

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 28 年 4 月 26 日現在

機関番号：14401

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2013～2015

課題番号：25289032

研究課題名(和文) 複雑流体としての生物系粒子分散系の数値流動解析手法の開発

研究課題名(英文) Development of Numerical Flow Analysis Method for Suspension of Bio-Particles as a Complex Fluid

研究代表者

山本 剛宏 (Yamamoto, Takehiro)

大阪大学・工学(系)研究科(研究院)・准教授

研究者番号：40252621

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 9,800,000円

研究成果の概要(和文)：本研究では、微生物を自己推進能力をもつ能動粒子として捉え、微生物分散流体を能動粒子分散系と考えることにより複雑流体の一種として扱い、複雑流体に対する数値解析手法やモデリング手法を適用し、新規の数値解析モデルを提案した。ここでは、走光性を有する微細藻類の分散系に対して、連続体モデルと粒子ベースのモデルを提案した。そして、流路内流れや生物対流現象の数値シミュレーションに適用した。また、生物集団を模して、リーダー粒子の存在による流動誘起構造の制御について数値解析を行った。さらに、流動下のバイオフィルムの成長現象についても数値解析した。

研究成果の概要(英文)：We considered microorganisms as active particles that have self-propelling ability, and modeled their dispersion systems by suspensions of active particles. Then we applied several methods of numerical analysis and modeling for complex fluids to present novel numerical models for microorganism dispersion systems. In the present study, the flow of suspensions of phototactic microalgae were numerically analyzed by both continuum and particle-based approaches. In these analyses, both channel flows and bio convection were investigated. Furthermore, we studied a biomimetic control of flow-induced structures using leader particles and growth phenomena of biofilm under flows.

研究分野：非ニュートン流体力学

キーワード：複雑流体 微生物 能動粒子 数値計算

1. 研究開始当初の背景

研究開始当初、生物流体に関する研究では、微生物や魚群などの生物個体の運動を数値解析する研究は行われていたが、微生物の集団をひとつの系として扱い、系の挙動を調べるような研究はほとんど見られなかった。我々は、それまでに複雑流体の流動に関する研究を通じて、流動による複雑流体の内部構造の変化に関する解析を行っており、その経験をふまえ、生物の集団を複雑流体として捉え、自らが運動できる能動粒子の分散系としてモデル化することにより、複雑流体の流動解析手法の適用あるいは、複雑流体の見地からの新規の数値解析モデルの開発が可能であると考えた。

2. 研究の目的

粒子分散系は複雑流体の一種である。一方、微生物は自らが能動的に運動する能動粒子であり、その分散系が形成する自己組織化構造は、その能動性ゆえに多彩で、複雑流体の特徴を有している。しかし、これまでに生物系粒子の分散系を複雑流体として捉えた研究アプローチの適用の試みはほとんど見られない。

本研究の目的は、微生物などの生物系粒子の分散系を複雑流体として捉え、複雑流体に対するモデリング手法、数値シミュレーション手法を援用し、生物系粒子分散系の数値流動解析のための手法を開発することである。

3. 研究の方法

本研究は、生物系粒子分散系の表現として、連続体モデル、Multi-Particle Collision Dynamics (MPCD) 法による粒子ベースモデル、エージェントベースモデルを用いて、分散系の流動および流動誘起構造の数値シミュレーションを行った。連続体モデルおよび粒子ベースモデルでは、走光性を有する微細藻類分散系を対象とし、数値解析モデルを構築した。エージェントベースモデルを用いた研究ではアクティブネマティクス性粒子分散系の内部構造形成について調べた。その他の関連問題として、生物集団運動におけるリーダーの影響を模擬した粒子分散系の流動誘起構造制御とセルオートマトン法を用いたバイオフィルム成長現象の数値シミュレーションを行った。

4. 研究成果

(1) 連続体モデルを用いた走光性微細藻類分散系流体の流動解析, (2) MPCD 法による走光性微細藻類分散系の数値流動解析, (3) 生物集団運動におけるリーダーの影響を模擬した粒子分散系の流動誘起構造制御によるバイオメタリック機能性材料デザインの可能性の検討, (4) エージェントベース・シミュレーションによる能動粒子分散系の流体内部構造の数値シミュレーション, (5) セルオートマトン法を用いた流動下のバイ

オフィルム成長現象の数値シミュレーション、に分けて本研究の成果を示す。

(1) 連続体モデルを用いた走光性微細藻類分散系の流動解析

本テーマでは、微細藻類分散流体を連続体として扱い、微細藻類の数密度を解析変数として、数密度の時間発展方程式を流動の基礎方程式（運動方程式、連続の式）と連立し、系の流動挙動を計算した。走光性は、走光性関数を用いて表現し、流路内の光度分布は、Lambert-Beer 則に基づく光度の減衰計算により求めた。また数密度分布による見かけ粘度の変化を、粘度モデルに Krieger-Dougherty モデルを用いて表現した。

図 1.1 に、周囲から照明された円管流路内流れの計算結果の一例を示す。速度分布は微細藻類の数密度が高く粘度が高くなる領域で低下することが分かった。さらに、粘性消散が小さくなるような速度分布に変化することが分かった。本テーマの成果の詳細は、5. [雑誌論文] を参照。

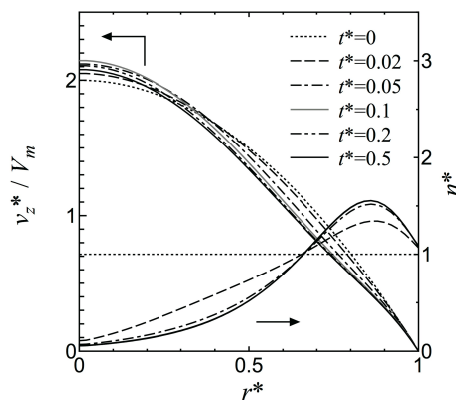


図 1.1 円管内流れにおける速度分布形状と微細藻類の数密度分布

(2) MPCD 法による走光性微細藻類分散系の数値流動解析

本テーマでは、走光性微細藻類を、光強度によって運動を変化させる能動粒子（以下、モデル藻類粒子）としてモデル化し、複雑流体の流動誘起構造の解析でも用いられている MPCD 法を用いて、モデル藻類粒子の運動を表した。MPCD 法では周囲の流体を介した粒子間の相互作用（流体力学的相互作用）を表現することが可能である。光量分布の計算では、(1)と同様に Lambert-Beer 則に基づく計算を行った。

図 2.1 に平行平板間流れの計算結果の一例を示す。上方からの光の照射で微細藻類の数密度分布に偏りが生じ、その結果、速度分布が非対称になっている。本テーマの成果は、5. [学会発表] などで報告された。

図 2.2 に生物対流 (Bio convection) の数値

シミュレーション結果の一例を示す。流路上部から光を照射すると、始め微細藻類は光合成を行うために適当な光量の位置に移動するが、微細藻類の密度集中により重力の影響で微細藻類の下降が生じる。走光性による上昇と重力による下降とのバランスが、照射する光量によって変化し、ある条件下で対流現象が起きることが確認された。生物対流は実験においても確認されている現象である。本モデルにより生物対流を再現できることが示された。本テーマの成果は、5. [学会発表]などで報告された。

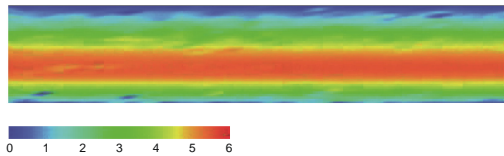


図 2.1 上方から光を照射した場合の平行平板間流れにおける流れ方向流速の分布

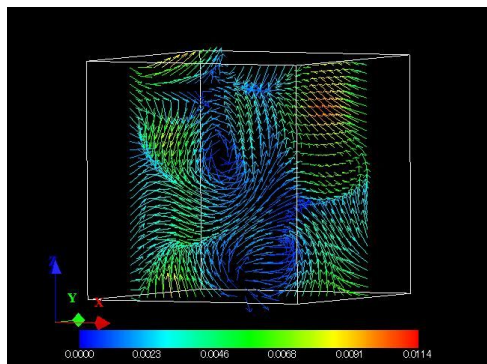


図 2.2 生物対流のスナップショット：図中の矢印は速度ベクトルの向きを、色は大きさを表している。

(3) 生物集団運動におけるリーダーの影響を模擬した粒子分散系の流動誘起構造制御によるバイオメテリック機能性材料デザインの可能性の検討

生物の集団運動においては、しばしばリーダーの存在が集団の挙動に大きく影響を及ぼすことが報告されている。また、自己推進粒子を用いたコンピューターシミュレーションでは、運動方向にバイアスかけた粒子を混ぜることにより、分岐流路における粒子分散系の流れを制御できることが示されている。これらの結果を参考に、比較的濃厚な粒子分散系に、粒子配向方向を強く制御できる少数の粒子（以下、リーダー粒子）を混入することで、系全体の粒子配向度を制御することが可能かどうかについて、コンピューターシミュレーションにより検討した。

ここでは、ディスク状粒子分散系を対象と

し、粒子間相互作用を Gay-Berne (G-B) ポテンシャルで表現したブラウン動力学シミュレーションによって計算を行った。せん断流れにおける粒子挙動を解析し、せん断流れの実現には Lees-Edwards の移動周期境界条件を用いた。ディスク状粒子は、周囲流体の流れと粒子間の相互作用の影響により回転するが、リーダー粒子は外場によって粒子配向を強く固定することが可能であり、一定の配向を保つものとする。

リーダー粒子の数密度分率 ϕ と配向秩序度 S (ランダム状態で 0, 完全配向で 1 の値をとる) との関係を図 3.1 に示す。図中の誤差棒は分散を表す。また、図 3.2 は、配向秩序度 S をリーダー粒子がない場合の $S (=S_0)$ で規格化して示したものである。ここで、諸量の無次元化は文献 [T. Yamamoto, N. Kanda, J. Non-Newtonian Fluid Mech., 181-182, 1 (2012)] のものを用いた。G-B ポテンシャルモデルパラメータおよび計算領域は、文献と同じで、無次元温度 $T^*=3$ 、無次元せん断速度 1, 10 の場合について計算を行った。

リーダー粒子を混入しない状態 ($\phi=0$) では、無次元せん断速度 1 の場合、配向秩序度は小さく、無次元せん断速度 10 の場合は、配向秩序度が比較的大きい。いずれの場合も、 ϕ が大きくなるとともに、 S の増加がみられる。したがって、リーダー粒子の混入による配向度上昇の効果がみられる。その効果は、せん断速度が小さい場合により顕著であり、配向度が、未混入時に比べて、10%の粒子をリーダー粒子とした場合に 1.63 倍に、20%の粒子をリーダー粒子とした場合に 3.36 倍になっている。

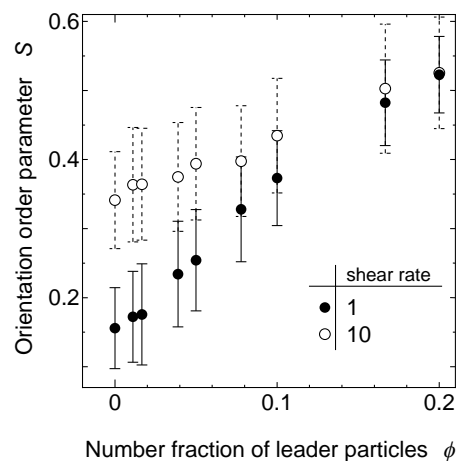


図 3.1 配向秩序パラメータ S のリーダー粒子数分率 ϕ への依存性

今回、通常のディスク状粒子間の相互作用と、リーダー粒子と通常の粒子間の相互作用の強度を同じにしているが、現実にはそれらは異なっている可能性があり、そのような場合の、リーダー粒子の影響などについてもさ

らに検討が必要である．

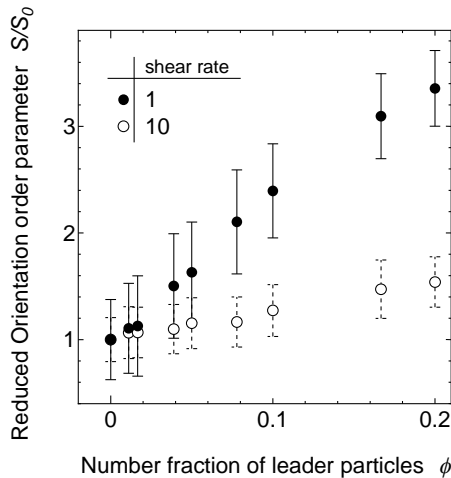


図 3.2 配向秩序パラメータ S/S_0 のリーダー粒子数分率 ϕ への依存性

(4) エージェントベース・シミュレーションによる能動粒子分散系の流体内部構造の数値シミュレーション

本テーマでは、粒子が周囲粒子との相互作用により行動を変化させるエージェントを用いて能動粒子をモデル化する手法を用いた。ここでは、他の個体との距離によって行動を変化させ、距離が近い順に、(a) 回避、(b) 並行、(c) 接近、(e) ランダムのような行動をとる粒子モデルを適用した。さらに、個体差の表現のために方向に揺らぎを与えた。エージェントは群を形成し、エージェントの配向に秩序構造が見られた。また揺らぎが大きいほど、系の配向度は低下し、ネマチック液晶における熱揺らぎと類似の効果を示すことが分かった(図 4.1)。本研究の成果は、第 16 回 複雑流体研究会(日本機械学会流体工学部門, 2015 年 10 月)で報告された。

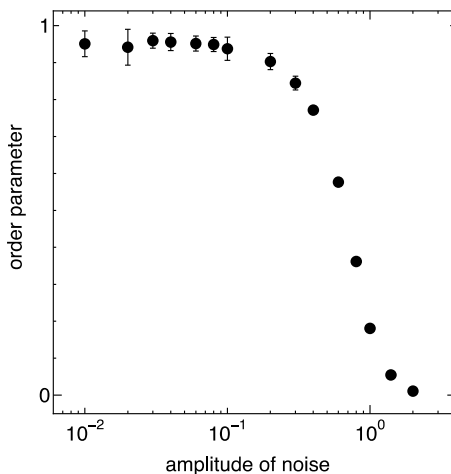


図 4.1 配向度の方向揺らぎ強度依存性

(3)の成果と併せて、複雑流体を用いた機能性材料の機能設計において、生物系粒子や生物集団において見られる相互作用を模擬した配向挙動を利用する流体内部構造の新規のデザイン手法の可能性が示唆された。

(5) セルオートマトン法を用いた流動下のバイオフィーム成長現象の数値シミュレーション

バイオフィームを形成する微生物の増殖・減衰の挙動を、セルオートマトン法を用いて模擬し、周囲流体の流動、栄養素および酸素の移流拡散を、連続体力学的手法を用いて数値計算し、両者をカップリングすることで、流動下のバイオフィームの成長挙動の数値シミュレーションを行った。

図 5.1 はメッシュ状構造上に成長したバイオフィームのスナップショットの一例である。本研究では、流路内流れやメッシュ状構造物を通過する流れにおけるバイオフィーム成長現象を扱った。

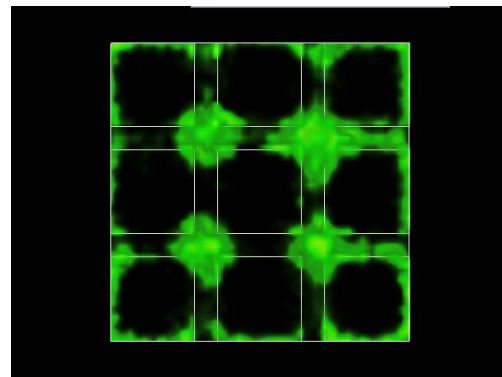


図 5.1 メッシュ状構造上のバイオフィーム成長の例

本テーマでは、流動下のバイオフィーム周囲環境と微生物個体との相互作用をセルオートマトン法を用いて簡単な規則により表現することで、複雑な成長現象を再現することが可能であり、本手法が有用であることが示された。本テーマの成果は、5. [学会発表]などで報告された。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文](計 2件)

Takehiro Yamamoto, Shinpei Hirota, and Takuya Fujiwara, A Stochastic Rotation Dynamics Model for Dilute Spheroidal Colloid Suspensions, 日本レオロジー学会誌, Vol.44, 2016 (印刷中)

Takehiro Yamamoto, A Stochastic Rotation

Dynamics Model for Dilute Spheroidal Colloid Suspensions, 日本レオロジー学会誌, Vol. 43, Nos.3-4, pp.53-62, 2015

〔学会発表〕(計21件)

藤原拓也, 南 貴之, 山本剛宏, セルオートマトン法を用いた流動下におけるバイオフィーム形成過程の数値解析, 第29回 数値流体力学シンポジウム, 2015年12月

山本剛宏, 西口隼人, Stochastic Rotation Dynamics を用いた走光性微細藻類分散流体の数値解析モデル, 第29回 数値流体力学シンポジウム, 2015年12月

藤原拓也, 南 貴之, 山本剛宏, 流動下におけるバイオフィームの成長挙動の数値シミュレーション, 第63回 レオロジー討論会, 2015年9月

中井光一, 山本剛宏, 走光性微細藻類分散系の流動挙動の数値シミュレーション, 第63回 レオロジー討論会, 2015年9月

Takehiro Yamamoto, Hayato Nishiguchi, Computational Model for Phototactic Microorganism Suspensions using Multi Particle Collision Dynamics, 10th Annual European Rheology Conference, Nantes, France, 2015年4月

山本剛宏, 複雑流体の流動および流動誘起構造の解析, 京都大学数理科学研究所 RIMS 研究集会 新時代の科学技術を牽引する数値解析学, 2014年11月

山本剛宏, 西口隼人, 走光性微細藻類分散系流体の円管内流れの数値解析, 第92期 日本機械学会流体工学部門講演会, 2014年10月

山本剛宏, 西口隼人, Stochastic Rotation Dynamics 法を用いた走光性微細藻類分散系の流路内流れの数値解析, 日本流体力学学会年會 2014, 2014年9月

西口隼人, 山本剛宏, Stochastic Rotation Dynamics 法による藻類分散系の数値解析, 第27回 数値流体力学シンポジウム, 2013年12月

山本剛宏, 西口隼人, 走光性微細藻類分散系の管内流れの数値解析, 第61回 レオロジー討論会, 2013年9月

6. 研究組織

(1) 研究代表者

山本剛宏 (YAMAMOTO Takehiro)
大阪大学・大学院工学研究科・准教授
研究者番号: 40252621

(2) 連携研究者

小柴 孝 (KOSHIBA Takashi)
奈良工業高等専門学校・機械工学科・教授
研究者番号: 00215237