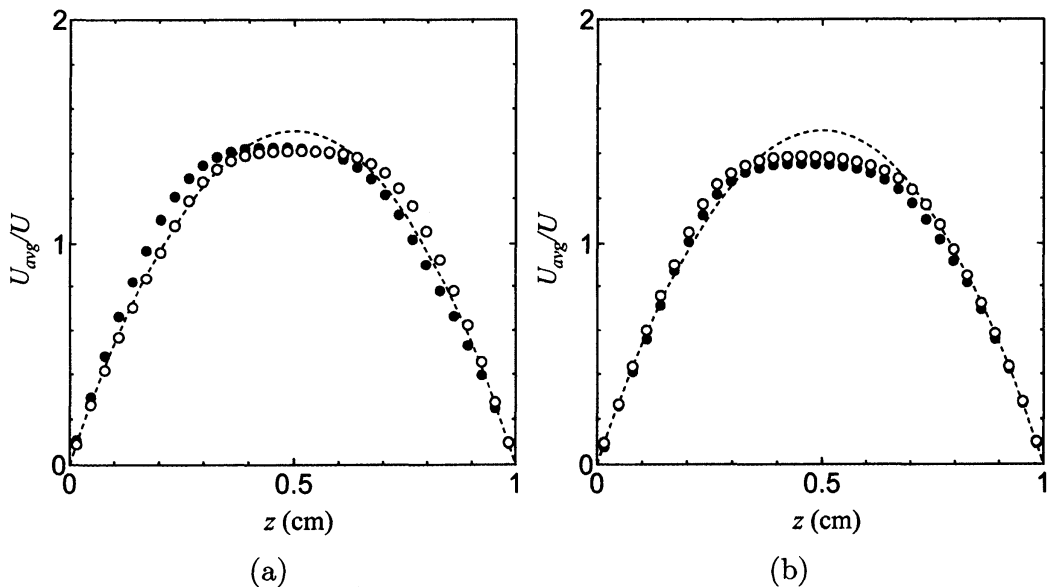


図5: 速度分布: $-dp/dx=(a)$ 0.0586, (b) 0.117 Pa/m, $N=2 \times 10^8$, $\circ I_s^*=0.6$, $\bullet I_s^*=1$

4 結言

本研究では、走光性微細藻類を走光性による運動能を有する能動粒子として捉え、その分散系について、これまでに著者らが複雑流体の流動誘起構造の解析で用いてきた数値計算手法である SRD 法を適用し、流路の片側から光を照射した場合の平行平板間流れの数値計算を行った。計算では、照射光度に依存して微細藻類の密度分布が生じ、速度分布に非対称性が現れる結果が得られた。さらに、非ニュートン流体的な速度分布形状になることが予測された。また、本手法を用いた別の計算により、2次元正方形キャビティ内の生物対流現象の再現もできている。このように、SRD 法を用いて、微生物分散流体を能動性を有する粒子の分散系として表現してその流れを計算する解析手法が有効であることが確認された。今後、本モデリングを適用して、複雑な流れ場における生物系粒子分散系の流れの数値解析を行って行く予定である。

謝辞

本研究は JSPJ 科研費 25289032 の助成を受けたものです。

参考文献

- [1] T. Vicsek and A. Zafeiris, *Phys. Rep.* 517 (2012), 71.
- [2] M.C. Marchetti et al., *Rev. Mod. Phys.*, 85 (2013), 1143.
- [3] S. Ghorai and N.A. Hill, *Phys. Fluids*, 17 (2005), 074101.
- [4] C.R. Williams and M.A. Bees, *J. Fluid Mech.*, 678 (2011), 41.
- [5] C.R. Williams and M.A. Bees, *J. Exp. Biol.*, 214 (2011), 2398.
- [6] G. Gompper et al., *Adv. Polym. Sci.*, 221 (2009), 1.
- [7] S. Rafai et al., *Phys. Rev. Lett.*, 104 (2010), 098102.
- [8] S. Mussler, et al., *Europhys. Lett.*, 101 (2013), 54004.