

名古屋大学卒業論文

微生物を模した棒状アクティブマターの協調運動と
二量体構造形成における柔軟性の寄与

2018 年 3 月

名古屋大学工学部物理工学科
応用物理学コース

増淵研究室

学生番号 081320930

嶋田 耕太郎

要旨

私たち人間は多くのアクティブマターに囲まれて生活している。アクティブマターとは体内の化学エネルギーを運動エネルギーに変換し行動する物体で、人間や象など大きなものから微生物やウイルスなどミクロなものまで幅広く存在する。動物が群れを作り移動するように、多くのアクティブマターは集団を構成し協調運動することが知られている。また、微生物の集団形成・協調運動が同じ流体中のトレーサー粒子の拡散係数を上昇させることが近年注目されている。

本研究では、非極性型のアクティブマターに注目し集団形成・協調運動に注目した。力の双極子で構成されたアクティブフィラメントを用いて、無限周期条件の系の中でコンピュータシミュレーションを行った。2つのアクティブフィラメントの系を初期条件を変えながら時間発展を観測したり、その中で現れた特徴的な構造において受ける力や周りの流体の流れを評価した。ベンディングポテンシャルを採用し、関節で曲がることで生物の柔軟性を表現したところが先行研究と大きく異なる点である。

結果として、特定の条件において2つのアクティブフィラメントが二量体構造を形成することがわかった。また、流体相互作用のみでは2つのアクティブマターは凝集しないことが判明した。よって本研究から、流れなどの外部条件がミクロなアクティブマターの集団形成・協調運動にとって重要であることが示唆される。

目次

要旨	i
第 1 章 序論	1
1.1 はじめに	1
1.2 非極性アクティブフィラメントのモデル化	2
1.3 2つのアクティブフィラメント	3
1.4 本論文の目的	5
第 2 章 モデルとシミュレーション	6
2.1 概要	6
2.2 計算モデル	6
2.3 シミュレーション	9
第 3 章 結果	10
3.1 1つのアクティブフィラメントの流れの観察	10
3.2 2つのアクティブフィラメントの時間発展と柔軟性の寄与の効果	11
3.3 流れ場の観測	18
3.4 初期配向と集団行動性の関係	22
第 4 章 考察	26
4.1 二量体・凝集体の結成条件	26
4.2 二量体構造の安定性における考察	26
4.3 今回のシミュレーションで考えていない要素	27
4.4 1つのアクティブフィラメントのビーズの数	27
第 5 章 結論	28
付録	29
謝辞	42
参考文献	43

第 1 章

序論

1.1 はじめに

アクティブマターは我々の生活に身近なものである。ミクロなスケールでは大腸菌などの微生物から、マクロなスケールでは人間を含む大型の動物まで様々な生物・非生物を対象に実験が盛んに行われている¹⁾。特に、動物の群れに代表されるようなアクティブマターの集合性・協調運動は注目されている²⁾。Vicsek ら²⁾によると、アクティブマターの密度が閾値よりも大きくなると協調運動性を示すオーダーパラメーターに一時相転移が起こる。その結果として群れを作る、集団で同じ方向に移動するなどの協調行動がみられる。

近年、レイノルズ数が小さい系であるミクロスケールのアクティブマターが注目されている。レイノルズ数³⁾は、物体に働く慣性力と粘性力の比を示す値であり、

$$Re = \frac{\text{慣性力}}{\text{粘性力}} = \frac{av\rho}{\eta} = \frac{av}{\zeta} \quad (1.1)$$

ただし、 a : 特徴長さ、 v : 特徴速度、 ρ : 流体密度、 η : 流体粘度、 ζ : 動粘度である。

レイノルズ数が大きい流体では慣性力が支配的になり、乱流が発生する。工場の煙突から立ち上る煙が例として挙げられる。一方でレイノルズ数が小さい流体では粘性力が支配的となり、層流が発生する。地殻プレートの動きが低レイノルズ数領域の例として挙げられる。水の中を泳ぐ大腸菌などのバクテリアの世界はレイノルズ数が低い。このような条件では、物体が移動するときにはたらく慣性力を無視することができる³⁾。したがって、低レイノルズ数では我々人間のように反復運動では前進することができない。そのような環境下で多くの微生物は図 (1.1) の flexible oar 型や、図 (1.2) の corkscrew 型³⁾などのシステムを用いて推進力を得る。

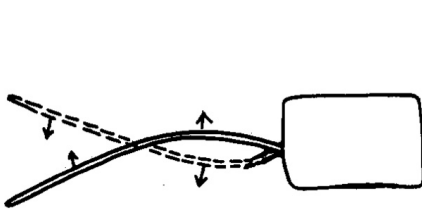


図 1.1: flexible oar 型。参考文献³⁾より引用

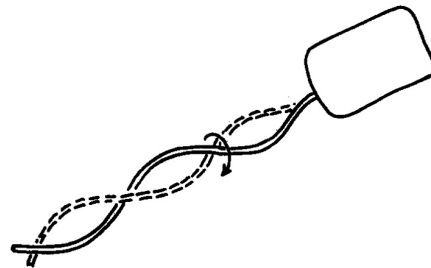


図 1.2: corkscrew 型。参考文献³⁾より引用

このようなシステムを持つ生物は自身の体に極性を持っていると考えることができ、周りの流体に非対称な流れを作り移動する。この流れはアクティブマター間において流体相互作用を引き起こすことがわかっている。Polin ら⁴⁾ は2つのコナミドリムシの泳ぐ様子を観察した。それによると、2つのコナミドリムシの運動の同期性・非同期性とその2つの状態を移動する確率は二体間の流体相互作用に由来することがわかっている。

一方で一部の腸菌やオキアミなどは、自身の体に極性を持たない非極性型のアクティブマターとして知られている。非極性なアクティブマターは周囲に作り出す流れ場が対称であるため単体で行動することはできない^{6, 7, 8, 9, 10)}。しかしながら極性を持つアクティブマターと同様に周囲の流体に作り出す流れによってアクティブマター間において流体相互作用が発生し、それにより移動することができる。

微生物などのアクティブマターの流体相互作用の結果として、流体の拡散係数増加が知られている^{8, 11)}。Underhill ら⁸⁾ によると、オキアミなどの海中生物は海水をかき混ぜて、自分の体のサイズより大きいスケールの渦や流れを作り出し、流体の拡散性を大きくすることがわかっている。Kim ら¹¹⁾ は腸菌などのバクテリアが含まれる懸濁液において拡散係数が上昇することを示した。この効果は極性も持つアクティブマターにおいて顕著だが、一種の腸菌やオキアミなどの非極性のアクティブマターにおいても確認されている。また Wu ら⁵⁾ は極性構造を持つ、一般的な腸菌の入った液体における粒子の拡散の実験を行なっている。粒子の平均二乗距離は短い時間スケールにおいては超拡散、長い時間スケールにおいては通常の拡散で表され、一次相転移が起こっていることを示した。

本研究ではシミュレーションを用いて、非極性のアクティブマターの低レイノルズ数領域における集団行動性を明らかにすることを目指す。特に微生物を中心とした、柔軟さを持つモデルを対象とする。

1.2 非極性アクティブフィラメントのモデル化

アクティブマターのモデル化は様々なものが考えられている。Alexander⁷⁾ は2つの異なる大きさの振動するビーズをバネでつないだ、極性を持つモデルを作成した。このモデルは低レイノルズ領域であつても振動が同位相でなければ移動することができる。非極性型アクティブマターのモデリングも近年盛んである。Pandey¹⁰⁾ はアクティブビーズで構成されるアクティブフィラメントを用いてアクティブマターを表現している。アクティブビーズは力の双極子を内側にもった球であり、周囲の流体に流れを作り出す。外向きの力の双極子を持つものを外向きアクティブビーズとし、内側の力の双極子を持つものを内向きアクティブビーズとする。

図(1.3)は外向きアクティブビーズが1つ存在するときの周囲の流れ場である。力の双極子と平行な方向ではビーズから流体が流れ出ており、垂直な方向では流体が流入している。また、流れ場は上下対称である。アクティブビーズの近傍、特に双極子と垂直な方向において流れが強くなっている。一方で、図(1.4)は内向きアクティブビーズが1つ存在するときの周囲の流れ場である。外向きアクティブビーズと流れの方向は逆だが、同様な形態の流れ場を作り出している。

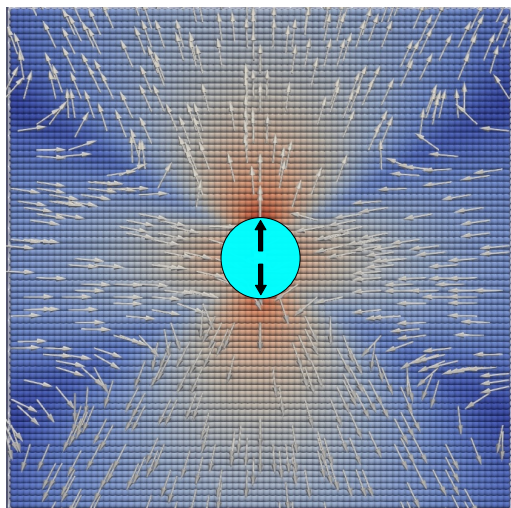


図 1.3: 外向きアクティブビーズと流れ場

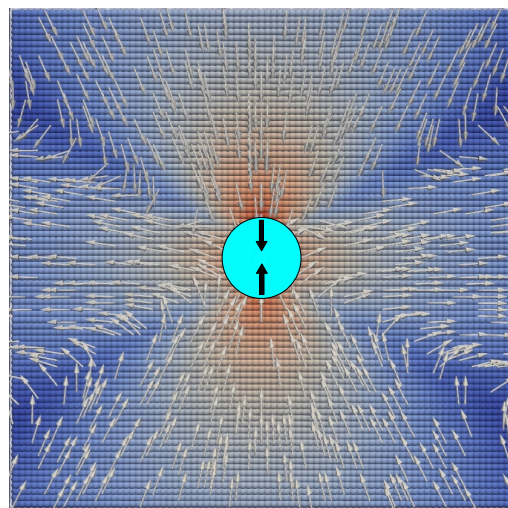


図 1.4: 内向きアクティブビーズと流れ場

アクティブフィラメントは、このビーズ数個をバネによって結ばれて造られる。図 (1.5) は Pandey¹⁰⁾ が用いたモデルであり、7個の外向きアクティブビーズを用いて造られている。Pandey¹⁰⁾ のモデルでは、ベンディングポテンシャルの係数を大きく設定しているのでフィラメントは硬く曲がりにくい。したがってフィラメントは直線となっているので、周りの流体に及ぼす流れの場は対称的である。よってこのようなフィラメントが1つのみ存在する系では、自分自身が引き起こす流れによる力はキャンセルアウトされ、フィラメントが動くことはない。

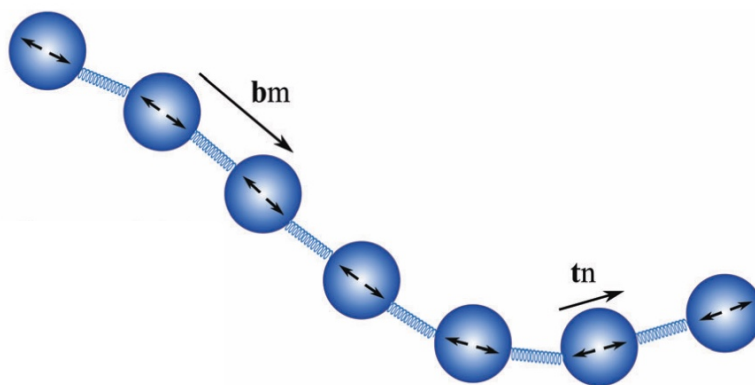


図 1.5: 外向きアクティブビーズで構成されるアクティブフィラメント。ただし b_m はボンドベクトル、 t_n は力の双極子の向きを示すベクトル。参考文献¹⁰⁾ より引用

モデルの箇所で詳しく紹介するが、本研究においても図 (1.5) と同様の外向きアクティブビーズで構成されるアクティブフィラメントを用いてシミュレーションをする。

1.3 2つのアクティブフィラメント

Pandey¹⁰⁾ は続いて、前章で紹介した外向きアクティブフィラメントを2個用意し平行な方向に初期配置して、相互作用を観測した。その結果平行方向にフィラメント同士が引き付け合い、一つの凝集構造を作った。凝集構造となったあとは、その場で回転を続けた。

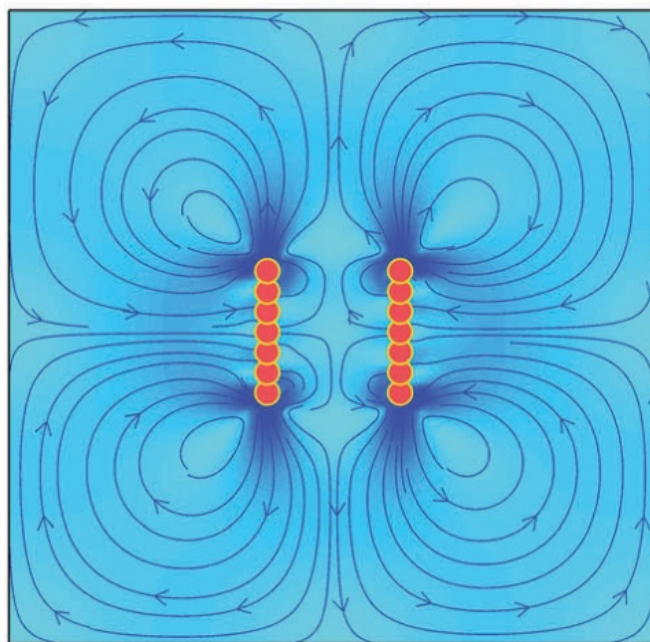


図 1.6: 2つの外向き型アクティブフィラメントの初期配置の図。流体上の矢印は流れの向き、色の濃淡は流れの強さをあらわす。参考文献¹⁰⁾より引用

Jewell ら⁹⁾ や Wykes ら⁶⁾ は、Pandey¹⁰⁾ のモデルを実験で確認するため、異なる2種類の金属で構成されるナノロッドと呼ばれるアクティブフィラメントを作成した。Jewell ら⁹⁾ は金とルテニウムで pusher 型のナノロッドを作った。2つのナノロッドで実験したところ、図 1.7 のようにぴったり重なる凝集構造と、図 1.8 のように少しずつれて凝集し回転する構成がそれぞれ安定であることを示された。金属棒での実験においては、流体相互作用だけでなく静電気力もまた凝集構造における重要な要素である。一方、Wykes ら⁶⁾ は金と白金を用いて pusher 型のナノロッドを作った。同様に2つのナノロッドの実験をしたところ回転する図 1.8 の状態が見られた。Jewell ら⁹⁾ のモデルでは、凝集構造のまま安定して回転し続けたのに対して、Wykes ら⁶⁾ のモデルでは不安定で、一定時間回転した後2つのフィラメントが反発し離れてしまった。

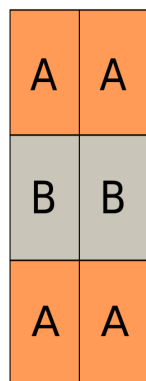


図 1.7: 2つの外向き型ナノロッドが近づき凝集構造をつくる様子。Jewell ら⁹⁾の実験において見られ、A はルテニウム、B は金を指す。

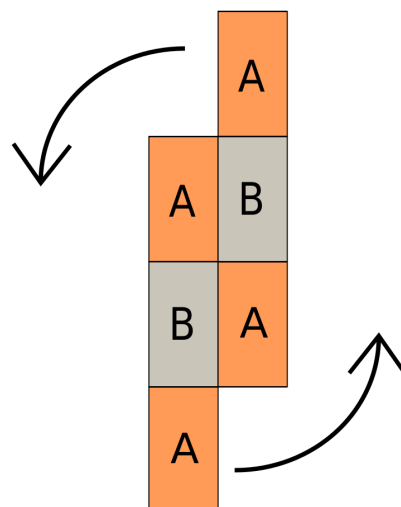


図 1.8: 2つの金属ナノロッドが近づきずれた状態で凝集構造をつくる様子。この図では反時計回りに回転する。ずれ方が右と左で逆の場合は、時計回りに回転する。Jewell ら⁹⁾(A はルテニウム、B は金)と Wykes ら⁶⁾(A が金、B はプラチナ)の両方の系で観測された。

1.4 本論文の目的

本論文では、非極性型アクティブマターの構造を持つ微生物の協調行動性を明らかにすることを目的とする。Pandey¹⁰⁾は硬いアクティブフィラメントのモデルを作成してシミュレーションを行った。また Jewell ら⁹⁾や Wykes ら⁶⁾は2種類の金属で構成されるナノロッドを用いて実験を行った。しかしながら、これらの実験は実際の微生物と仮定する上で、構造の柔軟性という重要な点を無視している。アクティブマターの密集状態においては分子間相互作用が大きく寄与するはずであるが、微生物はそのような状態において自身の体を変形させると考えられる。先行研究はこの点が考慮されていない。そこで本研究ではモデルの柔軟性を表すベンディングポテンシャルを変化させ、非極性型アクティブマターの集団行動性への影響を評価する。

第2章

モデルとシミュレーション

2.1 概要

本実験ではアクティブフィラメントのモデルを作成しシミュレーションを行い、2本のフィラメントでの振る舞いを協調行動に注目して解析をした。先行研究との大きな違いは、フィラメントの柔らかさに注目することである。具体的には、フィラメントの柔軟性を表すベンディングポテンシャルを定義した。そして異なるベンディングポテンシャルにおける、アクティブフィラメントの協調行動性を評価した。本研究の内容は大きく2つに大別することができる。1つ目は、アクティブフィラメント単体や、二量体構造における周りの流体の向きと大きさをボルツマン座標系で観測すること。2つ目は2つのフィラメントの系の時間発展を観測し、協調行動を解析することである。

2.2 計算モデル

2.2.1 微生物の世界のレイノルズ数

レイノルズ数 Re は、流れの特性を示す値であり、式 (1.1) の形で与えられる。本実験で注目するバクテリアなどの微生物は、特徴長さ $a \sim 10^{-6}[\text{m}]$ 、特徴速度 $v \sim 10^{-5}[\text{m/sec}]$ 、動粘性率 $\zeta \sim 10^{-6}$ 程度である^{12, 3)}。したがって、レイノルズ数 Re は、

$$Re = \frac{av}{\zeta} \sim 10^{-5} \quad (2.1)$$

と非常に小さくなる。よって微生物が生活する領域は低レイノルズ数のものであることがわかる。したがって本研究においては、慣性力を無視することができるとする。

2.2.2 アクティブビーズ・フィラメントのモデル

Pandey¹⁰⁾ と同様に、アクティブビーズとばねを用いて計算モデルを作成した。3ページに図 (1.3) の外向きアクティブビーズと図 (1.4) の内向きアクティブビーズの2種類を示したが、本研究では前者を用いる。図 (2.1) の様に4つの外向きアクティブビーズを線状に並べ、ビーズ間をバネで結んだ。これをアクティブフィラメントと呼び、微生物を模したモデルとする。微生物が自身の体を変形できることと同様に、このモデルは外場からの影響により関節が曲がり体を変形することができることが特徴的である。このモデルは非極性であるため、変形しておらずまっすぐな安定状態においては自身がもつビーズの流れはキャンセルアウトされる。したがって自ら発生させる流れ場により移動・変形することはない。

各々のビーズがもつ力の双極子の向きは、そのビーズをつなぐバネのベクトルの向きと同じとした。位置ベクトル $\mathbf{r}$ に存在するビーズは周囲に流れ場 $\mathbf{v}$ を発生させる。その粒子は自身以外の、他のビーズが引き起こす流れによる流体相互作用を受け、またポテンシャルを感じる。またビーズが周りの流体との相対的速度 $\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial t} - \mathbf{v}(\mathbf{r})$ で動くと、周りの流体からそれに応じた摩擦力を受ける。したがって、ビーズの力のつりあいの式は以下のように表すことができる。

$$\mathbf{0} = -\xi \left(\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial t} - \mathbf{v}(\mathbf{r}) \right) - \nabla U \quad (2.2)$$

本研究では低レイノルズ数の系を想定しているので、慣性力の影響を無視している。フィラメントが感じるポテンシャルは排除体積効果 U_{L-J} 、ベンディングポテンシャル U_{bend} 、バネポテンシャル U_{bond} の3種類から構成される。

$$U = U_{L-J} + U_{bend} + U_{bond} \quad (2.3)$$

排除体積効果はレナード・ジョーンズポテンシャル¹³⁾を採用した。レナード・ジョーンズポテンシャルは2つの粒子間にはたらく引力と斥力で構成され、

$$U_{L-J}(\mathbf{r}_{\mathbf{L}-\mathbf{J}}) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{|\mathbf{r}_{\mathbf{L}-\mathbf{J}}|} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{|\mathbf{r}_{\mathbf{L}-\mathbf{J}}|} \right)^6 \right] \quad (2.4)$$

で表される。 σ は粒子の直径、 ϵ はポテンシャルの深さを示す。右辺の1項目は斥力、2項目は引力である。この関数は $r = 2^{\frac{1}{6}}\sigma$ で極小値をもち、これより近い領域では斥力が、遠い領域では引力が支配的となる。今回は粒子同士が重なることを防ぐ斥力を取り入れるため本ポテンシャルを導入しているので、計算の簡単のためカットオフ長を $2^{1/6}\sigma$ とする。

ベンディングポテンシャルは、フィラメントが曲がることを制限するポテンシャルであり、自身の体をまっすぐに保とうとする。図2.1で示されているようなフィラメント内の隣接する3粒子で定義される角度 θ を用いて表され、 θ が小さくなるほど安定する。

$$U_{bend}(\theta) = k_{bend}(\cos \theta - 1)^2 \quad (2.5)$$

また、バネポテンシャルは以下のように表される FENE(有限バネ)ポテンシャル¹⁴⁾を採用している。このポテンシャルは一定値以上にバネが伸びると急激に増加するもので、以下の形で表される。

$$U_{bond}(\mathbf{r}_{\mathbf{FENE}}) = -\frac{k}{2} R_o^2 \ln \left(1 - \frac{|\mathbf{r}_{\mathbf{FENE}}|^2}{R_o^2} \right) \quad (2.6)$$

ただし k はばね定数、 R_o は最大伸びきり長である。この関数では、ばねの伸び $|\mathbf{r}|$ が R_o より大きくなるとポテンシャルが急激に増加する。したがって、バネの伸び r は最大伸びきり長 R_o 以下に制限される。

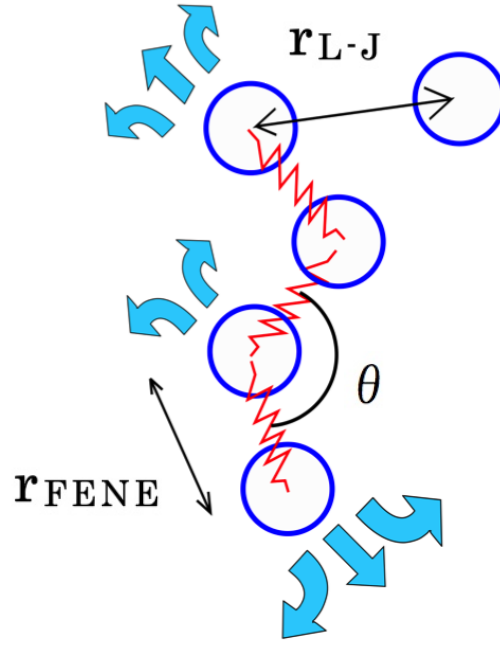


図 2.1: 外向きビーズを用いたアクティブフィラメント。青い球はアクティブビーズ、赤い線はバネ、水色の矢印は流体の流れをそれぞれ表す。

2.2.3 ストークス方程式とその解

流体である水の中で生活する微生物の行動を計算するためには、その微生物を囲む流体の流れを知る必要がある。ボルツマン座標における流体の運動を表す方程式はナビエーストークス方程式¹⁵⁾と呼ばれる。この方程式は非圧縮条件 $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$ 、つまり外圧によって流体の体積が変化しないという過程のもとでは以下になる。

$$-\frac{1}{\rho} \nabla \mathbf{p} + \xi \nabla^2 \mathbf{v} + \mathbf{f} = \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} \quad (2.7)$$

ただし、 $\mathbf{r}$ は位置ベクトル、 $\mathbf{v}$ と $\mathbf{p}$ はそれぞれ $\mathbf{r}$ での流れベクトルと圧力、 $\mathbf{f}$ が外力である。 ρ は流体の密度、 ξ は粘性係数であり、20 °Cの水においてはそれぞれ $9.982 \times 10^2 [kg/m^3]$ 、 $1.004 \times 10^{-3} [Pa \cdot s]$ である¹⁵⁾。

前章で述べたように、本実験で注目する微生物に代表されるミクロスケールなアクティブマターは低レイノルズ数の世界で生活する。低レイノルズ数領域では慣性の影響が小さく慣性力を無視することができるので、式 2.7 の右辺の第 1 項、第 2 項は無視することができる¹⁾。したがって方程式 (2.7) は

$$-\frac{1}{\rho} \nabla \mathbf{p} + \xi \nabla^2 \mathbf{v} + \mathbf{f} = 0 \quad (2.8)$$

となり、ストークス方程式と呼ばれる。この方程式は線形であるので解を求めることができる。外力を $\mathbf{f} = \mathbf{F} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ とすると、式 (2.8) の解はグリーン関数 $\mathbf{O}(\mathbf{r})$ で与えられる。

$$\mathbf{v}(\mathbf{r}) = \mathbf{O}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \cdot \mathbf{F}(\mathbf{r}') \quad (2.9)$$

$$\mathbf{O}(\mathbf{r}) = \frac{1}{8\pi\xi} \left(\frac{\mathbf{I}}{r} + \frac{\mathbf{r}\mathbf{r}}{r^3} \right) \quad (2.10)$$

ただし $r = |\mathbf{r}|$ である。

2.2.4 オイラー法を用いた漸化式

アクティブフィラメントの各ビーズの力のつり合いは式 (2.2) で表された。これをオイラー法を用いて展開すると、時間 t に位置 $\mathbf{r}(t)$ にあるビーズの dt 後の位置 $\mathbf{r}(t + dt)$ は次のようになる。

$$\mathbf{r}(t + dt) = -\frac{dt}{\xi}[\xi \mathbf{v}(\mathbf{r})] + \mathbf{r}(t) - \nabla U \quad (2.11)$$

この漸化式を用いて、系を時間発展させる。また本シミュレーションでは $dt = 3.33 \times 10^{-5}[\tau_o]$ として計算した。確認のため、柔らかいフィラメントにおける計算 (3.2) 節をより小さい時間刻み幅である $dt = 3.33 \times 10^{-7}[\tau_o]$ で行なったところ同様の結果が得られた。したがって、この時間刻み幅における計算結果は有効性をもつと判断できる。

2.2.5 系の規格化

本シミュレーションでは単位長さ、単位エネルギー、単位時間を下の表 (2.1) のように設定した。本論文において、以後はこれらの単位量で規格化された量であることを宣言する。

表 2.1: 単位量

単位量	記号	値
単位長さ	a	1
単位エネルギー	E_o	6.67×10^{-12}
単位時間	τ_o	1.50×10^8

2.3 シミュレーション

前節では本研究で用いた主要な概念、方程式などを説明した。これらを用いて、本研究ではプログラムを自ら構築しそれを用いてシミュレーションした (付録を参照)。観察する系として、縦の大きさ $32[a]$ 、横の大きさ $32[a]$ の二次元の箱を作り、その中でアクティブフィラメントを配置し、動くと考えた。観測する箱を大きさ $0.5[a]$ のボルツマン格子で区切り、それぞれの点において流れをストークス方程式の解である式 (2.9) と式 (2.10) を用いて計算した。系の境界には無限遠境界条件が適用されている。

まず、初期配置や特徴的な構造などについては流れ場の解析をした。計算された各座標における流れはビジュアライゼーションソフトの Paraview で視覚化した。次に、いくつかの系について時間発展を観測した。漸化式 (2.11) が組み込まれたプログラムを用いて計算し、出力されたデータを視覚化して評価した。

第 3 章

結果

これまで述べてきた理論を用いて本研究ではプログラムを構築し計算した。本章ではその計算結果とその視覚化されたイメージを紹介する。また全ての計算結果について、系の境界における流れは十分に小さく、境界条件とは矛盾しないことを確認した。

3.1 1つのアクティブフィラメントの流れの観察

最初に、安定状態である直線状のアクティブフィラメント1つを配置し、周りの流れ場を観測した。第2章で示したように、外向きアクティブビーズでアクティブフィラメントが構成されている。結果は図(3.1)のようになった。フィラメントの軸と平行な方向では、フィラメントから離れる向きに流体が流れ、軸と垂直な方向では、フィラメントに向かう方向に流体が流れている。結果として、周りの場に上下対象な流れを引き起こしていることがわかる。各ビーズが存在する座標においては対称な流れが打ち消しあうので、自分自身が引き起こす流れによって移動することはない。また図(3.1)の右側は流れ場を対数表示したものである。フィラメントの近郊、特に両端のビーズ付近で流れが強くなっていることがわかる。

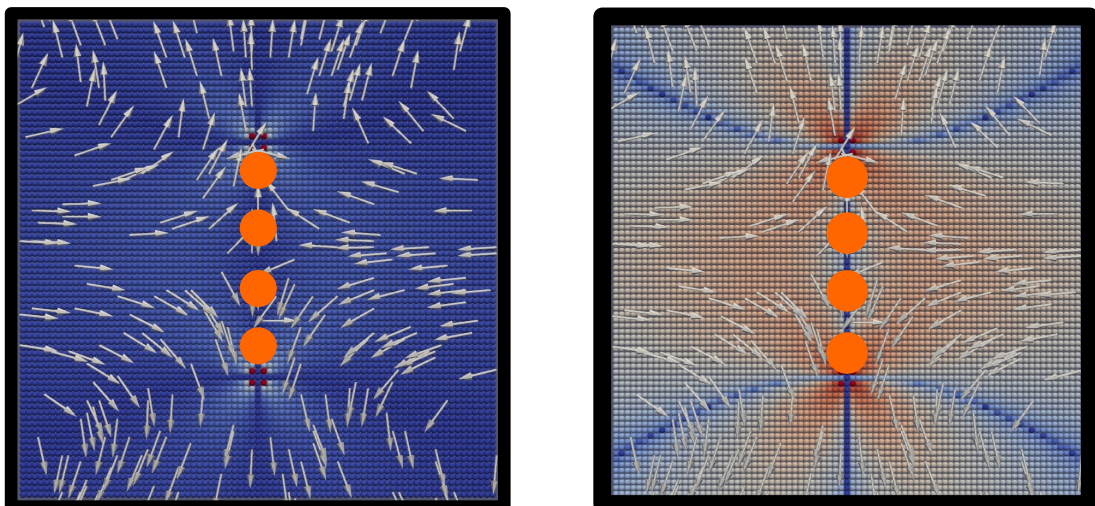


図 3.1: 1つのアクティブフィラメントの安定状態における周りの流体の流れ。右側の図は流れの大きさを対数表示したもので、赤色は強い流れを、青色は弱い流れをあらわす。矢印の向きは流れの方向をあらわす。

3.2 2つのアクティブフィラメントの時間発展と柔軟性の寄与の効果

前項が平衡状態におけるアクティブフィラメントの周りの流れの場を計算したのに対して、本計算では2つのアクティブフィラメントの動的な時間発展を計算する。直線状のアクティブフィラメント2つを $32[a] \times 32[a]$ 箱の中央に、間隔を $5[a]$ あけて平行に配置した。前章とは異なり、流体相互作用により2つのアクティブフィラメントは移動し変形する。漸化式 (2.11) を用いて各ビーズの座標を計算しそれらの座標を出力する。別のプログラムを用いてビーズの座標を視覚化してアクティブフィラメントの集合性を評価した。以降は図 (3.2) に示すように、フィラメントの周囲 $16[a] \times 16[a]$ の範囲のみ示す。

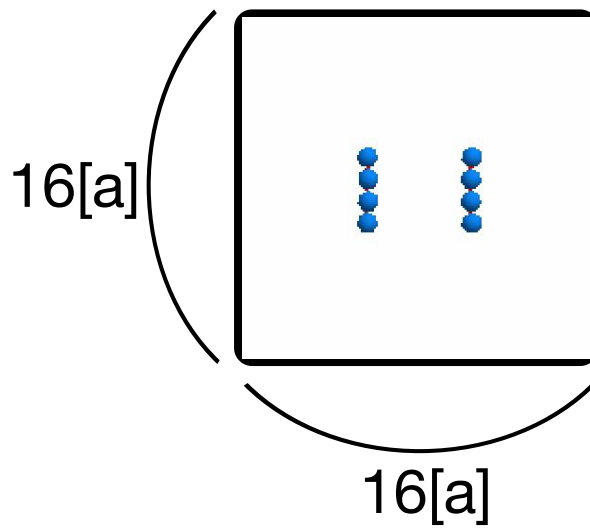
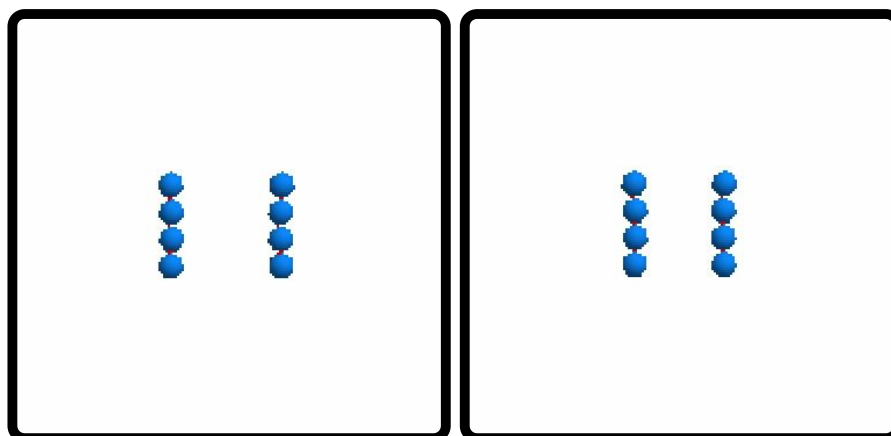
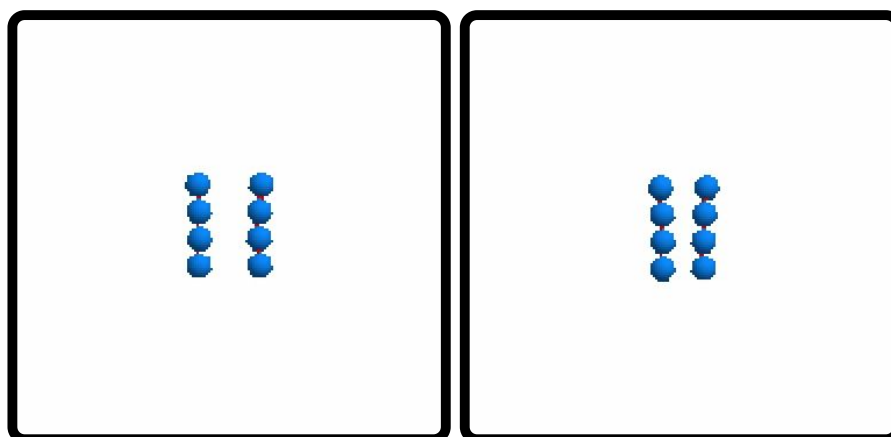
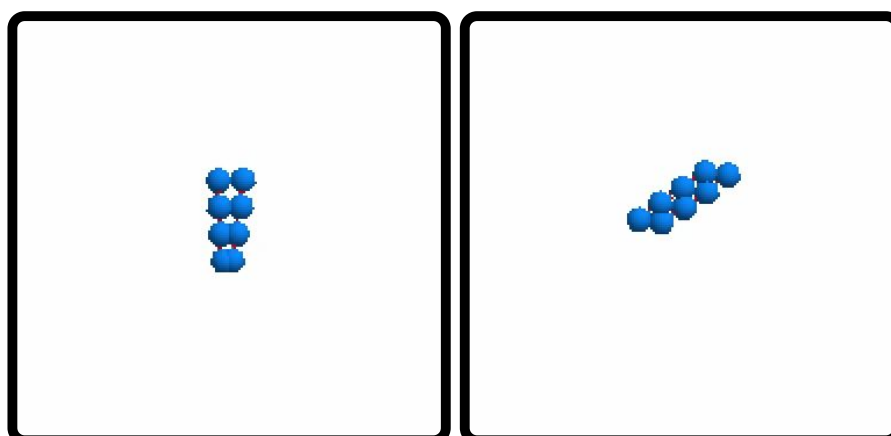


図 3.2: 2つのアクティブフィラメントの初期配置

集合性への寄与を評価するためにベンディングポテンシャルの係数 k_{bend} の値を変化させながら計算したところ、フィラメントの振る舞いを3種類に分類することができた。 k_{bend} の値が大きく凝集状態を作るものを硬いフィラメント、 k_{bend} の値が小さく変形して凝集しないものを柔らかいフィラメントとする。二つの硬さの領域の間に、二量体を形成して協調運動するものが確認された。以降はこれを特徴的な硬さのフィラメントとする。

3.2.1 硬いフィラメント

ベンディングポテンシャルの大きい硬いフィラメントは、横方向に引っ張り合い続けて、ぴったりと密着する凝集状態を形成した。そしてその状態を保ったままその場で $1/2\pi$ ほど回転をした。その後、フィラメント同士が反発して、2つの別々のフィラメントに戻った。また硬いフィラメントであるため、凝集状態においてもそれぞれのフィラメントに変形は見られなかった。

 $t=2.50[\tau_0]$ $t=4.17[\tau_0]$  $t=5.83[\tau_0]$ $t=6.67[\tau_0]$  $t=7.50[\tau_0]$ $t=8.33[\tau_0]$

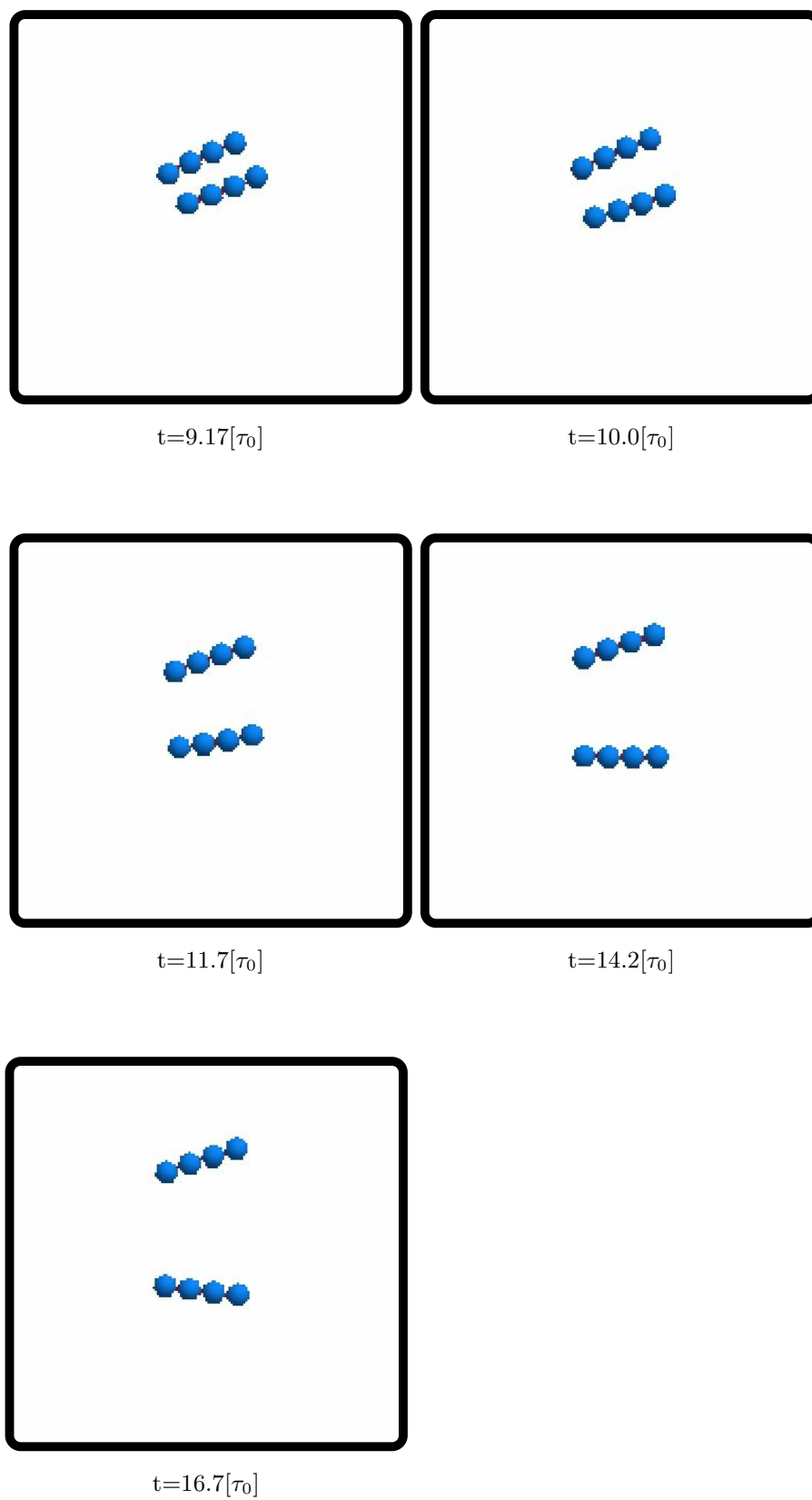
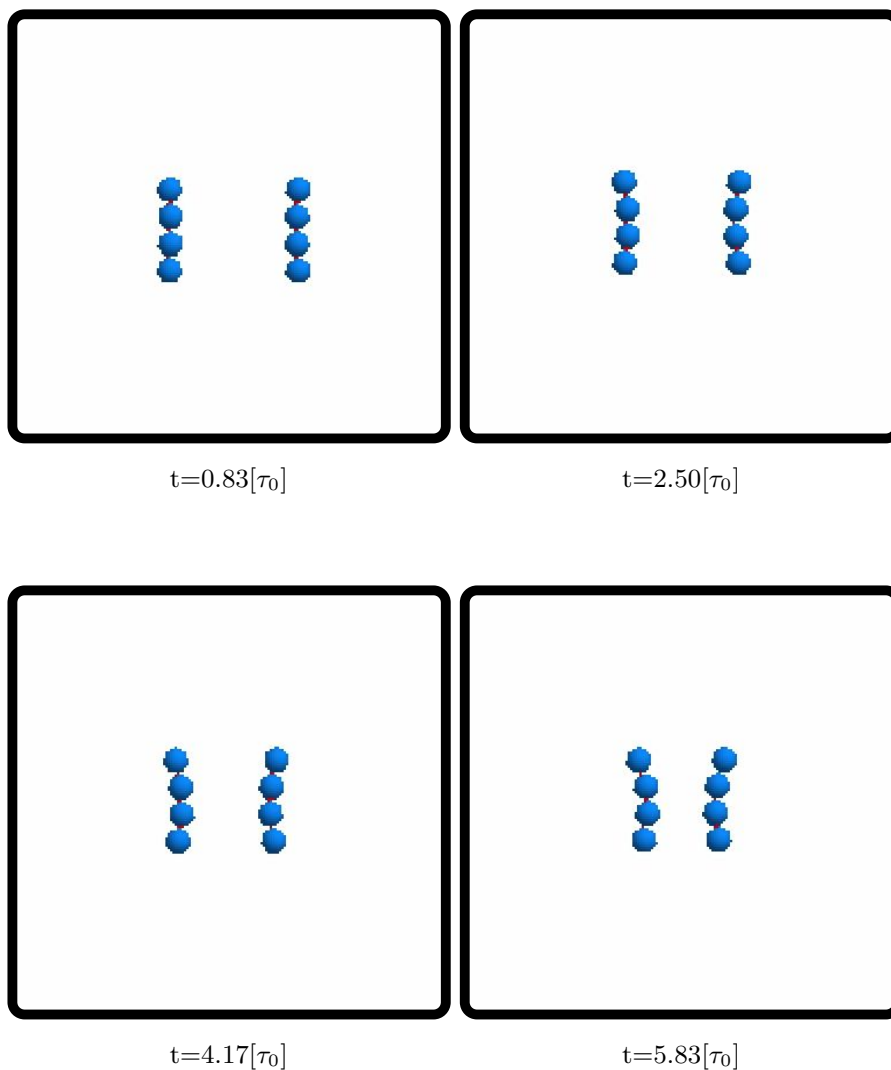
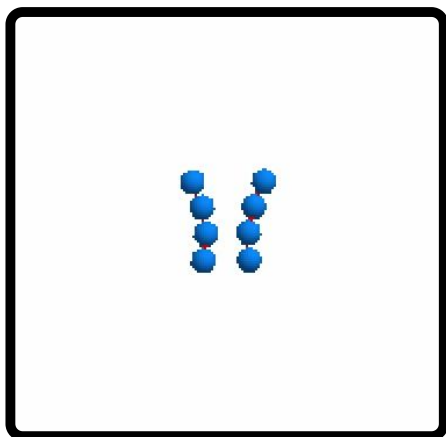
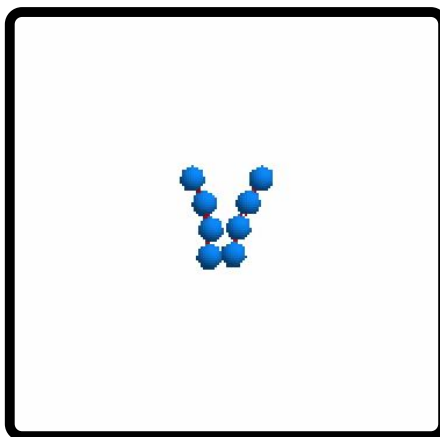
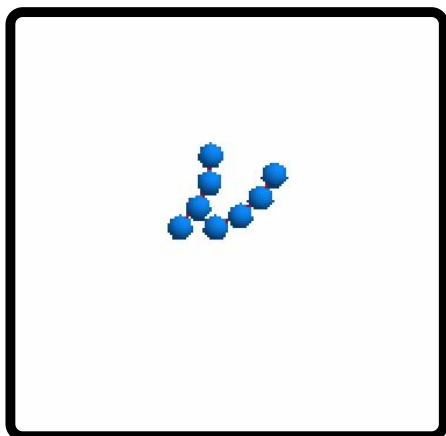
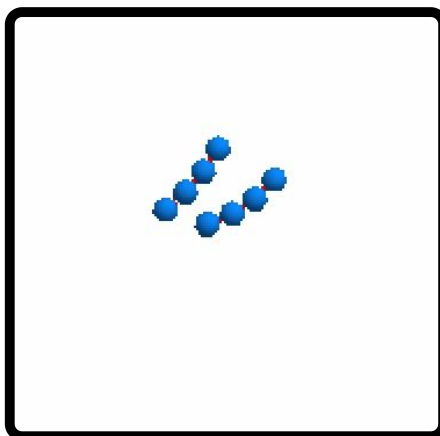
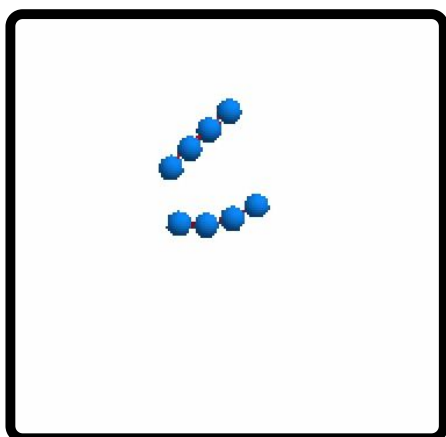
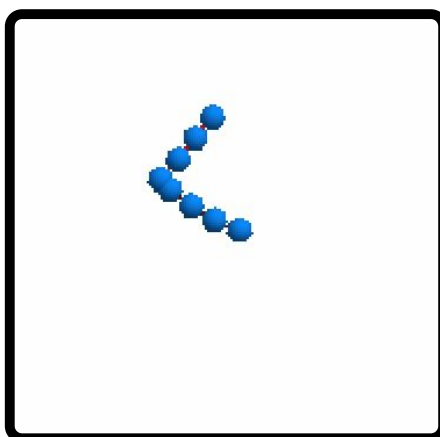


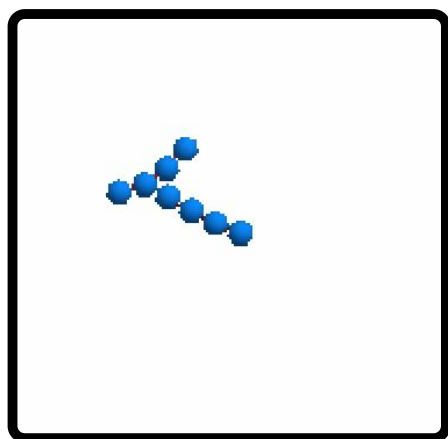
図 3.3: 2つの硬いフィラメントの時間経過

3.2.2 柔らかいフィラメント

柔らかいアクティブフィラメントは平行状態を保ったまま近づくと反るように変形し始めた。変形が進むとそれ以上近づかず、硬いフィラメントのような凝集状態を作らなかった。最接近距離まで近づいた後、硬いフィラメントと同様に反発した。



 $t=7.50[\tau_0]$  $t=8.33[\tau_0]$  $t=9.17[\tau_0]$  $t=10.0[\tau_0]$  $t=13.3[\tau_0]$  $t=15.8[\tau_0]$

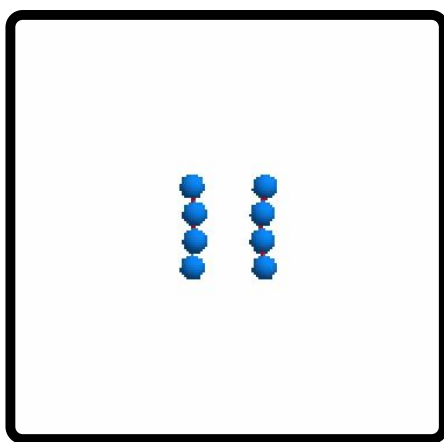


$t=16.7[\tau_0]$

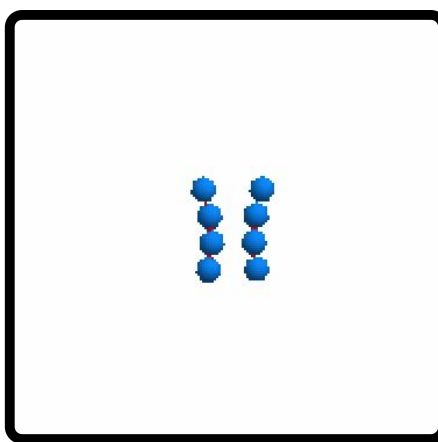
図 3.4: 2つの柔らかいフィラメントの時間経過

3.2.3 協調行動を起こす特徴的な硬さ k_c

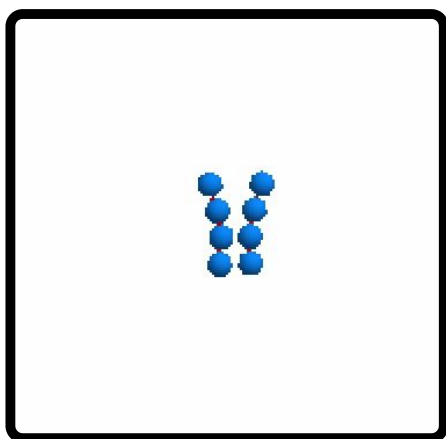
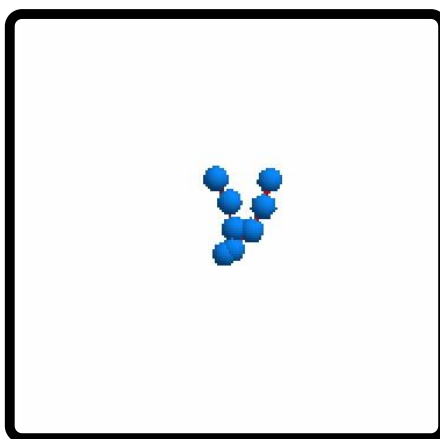
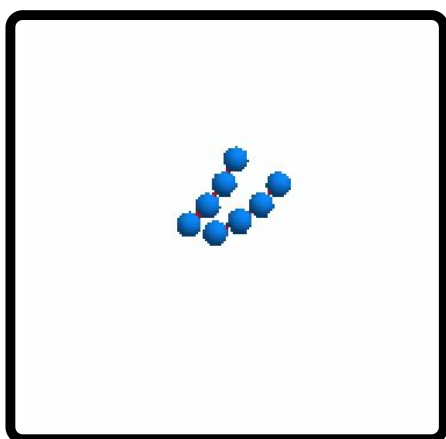
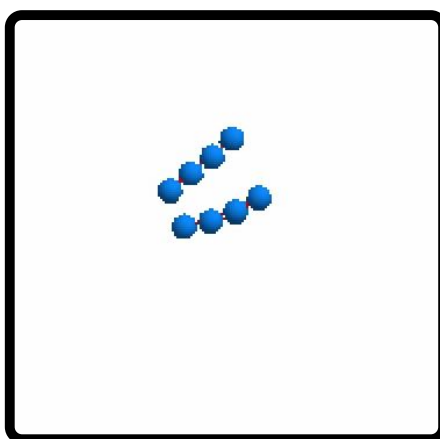
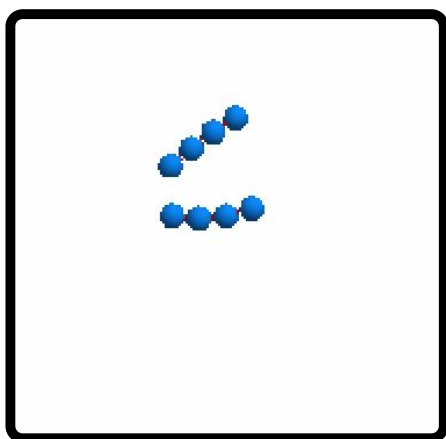
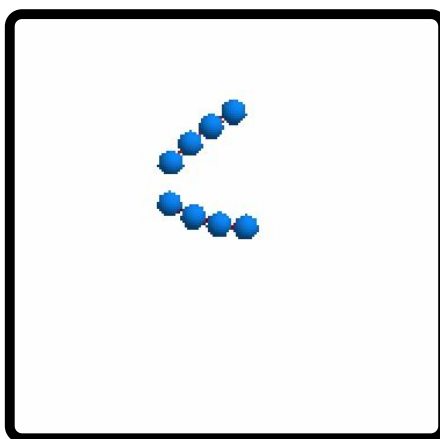
この2つの中間の硬さをもつアクティブフィラメントは特徴的な振る舞いを示した。平行方向に近接した後、2つのフィラメントの端同士が密着し V 字の二量体を形成した。この二量体は構造を変化することなく V 字の谷の方向に移動する様子が観測された。



$t=0.67[\tau_0]$



$t=2.00[\tau_0]$

 $t=2.67[\tau_0]$  $t=3.33[\tau_0]$  $t=4.00[\tau_0]$  $t=5.33[\tau_0]$  $t=6.67[\tau_0]$  $t=8.00[\tau_0]$

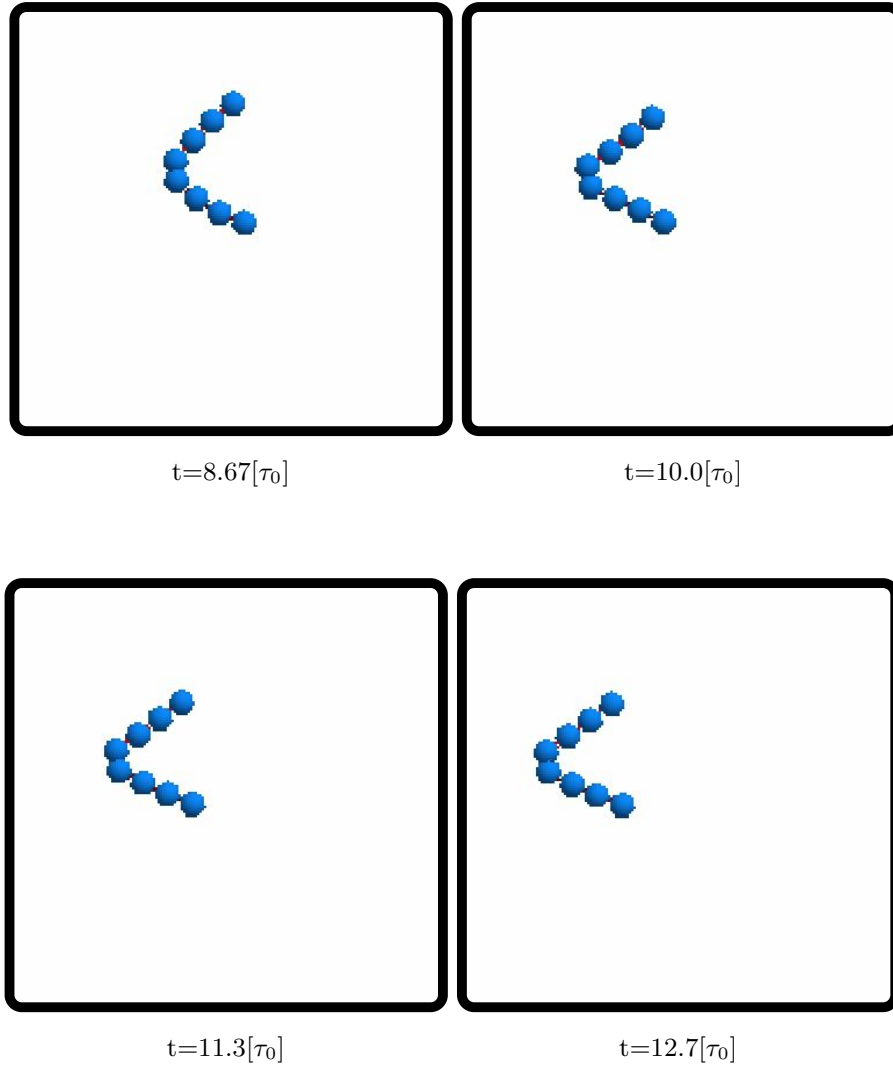


図 3.5: 2つの特徴的な硬さのフィラメントの時間経過

3.3 流れ場の観測

前節 (3.2) の計算の結果、2つのフィラメントはベンディングポテンシャル k_{bend} によっていくつかの興味深いふるまいをすることがわかった。本節ではその中で、硬いフィラメントでの凝集構造と、特徴的な硬さのフィラメントでの二量体構造に注目する。これらの構造が存在する時の周囲の流体の流れを計算し、(3.1) 節と同様な手法で流れ場を視覚化した。

3.3.1 硬いフィラメントの凝集状態における流れの場

凝集状態では左右のフィラメントが少しずれた状態で密着した。図 (3.6) の左側は凝集状態の周囲の流れの場を図示したもので、右側は流れ場の大きさを対数表示したものである。この図において、右側のフィラメントが上にビーズ半個ほどずれた状態で結合しており、二量体全体で反時計回りの方向に回転している。

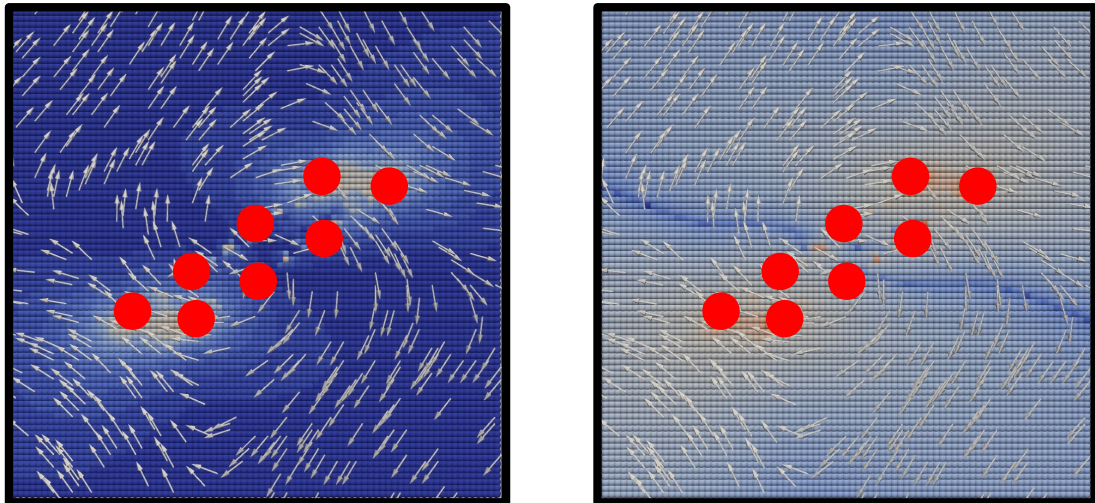


図 3.6: 硬いフィラメントの凝集状態における流れ場。この凝集状態を保ちながら反時計方向に回転する。右の図は流れ場を対数表示したもので、赤は強い流れを、青は弱い流れを示す。

3.3.2 特徴的な硬さのフィラメントの二量体状態における流れの場

特徴的な硬さでは、2つのアクティブフィラメントが近づいた後に二量体構造を構成した。図 (3.7) の左側はこの時の周囲の流れの場を図示したものであり、右側はその流れ場の大きさを対数表示したものである。この二量体構造を保ちながら、図の左向きに協調運動をした。2つのフィラメントが結合しているところでは左向きに流体が流れ、各フィラメントの反対側の端では流体が右向きに流れている。

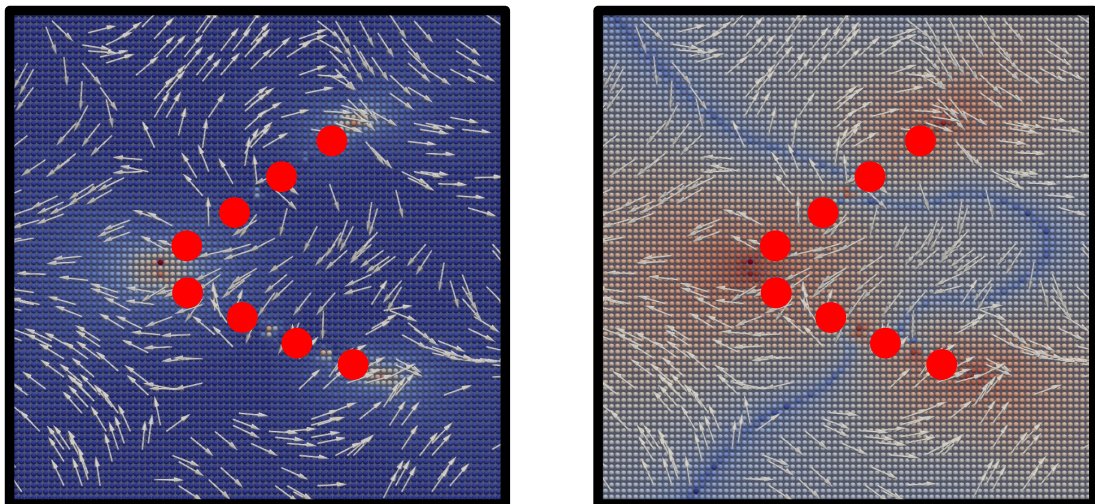


図 3.7: 特徴的な硬さのフィラメントの二量体状態における流れ場。右の図は流れ場を対数表示したもので、赤は強い流れを、青は弱い流れを示す。

3.3.3 二量体構造の安定性の解析

特徴的な硬さのアクティブフィラメントにおいて、安定的な二量体が形成され協調運動することがわかった。この二量体の安定性をビーズに働く力の観点から解析した。図 (3.8) のような二量体において、赤色のフィラメントをフィラメント A、青色をフィラメント B として、それぞれのフィラメントビーズをそれぞれ 1～4 で番号づけした。また二量体が進行する方向を進行方向、それに垂直な方向を垂直方向と定義した。

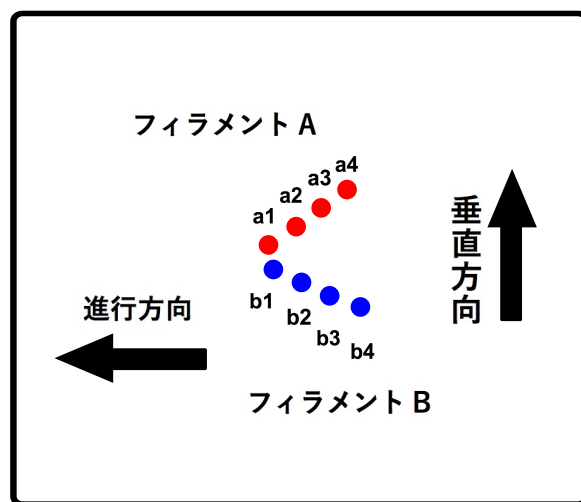


図 3.8: 二量体構造における 2つのフィラメントと 2つの方向の定義

この状態において各ビーズに働く、流体相互作用、排除体積効果、ベンディングポテンシャル、バネポテンシャルに由来する力をそれぞれ 2 方向に分解したところ下の表 (3.1) ようになった。

表 3.1: 二量体構造の安定性の解析

ビーズ	要素	垂直方向	進行方向	ビーズ	要素	垂直方向	進行方向
a1	流体	-0.21	0.61	b1	流体	0.30	0.70
	L-J	0.00	0.00		L-J	0.00	0.00
	bend	0.00	0.00		bend	0.00	0.00
	バネ	0.00	0.00		バネ	0.00	0.00
	合計	-0.21	0.61		合計	0.31	0.70
a2	流体	0.02	0.19	b2	流体	-0.06	0.18
	L-J	0.00	0.00		L-J	0.00	0.00
	bend	0.00	0.00		bend	0.00	0.00
	バネ	0.00	0.00		バネ	0.00	0.00
	合計	0.02	0.19		合計	-0.06	0.18
a3	流体	0.09	0.10	b3	流体	-0.12	0.07
	L-J	0.00	0.00		L-J	0.00	0.00
	bend	0.00	0.00		bend	0.00	0.00
	バネ	0.00	0.00		バネ	0.00	0.00
	合計	0.02	0.19		合計	-0.12	0.07
a4	流体	0.10	0.08	b4	流体	-0.11	0.05
	L-J	0.00	0.00		L-J	0.00	0.00
	bend	0.00	0.00		bend	0.00	0.00
	バネ	0.00	0.00		バネ	0.00	0.00
	合計	0.10	0.07		合計	0.10	0.05
フィラメント A	合計	-0.01	0.98	フィラメント B	合計	0.13	1.00

要素の列はそれぞれ、流体は流体相互作用を、L-J は排除体積効果を、bend はベンディングポテンシャルを、バネはバネポテンシャルをあらわす。フィラメント B に働く進行方向の力を 1 として規格化した。両方向で、すべてのビーズにおいて流体相互作用が支配的であることがわかる。また進行ベクトルについては、程度の差はあるが全てのビーズが進行方向に力を受けていることがわかった。

また垂直ベクトルについては同じフィラメントの中でもビーズによって向き・大きさが異なったので図 (3.9) で表した。

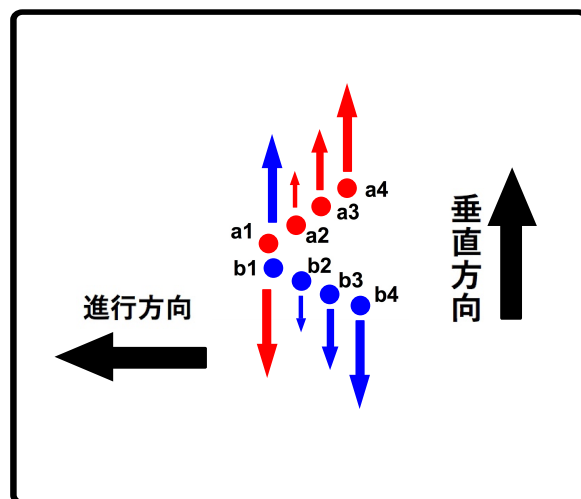


図 3.9: 二量体構造の時それぞれのビーズに働く垂直方向の力

それぞれのビーズは垂直方向にある、同じ色の矢印であらわされる力を受けている。図中のビーズ a1 と b1 はフィラメント同士が近づく方向に大きな力を受けている。対して、他のフィラメントはフィラメント同士が離れる方向に力を受け、かつ二量体の接着部分から離れたビーズほど大きな力を受けている。

3.4 初期配向と集団行動性の関係

前節 (3.2) の計算は、平行に配置された 2 つのアクティブフィラメントについて行った。続いて、同じ 32×32 の箱の中にランダムに配置された 2 つのフィラメントについて計算をしたところ、平行配置の計算で見られたような集合性・協調行動性は観測されなかった。そこで、フィラメントの初期状態における配置・配向が重要な影響を与えている可能性が考えられた。よって次のような計算を行った。前のシミュレーションと同じように、 $32[a] \times 32[a]$ の箱の中央に間隔 $5a$ をおいて平行に 2 つのアクティブフィラメントを配置した。ここから、片方のアクティブフィラメントのみを 0° から 90° まで 10° ずつ傾けた。集合性を評価するために時間経過に対する重心二乗距離を計算し、それぞれグラフにプロットした。前の計算で十分近づいたと考えた、硬いフィラメントと特徴的な硬さのフィラメントに対してこのシミュレーションを行った。

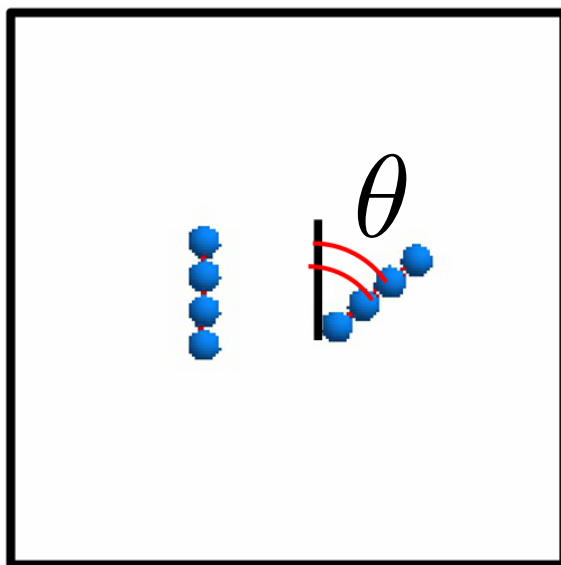


図 3.10: 初期配置の図

3.4.1 硬いアクティブフィラメント

硬いアクティブフィラメントにおける結果は図 (3.11) のようになった。前の計算と同様に、 0° に配置したフィラメントは凝集状態を形成した。 0° から 40° までの1組のフィラメントでは、フィラメントが引き合う様子が確認された。ただ、角度が大きくなるにつれて最接近距離が大きくなり、引き付け合う力が弱まっていた。一方で、 50° から 90° までの大きな角度においては、初めからフィラメント同士が反発し、近づくことはなかった。角度が大きくなるにつれて、反発する程度も大きくなった。

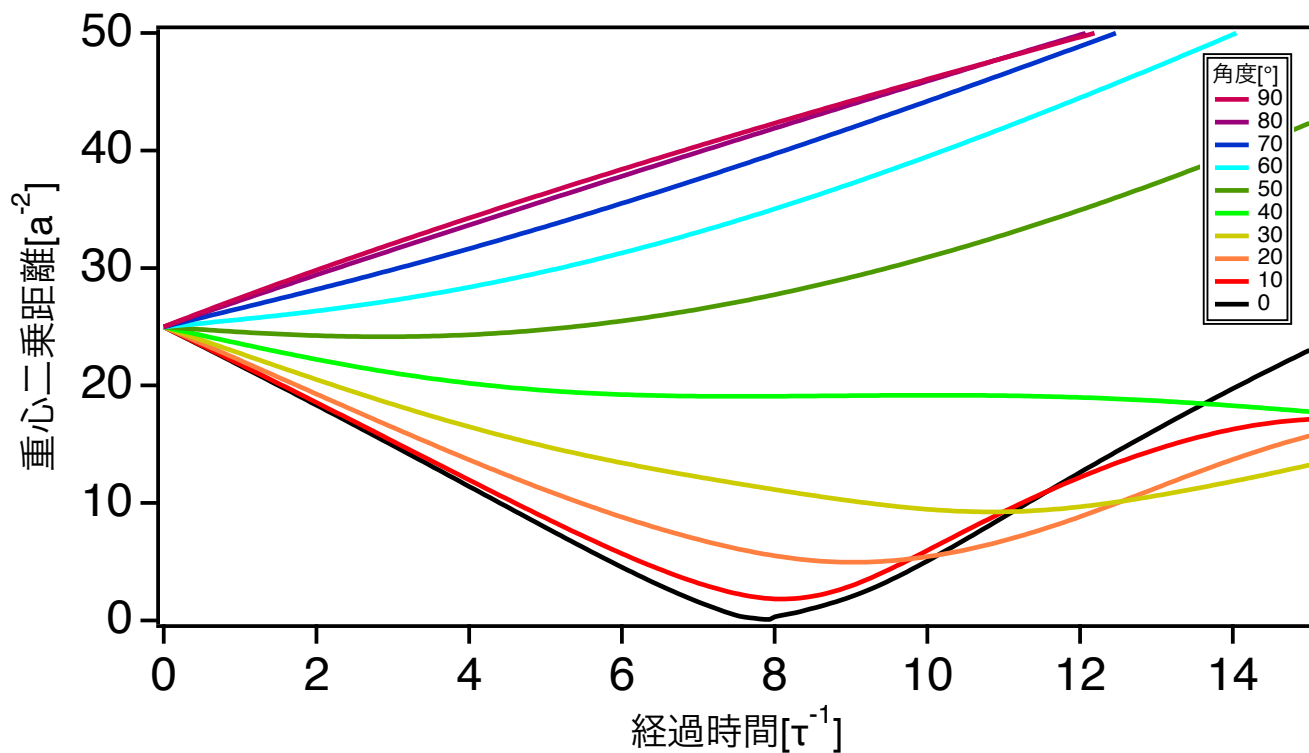


図 3.11: 2つの硬いフィラメントの重心二乗距離の時間変化

3.4.2 中間の硬さのアクティブフィラメント

中間の硬さのアクティブフィラメントにおける結果は図 (3.12) のようになった。 0° 、つまり完全な平行状態においては一定時間経過後に二量体が形成され、それ以降は重心二乗距離が変化しない。 40° までのフィラメントは、硬いフィラメント同様にフィラメント同士が引き合った。しかし角度が大きくなるにつれてその度合いは小さくなった。 50° 以上のフィラメントでは初めからフィラメント同士が反発した。

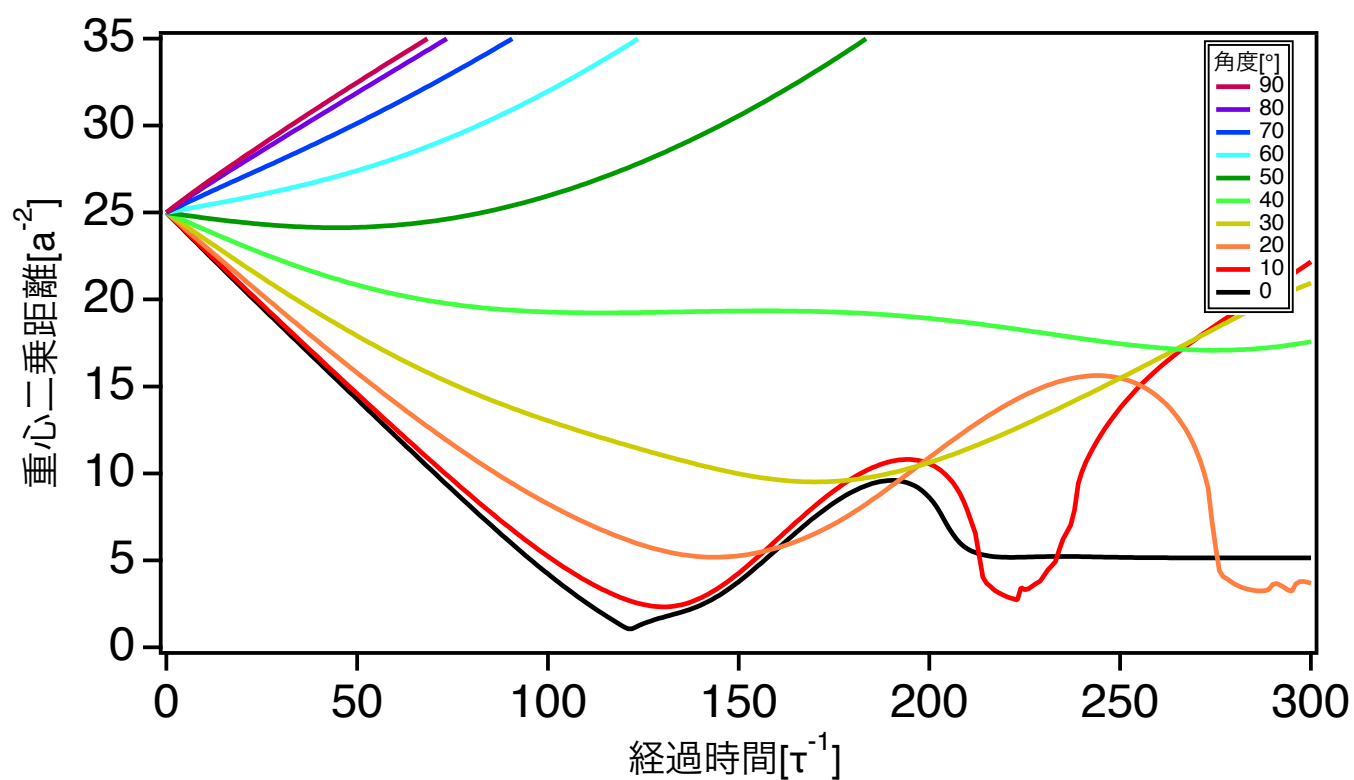


図 3.12: 中間の硬さの2つのフィラメントの重心二乗距離の時間変化

第4章

考察

4.1 二量体・凝集体の結成条件

今回の研究で、特定の硬さを持つアクティブフィラメントは凝集状態を作って回転したり、二量体構造を作って協調運動したりすることがわかった。これらの現象は硬さの条件に加えて、2つのフィラメントが近くに存在し、なおかつ比較的平行であるという厳しい配向条件を満たす場合においてのみ実現することがわかった。ランダムに初期配置した系においてはこの条件はなかなか満たされない。よって微生物などの実際のアクティブフィラメントにおいて、自然にこの状態が起こることは考えにくい。今回の研究では、フィラメント間の流体相互作用を除いて外部からの力を受けないと仮定した。しかし、外場や流体の外部の流れなどが存在すればこの条件を満たす可能性があると考えられる。これらの外部条件がフィラメントを同じ方向に揃えるはたらきをすれば、二量体や凝集体を生成すると考えられる。

4.2 二量体構造の安定性における考察

本項では二量対構造における各ビーズが受ける力の構成要素、またその力の大きさと向きについて考察する。

二量体構造は特徴的である特定の硬さを持つフィラメントにおいてのみ現れるので、ベンディングポテンシャルに依る力の影響が大きいと考えられる。しかし計算の結果によると、各ビーズが受ける力のうち流体相互作用によるものが支配的で、ベンディングポテンシャルに由来する力は全体の力の $10^{-4} \sim 10^{-5}$ 程度と小さい。したがって、二量体が結成され安定している状態においては流体相互作用が支配的な力としてはたらいっていることがわかった。しかし一方で、 $t=15.8[\tau_0]$ にでの柔らかいフィラメントでも一時的に二量体構造が現れ、その後崩壊している。ここから、二量体の安定状態ではベンディングポテンシャルの寄与は小さいものの、形成過程においては重要な役割を果たすと推定できる。

また、垂直方向に各ビーズが受ける力を別々に見ると打ち消されていないため、二量体構造が崩れてしまいそうに思われる。しかし各フィラメント全体として見ると0に近い値になっており、フィラメント全体では釣り合っていることがわかる。またそれぞれのフィラメントで $a1$ と $b1$ と名付けた、接着部分のビーズは他の3つのビーズと反対方向を向いていた。これはフィラメントが曲がろうとする力が働いていることがわかる。本計算ではベンディングによる力が0に近かったが、フィラメントが曲がろうとするとベンディングの力がこれを抑制すると考えられる。

4.3 今回のシミュレーションで考えていない要素

今回のシミュレーションでは、フィラメントはお互いの流体相互作用を除いて外部からの力を一切受けないと考えた。しかし、物体はブラウン運動を常にしているのでフィラメントの大きさに応じてこれを考慮する必要がある。一般に、小さい物体ほどブラウン運動の影響が大きくなる。微生物は $10^{-6}[m]$ のオーダーなので、ブラウン運動を方程式に組み入れる必要があるだろう。一方でオキアミは $10^{-3}[m]$ 程度のオーダーなので無視しても問題ないだろう。

4.4 1つのアクティブフィラメントのビーズの数

今回、アクティブビーズ4つで構成されるアクティブフィラメントを用いてシミュレーションを行った。これは3つの関節を持つモデルと考えられる。本研究を行うためには少なくともビーズを3つ以上にする必要があった。なぜならフィラメントの硬さを表現するベンディングポテンシャルは3つのビーズで作られる角度について定義されるからである。一方で、ビーズの数を増やしすぎることにもまた望ましくない。柔らかいフィラメントにおいてみられたように、2つのフィラメントは接近すると自身の体を変形させる。関節が多過ぎれば、大きく曲がってフィラメントが円形になってしまい、今回考えているモデルとは異なるものになってしまうだろう。

次にアクティブフィラメントの関節の数と柔らかさについて考える。関節の数が増えるほどフィラメントの中で曲がる箇所が多くなり、小さい力で大きく変形すると予想される。したがって、関節の数が多いフィラメントは少ないものに比べて柔らかくなり、より大きいベンディングポテンシャルで二量体構造や凝集状態が見られると考えられる。

第 5 章

結論

本研究では、今まで考慮されていなかったアクティブマターの柔軟性に注目して集団における集合性・協調運動にアプローチした。柔軟性を定義するために関節を持つアクティブフィラメントを作成し、3つのアクティブビーズで定義される角度を変数に持つベンディングポテンシャルを用いた。ベンディングポテンシャルの大きい、硬いアクティブフィラメントを先行研究と同様に平行に初期配置したところ、凝集し回転する様子が確認された。しかし一定時間後フィラメント同士は反発し離れてしまった。次に柔らかいフィラメントで同様のシミュレーションをしたところ、近距離においてフィラメントが変形してしまいそれ以上近づかなかった。続いて、硬いフィラメントと柔らかいフィラメントの中間の柔らかさのフィラメントを用いたところ、特徴的な V 字の二量体を構成し分解することなく協調運動することがわかった。この状態において、各アクティブビーズに働く力を進行方向に平行な方向と垂直な方向に分解した。平行な方向においては、すべてのビーズが二量体の進行方向に力を受けていた。垂直な方向においてはフィラメント内でビーズごとに受ける力の向き・大きさが異なった。しかしながらフィラメント全体で見ると垂直方向にほとんど力を受けていなかった。また、ランダムな初期配置ではどの柔らかさのアクティブフィラメントも集合体を作らなかった。

結果を踏まえて、アクティブマターの柔らかさの集合性への寄与、二量体の安定性、非極性なアクティブマターが集合体を作る外部条件に関して検討を行った。今後の課題として、外部流れを加えること、より多くのアクティブマターの系で計算を行うことが挙げられる。

付録

本研究で作成・使用したコードを以下に記載する。

```
#include <stdio.h>
#include <stdlib.h>
#include <time.h>
#include <math.h>

//アクティブフィラメント・箱の設定
#define Box_size 32 //計算する箱（正方形）の一辺
#define Polymer_N 2 //ポリマーの数
#define Beads_N 4 //1つのポリマーのビーズの数
#define Spring_length 1.0 //ビーズ間のバネの長さ

//計算環境
#define dt 5.0*pow(10,2) //計算刻み幅
#define Timestep_N 5000000 //計算回数
#define Observe_step 20000 //重心二乗距離計算における観察時間の刻み幅

#define PI 3.141592

//ポテンシャルのパラメーターなど
#define Force_magnitude pow(10,-8) //Active particle の力の強さ
#define gzai pow(10,-3) //粘性係数
#define INVgzai 1.0*pow(10,3) //粘性係数の逆数
#define K1 1.0*pow(10,-7) //バネ係数
#define Max_length 1.3 //バネの最大長さ
#define Epsiron 1.0*pow(10,-21) //L-J ポテンシャルのエネルギー係数
#define sigma 1.0

//ユーザー定義関数
```

```

double dtc(double ox,double oy,double bx,double by);
double yflow(double ox,double oy,double bx,double by,double yogen,double seigen);
double xflow(double ox,double oy,double bx,double by,double yogen,double seigen);
double Brownmotion(double mu,double bunsan);
double BendingForce_X(double x1,double y1,double x2,double y2,double x3,double y3);
double BendingForce_Y(double x1,double y1,double x2,double y2,double x3,double y3);

//*****
int main(){

    //ファイルの名前を決定する
    FILE *fp0;
    int filenumber;
    char Absolutelypath[128]="/nfs/maxhome00/shimada/201827/Data_" ;
    char extensionname[12] = ".txt";
    char timename[64]= "20180113_JJ_";
    char fname1[128],fname2[128],fname3[128],fname4[128];
    filenumber=0;
    sprintf(fname0,"%s%s%d%s",Absolutelypath2,timename,filenumber,extensionname);
    filenumber=1;
    sprintf(fname1,"%s%s%d%s",Absolutelypath,timename,filenumber,extensionname);
    filenumber=2;
    sprintf(fname2,"%s%s%d%s",Absolutelypath,timename,filenumber,extensionname);
    filenumber=3;
    sprintf(fname3,"%s%s%d%s",Absolutelypath,timename,filenumber,extensionname);
    filenumber=4;
    sprintf(fname4,"%s%s%d%s",Absolutelypath,timename,filenumber,extensionname);
    //*****

    int m,n,p,q;
    srand((unsigned int)time(NULL)); //乱数発生させる

    //計算の情報をファイルに書き入れる
    fp0=fopen(fname1,"w+");
    fprintf(fp1,"ステップ数=%d\n",Timestep_N);
    fprintf(fp1,"dt=%f\n",dt);
    fclose(fp1);

    double x[Polymer_N][Beads_N],y[Polymer_N][Beads_N];

```

```
int scheme=0;
while(scheme<N){ //N 回実験をする

    //この scheme での情報をファイルに書き足す
    double Bending_K= scheme * pow(10,-10); //ベンディング係数の値を変えながら計算
    fp0=fopen(fname1,"a+");
    fprintf(fp1,"scheme=%d\n",scheme);
    fprintf(fp1,"ベンディング K=%e\n",Bending_K);
    fclose(fp1);

    //初期座標の設定。計算に応じて平行配置・傾ける配置・ランダムな配置の3つを使い分ける
    //平行に配置する場合
    for(m=0;m<Polymer_N;m++){
        x[m][0] = 13.5 + 5.0*m; y[m][0] = 17.5;
        //2つ目のビーズの座標
        double rad1 = (double)rand() * PI /180.0;
        x[m][1] = 13.5 + 5.0*m; y[m][1] = 16.5;
        //3つ目のビーズの座標
        x[m][2] = 13.5 + 5.0*m; y[m][2] = 15.5;
        //4つ目のビーズの座標
        x[m][3] = 13.5 + 5.0*m; y[m][3] = 14.5;
    }

    //傾ける計算用初期配置。1つのフィラメントのみ10° ずつ傾ける。
    x[0][0] = 13.5; y[0][0] = 17.5;
    x[0][1] = 13.5; y[0][1] = 16.5;
    x[0][2] = 13.5; y[0][2] = 15.5;
    x[0][3] = 13.5; y[0][3] = 14.5;
    x[1][0] = 18.5+2*sin(PI*scheme/18.0); y[1][0] = 16.0+2*cos(PI*scheme/18.0);
    x[1][1] = 18.5+sin(PI*scheme/18.0); y[1][1] = 16.0+cos(PI*scheme/18.0);
    x[1][2] = 18.5-sin(PI*scheme/18.0); y[1][2] = 16.0-cos(PI*scheme/18.0);
    x[1][3] = 18.5-2*sin(PI*scheme/18.0); y[1][3] = 16.0-2*cos(PI*scheme/18.0);

    //フィラメントをランダムに初期配置する
    for(m=0;m<Polymer_N;m++){
        x[m][0] = rand()% Box_size + (double)rand()/(RAND_MAX+1.0);
        y[m][0] = rand()% Box_size + (double)rand()/(RAND_MAX+1.0);
```

```

//2つ目のビーズの座標
double rad1 = (double)rand() * PI /180.0;
x[m][1] = x[m][0] + Spring_length *cos(rad1);
y[m][1] = y[m][0] + Spring_length *sin(rad1);
//3つ目のビーズの座標
double rad2 = (double)rand() * PI /180.0;
x[m][2] = x[m][1] + Spring_length *cos(rad1);
y[m][2] = y[m][1] + Spring_length *sin(rad1);
//4つ目のビーズの座標
double rad3 = (double)rand() * PI /180.0;
x[m][3] = x[m][2] + Spring_length *cos(rad1);
y[m][3] = y[m][2] + Spring_length *sin(rad1);
}

//*****
//各座標における流れの計算

//流れ計算で使う変数の定義
double xclc[Polymer_N][Beads_N],yclc[Polymer_N][Beads_N];
double Nobi_x[Polymer_N][Beads_N], Nobi_y[Polymer_N][Beads_N];
double Dist_bead[Polymer_N][Beads_N];
double cosain1[Polymer_N][Beads_N],cosain2[Polymer_N][Beads_N];
double sine1[Polymer_N][Beads_N],sine2[Polymer_N][Beads_N];
double nobi1[Polymer_N][Beads_N],nobi2[Polymer_N][Beads_N];
double Bending_Fx[Polymer_N][Beads_N],Bending_Fy[Polymer_N][Beads_N];
double vctx[Polymer_N][Beads_N],vcty[Polymer_N][Beads_N];
double CentreDistance[Timestep_N/Observe_step];

int step=0;
while(step<Timestep_N){ //時間範囲の設定

    //画面の境界上にあるフィラメントの座標の処理をする
    //xclc,yclc は計算用の座標,x,y は実際に計算する座標
    if(step==0){
        for(m=0;m<Polymer_N;m++){
            for(n=0;n<Beads_N;n++){
                xclc[m][n]=x[m][n];
                yclc[m][n]=y[m][n];
            }
        }
    }
}

```

```

    }
}
else{
    for(m=0;m<Polymer_N;m++){
        xc1c[m][0]=x[m][0];
        yc1c[m][0]=y[m][0];
        for(n=0;n<(Beads_N-1);n++){
            if(x[m][n+1]-xc1c[m][n]<-1*(Box_size/2.0)){
                xc1c[m][n+1]=x[m][n+1]+Box_size;
            }
            else if(x[m][n+1]-xc1c[m][n]>(Box_size/2.0)){
                xc1c[m][n+1]=x[m][n+1]-Box_size;
            }
            else{
                xc1c[m][n+1]=x[m][n+1];
            }

            if(y[m][n+1]-yc1c[m][n]<-1*(Box_size/2.0)){
                yc1c[m][n+1]=y[m][n+1]+Box_size;
            }
            else if(y[m][n+1]-yc1c[m][n]>(Box_size/2.0)){
                yc1c[m][n+1]=y[m][n+1]-Box_size;
            }
            else{
                yc1c[m][n+1]=y[m][n+1];
            }
        }
    }
}

//フィラメントの重心距離を計算する
double xc0, xc1, yc0, yc1;
if(step%Observe_step==0){
    xc0 = (xc1c[0][0]+xc1c[0][1]+xc1c[0][2]+xc1c[0][3])/4.0;
    yc0 = (yc1c[0][0]+yc1c[0][1]+yc1c[0][2]+yc1c[0][3])/4.0;
    xc1 = (xc1c[1][0]+xc1c[1][1]+xc1c[1][2]+xc1c[1][3])/4.0;
    yc1 = (yc1c[1][0]+yc1c[1][1]+yc1c[1][2]+yc1c[1][3])/4.0;
    CentreDistance[step/Observe_step]=pow(xc0-xc1,2)+pow(yc0-yc1,2);
}

```

```

//ビーズの力の向きを考える
double seigen[Polymer_N][Beads_N], yogen[Polymer_N][Beads_N];
for(m=0;m<Polymer_N;m++){
    for(n=0;n<(Beads_N-1);n++){
        seigen[m][n]=(yclc[m][n]-yclc[m][n+1])
            /dtc(xclc[m][n],yclc[m][n],xcclc[m][n+1],yclc[m][n+1]);
        yogen[m][n]=(xcclc[m][n]-xcclc[m][n+1])
            /dtc(xclc[m][n],yclc[m][n],xcclc[m][n+1],yclc[m][n+1]);
    }
    seigen[m][Beads_N-1]=seigen[m][Beads_N-2]; //一番最後の粒子の力の向き
    yogen[m][Beads_N-1]=yogen[m][Beads_N-2];
}

//各座標でのフローの計算
for(m=0;m<Polymer_N;m++){
    for(n=0;n<Beads_N;n++){
        vctx[m][n]=0.0;
        vcty[m][n]=0.0;
        for(p=0;p<Polymer_N;p++){
            for(q=0;q<Beads_N;q++){
                if(m==p){
                    continue;//ビーズは自身による流れの影響を受けない
                }
                else{
                    vctx[m][n]=vctx[m][n]+xflow(xclc[m][n],yclc[m][n],
                        xcclc[p][q],yclc[p][q],yogen[p][q],seigen[p][q]);
                    vcty[m][n]=vcty[m][n]+yflow(xclc[m][n],yclc[m][n],
                        xcclc[p][q],yclc[p][q],yogen[p][q],seigen[p][q]);
                }
            }
        }
    }
}

//*****//
//フィラメントのばねポテンシャルを計算する
for(m=0;m<Polymer_N;m++){
    //フィラメント中の1つ目のビーズが感じる伸び
    cosain1[m][0]=(xcclc[m][0]-xcclc[m][1])

```

```

        /dtc(xclc[m][0],yclc[m][0],xclc[m][1],yclc[m][1]);
sine1[m][0]=(yclc[m][0]-yclc[m][1])
        /dtc(xclc[m][0],yclc[m][0],xclc[m][1],yclc[m][1]);
nobi1[m][0]=dtc(xclc[m][0],yclc[m][0],xclc[m][1],yclc[m][1])
        -Spring_length;
Nobi_x[m][0]=nobi1[m][0]*cosain1[m][0]; //伸びの x 成分
Nobi_y[m][0]=nobi1[m][0]*sine1[m][0]; //伸びの y 成分

//フィラメント中の2、3つ目のビーズを感じる伸び
for(n=1;n<=2;n++){
    cosain1[m][n]=(xclc[m][n]-xclc[m][n-1])
        /dtc(xclc[m][n],yclc[m][n],xclc[m][n-1],yclc[m][n-1]);
sine1[m][n]=(yclc[m][n]-yclc[m][n-1])
        /dtc(xclc[m][n],yclc[m][n],xclc[m][n-1],yclc[m][n-1]);
nobi1[m][n]=dtc(xclc[m][n],yclc[m][n],xclc[m][n-1],yclc[m][n-1])
        -Spring_length;

    cosain2[m][n]=(xclc[m][n]-xclc[m][n+1])
        /dtc(xclc[m][n],yclc[m][n],xclc[m][n+1],yclc[m][n+1]);
sine2[m][n]=(yclc[m][n]-yclc[m][n+1])
        /dtc(xclc[m][n],yclc[m][n],xclc[m][n+1],yclc[m][n+1]);
nobi2[m][n]=dtc(xclc[m][n],yclc[m][n],xclc[m][n+1],yclc[m][n+1])
        -Spring_length;

    Nobi_x[m][n]=nobi1[m][n]*cosain1[m][n]+nobi2[m][n]*cosain2[m][n];
    Nobi_y[m][n]=nobi1[m][n]*sine1[m][n] + nobi2[m][n]*sine2[m][n];
}

//フィラメント中の4つ目のビーズの伸び
cosain1[m][3]=(xclc[m][3]-xclc[m][2])
        /dtc(xclc[m][3],yclc[m][3],xclc[m][2],yclc[m][2]);
sine1[m][3]=(yclc[m][3]-yclc[m][2])
        /dtc(xclc[m][3],yclc[m][3],xclc[m][2],yclc[m][2]);
nobi1[m][3]=dtc(xclc[m][3],yclc[m][3],xclc[m][2],yclc[m][2])
        -Spring_length;
Nobi_x[m][3]=nobi1[m][3]*cosain1[m][3];
Nobi_y[m][3]=nobi1[m][3]*sine1[m][3];
}

//求めた伸びから FENE ポテンシャルを計算する
for(m=0;m<Polymer_N;m++){

```

```

        for(n=0;n<Beads_N;n++){
            FENE_X[m][n] = K1 * (Nobi_x[m][n]*pow(Max_length,2))
                /(pow(Max_length,2)-pow(Nobi_x[m][n],2));
            FENE_Y[m][n] = K1 * (Nobi_y[m][n]*pow(Max_length,2))
                /(pow(Max_length,2)-pow(Nobi_y[m][n],2));
        }
    }

//*****
//L-J ポテンシャルを計算する
double Fljx[Polymer_N][Beads_N], Fljy[Polymer_N][Beads_N],Flj;
for(m=0;m<Polymer_N;m++){
    for(n=0;n<Beads_N;n++){
        Fljx[m][n]=0.0; Fljy[m][n]=0.0;
        for(p=0;p<Polymer_N;p++){
            for(q=0;q<Beads_N;q++){
                if(m==p&& n==q){
                    continue; //自分自身と計算することを避ける
                }
                double beadsdtc = dtc(xclc[m][n],yclc[m][n]
                    ,xclc[p][q],yclc[p][q]);
                if(beadsdtc-pow(2,1/6)*sigma > 2.0){
                    //引力は無視。安定長より近い斥力のみを考える
                    continue;
                }
                double cosain = (xclc[m][n]-xclc[p][q]) / beadsdtc;
                double sain = (yclc[m][n]-yclc[p][q]) / beadsdtc;
                Flj = 4.0 * Epsiron * (12.0 * pow(sigma,12)
                    /pow(beadsdtc,13)-6.0*pow(sigma,6)/pow(beadsdtc,7));
                Fljx[m][n]= Fljx[m][n] + cosain * Flj;
                Fljy[m][n]= Fljy[m][n] + sain * Flj;
            }
        }
    }
}

//*****

```

```

//ベンディングポテンシャルの計算
for(m=0;m<Polymer_N;m++){
    double u1x=xclc[m][1]-xclc[m][0];
    double u1y=yclc[m][1]-yclc[m][0];
    double u1s=sqrt(pow(u1x,2)+pow(u1y,2));
    double u2x=xclc[m][2]-xclc[m][1];
    double u2y=yclc[m][2]-yclc[m][1];
    double u2s=sqrt(pow(u2x,2)+pow(u2y,2));
    double u3x=xclc[m][3]-xclc[m][2];
    double u3y=yclc[m][3]-yclc[m][2];
    double u3s=sqrt(pow(u3x,2)+pow(u3y,2));

    double cosain1=(u1x*u2x+u1y*u2y)/(u1s*u2s);
    double cosain2=(u2x*u3x+u2y*u3y)/(u2s*u3s);

    double F1x = 2*Bending_K*(cosain1-1.0)
        /(u1s*u2s)*(u2x-(u1x*u2x+u1y*u2y)/pow(u1s,2)*u1x);
    double F1y = 2*Bending_K*(cosain1-1.0)
        /(u1s*u2s)*(u2y-(u1x*u2x+u1y*u2y)/pow(u1s,2)*u1y);

    double F2x = -2*Bending_K*(cosain1-1.0)
        /(u1s*u2s)*(u1x-(u1x*u2x+u1y*u2y)/pow(u2s,2)*u2x);
    double F2y = -2*Bending_K*(cosain1-1.0)
        /(u1s*u2s)*(u1y-(u1x*u2x+u1y*u2y)/pow(u2s,2)*u2y);

    double F3x = 2*Bending_K*(cosain2-1.0)
        /(u2s*u3s)*(u3x-(u2x*u3x+u2y*u3y)/pow(u2s,2)*u2x);
    double F3y = 2*Bending_K*(cosain2-1.0)
        /(u2s*u3s)*(u3y-(u2x*u3x+u2y*u3y)/pow(u2s,2)*u2y);

    double F4x = -2*Bending_K*(cosain2-1.0)
        /(u2s*u3s)*(u2x-(u2x*u3x+u2y*u3y)/pow(u3s,2)*u3x);
    double F4y = -2*Bending_K*(cosain2-1.0)
        /(u2s*u3s)*(u2y-(u2x*u3x+u2y*u3y)/pow(u3s,2)*u3y);

    Bending_Fx[m][0]=F1x;
    Bending_Fy[m][0]=F1y;
    Bending_Fx[m][1]=F3x-F1x-F2x;
    Bending_Fy[m][1]=F3y-F1y-F2y;
    Bending_Fx[m][2]=F2x-F3x-F4x;
    Bending_Fy[m][2]=F2y-F3y-F4y;
}

```

```

        Bending_Fx[m][3]=F4x;
        Bending_Fy[m][3]=F4y;
    }

//*****
double Fbmotion[Polymer_N][Beads_N],Fxbmotion[Polymer_N][Beads_N]
double Fybmotion[Polymer_N][Beads_N],rad[Polymer_N][Beads_N];
double FENE_X[Polymer_N][Beads_N],FENE_Y[Polymer_N][Beads_N]
double dx[Polymer_N][Beads_N],dy[Polymer_N][Beads_N];

//ブラウン運動によるランダム力。今回は使っていない
for(m=0;m<Polymer_N;m++){
    for(n=0;n<Beads_N;n++){
        rad[m][n] = (double)rand() * PI / 180.0;
        Fbmotion[m][n] = Brownmotion(0,2.153*pow(10,-16));
        Fxbmotion[m][n] = Fbmotion[m][n] * cos(rad[m][n]);
        Fybmotion[m][n] = Fbmotion[m][n] * sin(rad[m][n]);
    }
}

//漸化式
for(m=0;m<Polymer_N;m++){
    for(n=0;n<Beads_N;n++){
        dx[m][n] = dt * ( vctx[m][n] + INVgzai*(Fljx[m][n]
            /* Fxbmotion[m][n]*/ + Bending_Fx[m][n] - FENE_X[m][n]));
        x[m][n] = dx[m][n] + x[m][n];
        dy[m][n] = dt * ( vcty[m][n] + INVgzai*(Fljy[m][n]
            /* Fybmotion[m][n]*/ + Bending_Fy[m][n] - FENE_Y[m][n]));
        y[m][n] = dy[m][n] + y[m][n];
    }
}

//特定の時間においてビーズが受ける力を出力するファイル
if(step=="注目したいステップ数"){
    fp1=fopen(fname1,"w+");
    fprintf(fp1,"ステップ=%d\n",step);
    for(m=0;m<Polymer_N;m++){
        for(n=0;n<Beads_N;n++){

```

```

        fprintf(fp1,"%d%d\n",m,n);
        fprintf(fp1,"Fluid %f\t%f\n",vctx[m][n],vcty[m][n]);
        fprintf(fp1,"L-J %f\t%f\n",Fljx[m][n],Fljy[m][n]);
        fprintf(fp1,"Bend %f\t%f\n",Bending_Fx[m][n],Bending_Fy[m][n]);
        fprintf(fp1,"FENE %f\t%f\n",FENE_X[m][n],FENE_Y[m][n]);
    }
}
fclose(fp1);
}

for(m=0;m<Polymer_N;m++){
    for(n=0;n<Beads_N;n++){
        //計算の結果枠の外に出ている粒子を修正
        if(x[m][n]>Box_size){
            x[m][n]=x[m][n]-Box_size;
        }
        if(x[m][n]<0.0){
            x[m][n]=x[m][n]+Box_size;
        }
        if(y[m][n]>Box_size){
            y[m][n]=y[m][n]-Box_size;
        }
        if(y[m][n]<0.0){
            y[m][n]=y[m][n]+Box_size;
        }
    }
}

//ファイルに座標を書き出す

if(step==Timestep_N/20){ //見たい計算時間における各ビーズの座標を出力
    fp3=fopen(fname3,"w+");
    for(m=0;m<Polymer_N;m++){
        for(n=0;n<Beads_N;n++){
            fprintf(fp3,"%f\t%f\t0.0\n",x[m][n],y[m][n]);
        }
    }
    fclose(fp3);
}

```

```

        step++; //時間を進める
    }

    //重心距離のファイルへの書き込み
    if(scheme==N){ //scheme の値によってベンディング K の値が決まる
        fp4=fopen(fname4,"w+");
        for(n=0;n<(Timestep_N/Observe_step);n++){
            //Observe_step の倍数ごとに重心二乗距離を書き出す
            fprintf(fp4,"%d\t%f\n",n*Observe_step,CentreDistance[n]);
        }
        fclose(fp4);
    }

    scheme++;
}

return 0;
}

//*****
//ユーザー定義関数の欄

//2つの座標の距離を計算する
double dtc(double ox,double oy,double bx,double by){
    double r=sqrt(pow(ox-bx,2)+pow(oy-by,2));
    return r;
}

// (bx,by) に (yogen,seigen) を向いているビーズがある時、計算座標 (ox,oy) における x・y 方向の
// 流れを計算する
double yflow(double ox,double oy,double bx,double by,double yogen,double seigen){
    //ox,oy は計算座標、bx ± 0.5,by ± 0.5 に force がある
    double fxd= Force_magnitude*yogen, fyd= Force_magnitude*seigen;
    double fxu= -1.0*Force_magnitude*yogen, fyu=-1.0*Force_magnitude*seigen;
    double Flow,Flow_up,Flow_down,Dis_up,Dis_down;
    Dis_up=sqrt(pow(ox-(bx+0.5*yogen),2)+pow(oy-(by+0.5*seigen),2));
    Dis_down=sqrt(pow(ox-(bx-0.5*yogen),2)+pow(oy-(by-0.5*seigen),2));
    Flow_up=(fyu/Dis_up)+(oy-(by+0.5*seigen))*(fxu*(ox-(bx+0.5*yogen))

```

```

        +fyu*(oy-(by+0.5*yogen)))/pow(Dis_up,3);
Flow_down=(fyd/Dis_down)+(oy-(by-0.5*seigen))*(fxd*(ox-(bx-0.5*yogen))
        +fyd*(oy-(by-0.5*seigen)))/pow(Dis_down,3);
return Flow=Flow_up+Flow_down;
}

double xflow(double ox,double oy,double bx,double by,double yogen,double seigen){
    double fxu= Force_magnitude*yogen, fyu= Force_magnitude*seigen;
    double fxd= -1.0*Force_magnitude*yogen, fyd=-1.0*Force_magnitude*seigen;
    double Flow,Flow_up,Flow_down,Dis_up,Dis_down;
    Dis_up=sqrt(pow(ox-(bx+0.5*yogen),2)+pow(oy-(by+0.5*seigen),2));
    Dis_down=sqrt(pow(ox-(bx-0.5*yogen),2)+pow(oy-(by-0.5*seigen),2));
    Flow_up=(fxu/Dis_up)+(ox-(bx+0.5*yogen))*(fxu*(ox-(bx+0.5*yogen))
        +fyu*(oy-(by+0.5*seigen)))/pow(Dis_up,3);
    Flow_down=(fxd/Dis_down)+(ox-(bx-0.5*yogen))*(fxd*(ox-(bx-0.5*yogen))
        +fyd*(oy-(by-0.5*seigen)))/pow(Dis_down,3);
    return Flow=Flow_up+Flow_down;
}

//ブラウン運動のランダムな力を計算する
double Brownmotion(double mu,double bunsan){
    double x,y,z;
    x = rand() / (RAND_MAX+1.0);
    y = rand() / (RAND_MAX+1.0);
    z = sqrt(-2.0*log(x))*cos(2.0*PI*y);
    return bunsan*z+mu;
}

```

謝辞

他研究科に移動するため一年間しか本研究室に在籍しないにも関わらず、終始温かくご指導して下さった指導教員である増淵雄一教授に厚く御礼申し上げます。

また、ソフトマターのゼミを行なってくださり、研究を進める上で多くの助言を下さった山本哲也助教授、多くのアドバイスを下さった天本義史様、Ankita Pandey 様に感謝します。研究室の中で常に気をかけてくださり、時に優しく指導して下さった磯田卓万先輩、高田寛人先輩、平山貴也先輩、久世雅大先輩、夏目享治先輩にお礼申し上げます。そして研究室の同期として共に勉学を励み切磋琢磨してきた浅井崇君、草田慧君、後藤一真君、佐々木弘至君に感謝します。来年度から進む道は分かれますが、お互い高め合いながらそれぞれ精進できればと思います。最後に、私の学生生活を支えてくださった家族、友人に感謝します。本当にありがとうございました。

参考文献

- 1) R. Golestanian, J. M. Yeomans, and N. Uchida. Hydrodynamic synchronization at low reynolds number. *Soft Matter*, Vol. 7, No. 7, pp. 3074–3082, 2011.
- 2) T. Vicsek and A. Zafeiris. Collective motion. *Physics Reports-Review Section of Physics Letters*, Vol. 517, No. 3-4, pp. 71–140, 2012.
- 3) E. M. Purcell. Life at low reynolds-number. *American Journal of Physics*, Vol. 45, No. 1, pp. 3–11, 1977.
- 4) M. Polin, I. Tuval, K. Drescher, J. P. Gollub, and R. E. Goldstein. Chlamydomonas swims with two "gears" in a eukaryotic version of run-and-tumble locomotion. *Science*, Vol. 325, No. 5939, pp. 487–490, 2009.
- 5) X. L. Wu and A. Libchaber. Particle diffusion in a quasi-two-dimensional bacterial bath. *Physical Review Letters*, Vol. 84, No. 13, pp. 3017–3020, 2000.
- 6) M. S. D. Wykes, J. Palacci, T. Adachi, L. Ristroph, X. Zhong, M. D. Ward, J. Zhang, and M. J. Shelley. Dynamic self-assembly of microscale rotors and swimmers. *Soft Matter*, Vol. 12, No. 20, pp. 4584–4589, 2016.
- 7) G. P. Alexander and J. M. Yeomans. Dumb-bell swimmers. *Epl*, Vol. 83, No. 3, p. 6, 2008.
- 8) P. T. Underhill, J. P. Hernandez-Ortiz, and M. D. Graham. Diffusion and spatial correlations in suspensions of swimming particles. *Physical Review Letters*, Vol. 100, No. 24, p. 4, 2008.
- 9) E. L. Jewell, W. Wang, and T. E. Mallouk. Catalytically driven assembly of trisegmented metallic nanorods and polystyrene tracer particles. *Soft Matter*, Vol. 12, No. 9, pp. 2501–2504, 2016.
- 10) A. Pandey, P. B. S. Kumar, and R. Adhikari. Flow-induced nonequilibrium self-assembly in suspensions of stiff, apolar, active filaments. *Soft Matter*, Vol. 12, No. 44, pp. 9068–9076, 2016.
- 11) M. J. Kim and K. S. Breuer. Enhanced diffusion due to motile bacteria. *Physics of Fluids*, Vol. 16, No. 9, pp. L78–L81, 2004.
- 12) 生物流体力学. 朝倉書店, 2012.
- 13) J. de Paula. アトキンス物理化学要論. 東京化学同人, 2012.
- 14) K. Kremer and G. S. Grest. Dynamics of entangled linear polymer melts - a molecular-dynamics simulation. *Journal of Chemical Physics*, Vol. 92, No. 8, pp. 5057–5086, 1990.
- 15) 流体の力学. コロナ社, 1994.