

# 國立交通大學

物理研究所

碩士論文

細菌鞭毛集體旋轉的時空結構分析

The temporal and spatial analysis on the collective motions of  
flagella

研究生：姜禮帆

指導教授：張正宏 副教授

中華民國一百零三年七月

細菌鞭毛集體旋轉的時空結構分析

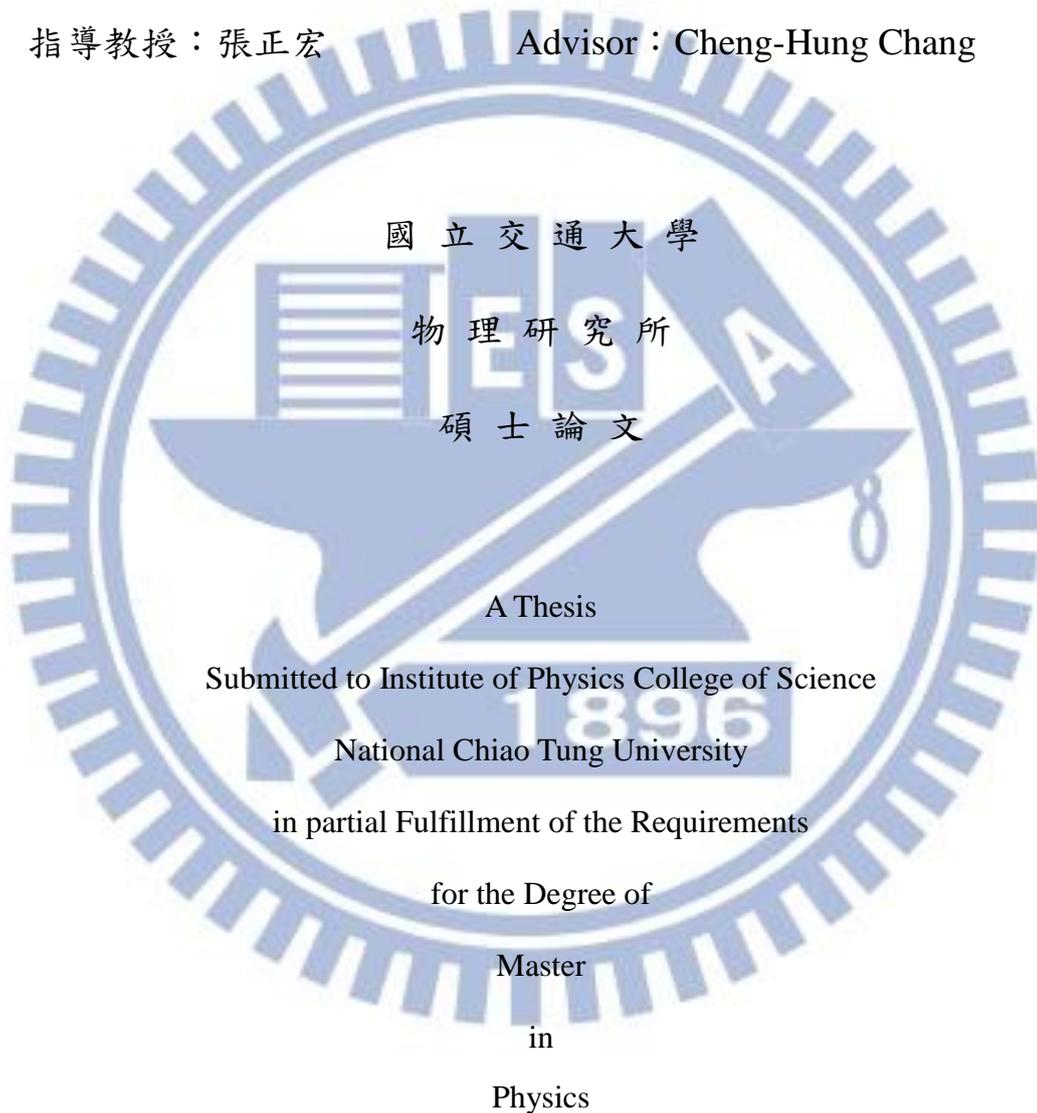
The temporal and spatial analysis on the collective motions of  
flagella

研究生：姜禮帆

Student : Li-Fan Chiang

指導教授：張正宏

Advisor : Cheng-Hung Chang



國立交通大學

物理研究所

碩士論文

A Thesis

Submitted to Institute of Physics College of Science

National Chiao Tung University

in partial Fulfillment of the Requirements

for the Degree of

Master

in

Physics

July 2014

Hsinchu, Taiwan, Republic of China

中華民國一百零三年七月

# 細菌鞭毛集體旋轉的時空結構分析

學生：姜禮帆

指導教授：張正宏 副教授

國立交通大學物理研究所碩士班

## 摘要

在這篇論文中，將利用簡單模型 Microorganism-flagellum-rotor matrix ( $MFR_{matrix}$ )來摹擬真實世界中繁複的細菌鞭毛集體行為。系統藉由介質液體與轉子(rotor)間的液力耦合，細菌鞭毛陣列在培養基板上產生多樣化的圖像。每根細菌鞭毛，均是一個有效的微小剛體模型，由內部的扭矩和彼此間的耦合力推動周圍的流體。流體力學交互作用(hydrodynamic interaction)的長距離性質在鞭毛間產生多樣的動力學行為，包括相序同步和 self-proliferating 螺旋波。我們發現小系統出現一種隨時間週期變化的特殊“平行波”狀態，其深深地受初始條件的影響。於此基礎，增加在週期性邊界條件下，觀察系統是否具有區域同步化的行為，可與磁軸區域性磁化的現象類比。

# **The temporal and spatial analysis on the collective motions of flagella**

**Student : Li-Fan Chiang**

**Advisor : Cheng-Hung Chang**

**Institute of Physics National Chiao Tung University**

## **Abstract**

In this study, we propose simple Microorganism-flagellum-rotor matrix ( $MFR_{matrix}$ ) model to mimick real circumstances and complex bacteria flagellum rotation behavior. We study synchronization of an array of rotors on a substrate that are coupled by hydrodynamic interaction. Each flagellum, which is effectively modeled by a rigid rotor, is driven by an internal torque and exerts an active force on the surrounding fluid. The long-ranged nature of the hydrodynamic interaction between the rotors causes a rich pattern of dynamical behaviors including phase ordering and self-proliferating spiral waves. We find that plane waves (parallel wave) which comes from small systems strongly depend on the initial condition. After adding periodic boundary conditions to the circumstance of the bacterial carpet, we can compare how the bacterial carpet changes with magnetization phenomenon

## 誌謝

到了動筆寫誌謝的時間點，某種程度這也許是最不容易撰寫的部份，不急著振筆疾書，且讓思緒領著我回顧在交通大學這兩年的日子……

兩年前的研究所新鮮人，對於研究的領域有著好奇、憧憬與急於證明自己的慾望。基於體制下的規範和好奇心的交互作用下，在一次的演講課程中，對演講者所提及細菌鞭毛的運動機制感到興趣，於是便一頭栽進生物物理領域，幸運地，最後這個主題延伸成就了這篇論文的出世。

非常感謝正宏老師在研究上給予極大的自由學習空間，一切都讓學生自己發想問題、尋找答案，偶爾給予不同角度的思維方式、從共同討論中迸出新的火花，而在研究過程中，政展學長前後給予相當多的援助，特別感謝德明學長經常幫我釐清問題根本；而宏慶學長則是在模擬技巧上給予相當多的協助。同時也謝謝賜得與冠智，一起窩在研究室度過這兩年，時而讀書討論、時而輕鬆遊戲，互相支持激勵彼此。最後要感謝的是我的父母，他們栽培我到交通大學物理研究所學習，一路上從不過問我的想法，讓我可以自由地做想做的事情，非常感恩。

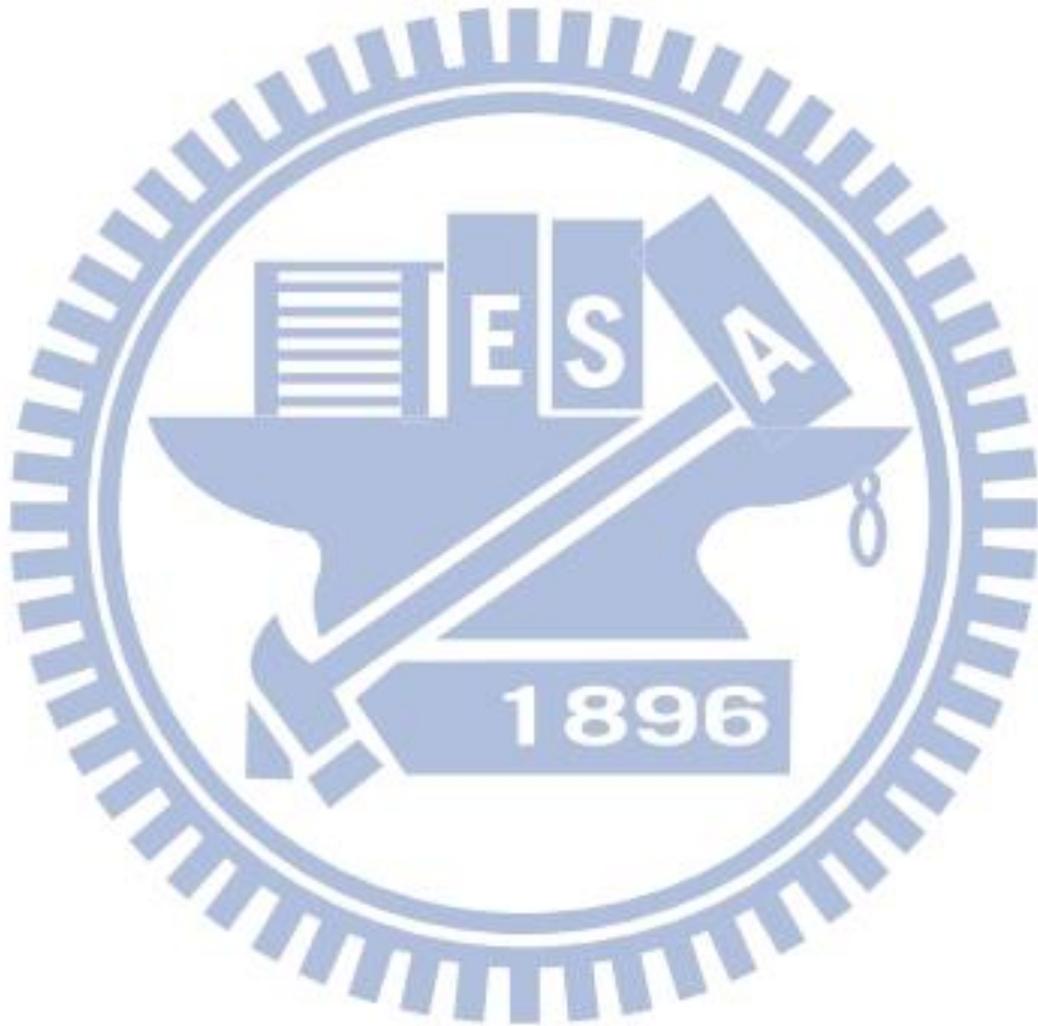
我想「結束」僅僅代表階段性的休息，經過交通大學兩年的薰陶，期許在未來的道路上依舊能夠保持學習的熱忱。

# 目錄

中文摘要 .....	i
英文摘要 .....	ii
誌謝 .....	iii
目錄 .....	iv
表目錄 .....	v
圖目錄 .....	vi
第一章、緒論 .....	1
第二章、理論基礎 .....	4
2.1 低雷諾數生物系統的早期發展 .....	4
2.1.1 流體動力學的同步化研究 .....	5
2.1.2 流體動力學同步化模型 .....	7
2.1.3 Swimmers 的流體動力學同步化 .....	8
2.2 生物的集群行為與同步 .....	8
2.3 低雷諾數流體的理論 .....	10
2.4 The Oseen Tensor .....	12
2.5 地毯結構的細菌陣列 .....	13
第三章、實驗架設 .....	16
3.1 模型建構與模擬計算 .....	16
3.2 週期性邊界條件 .....	20
第四章、分析與討論 .....	22
第五章、結論與未來工作 .....	36
文獻參考 .....	37

# 表目錄

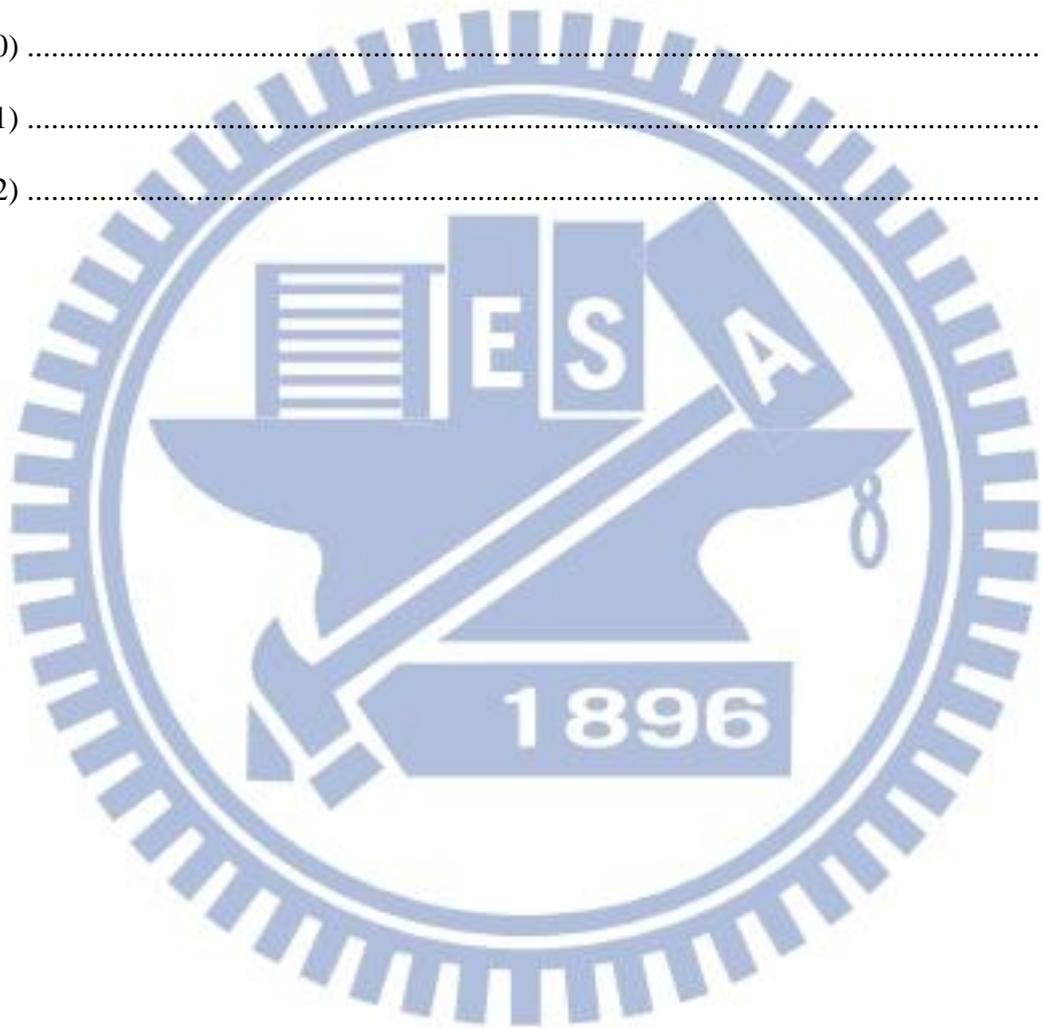
表(1)小系統 beta angle 測試.....	26
表(2) System size - correlation length.....	32
表(3) correlation length - beta angle.....	34



# 圖目錄

圖(1) .....	1
圖(2) .....	2
圖(3) .....	3
圖(4) .....	6
圖(5) .....	9
圖(6) .....	9
圖(7) .....	13
圖(8) .....	14
圖(9) .....	15
圖(10) .....	16
圖(11) .....	17
圖(12) .....	19
圖(13) .....	20
圖(14) .....	20
圖(15) .....	21
圖(16) .....	22
圖(17) .....	23
圖(18) .....	24
圖(19) .....	24
圖(20) .....	25
圖(21) .....	27
圖(22) .....	27
圖(23) .....	29

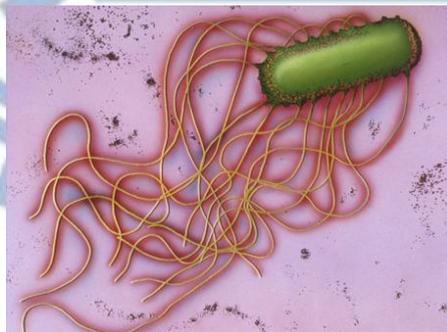
圖(24) .....	29
圖(25) .....	30
圖(26) .....	30
圖(27) .....	31
圖(28) .....	32
圖(29) .....	33
圖(30) .....	33
圖(31) .....	34
圖(32) .....	35



# 第一章、緒論

當音樂演奏會結束時，觀眾齊聲的鼓掌、棒球賽場上觀眾此起彼落的波浪舞，這些由人類大規模集體產生的行為，內部蘊含著有趣的機制。宏觀世界裡充斥著這種生物群聚行為，海裡游動的魚群、規律的鳥隊飛行等比比皆是；而微觀生物世界也同樣存在著相似的群聚行為，比如寄生人類腸道中的大腸桿菌追逐營養素、精蟲細胞游向卵細胞等，他們有的時候需要依靠集體規律的運動模式達成目的。

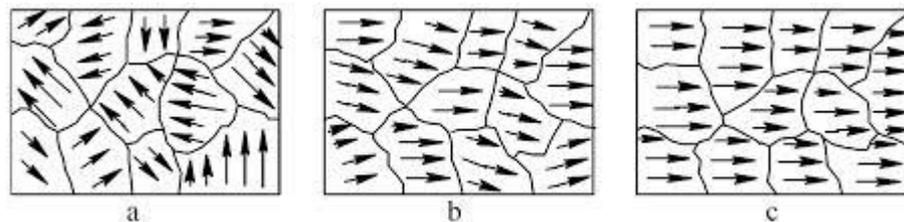
以大腸桿菌鞭毛集體運動而言，造成這些行為的內部勢必存在某種作用力。流體交互作用力是種可能。為探討這種作用力對細菌鞭毛集體行為的影響，近來科學家利用細菌鞭毛地毯探討他們的同步轉動現象[1]。實驗上可將大量鞭毛細菌種於基板上形成一片鞭毛地毯，控制鈉離子濃度來調節鞭毛的旋轉速度，並研究地毯上顆粒的擴散行為及鞭毛的集體同步轉動的可能性[6]。在此系統，鞭毛能同步的條件是他們之間存在某種弱的交互作用力，目前有人認為是流體交互作用[1]，也有人提出是流體阻力的振動[7]。何者重要，仍是討論中的問題，但至少電腦模擬已發現純流體交互作用的確可導致同步[1]。



圖(1) 具有鞭毛的細菌

生物行為同步化在自然界中是相當普遍的存在，過去已觀察到不少的現象與實驗為佐證，而本研究將注意力擺在生物系統從無序行為趨向同步或有序狀態的過程。如前述提及觀眾的集體鼓掌，有時並非整齊劃一，常看到的是區域同步，它有可能是趨

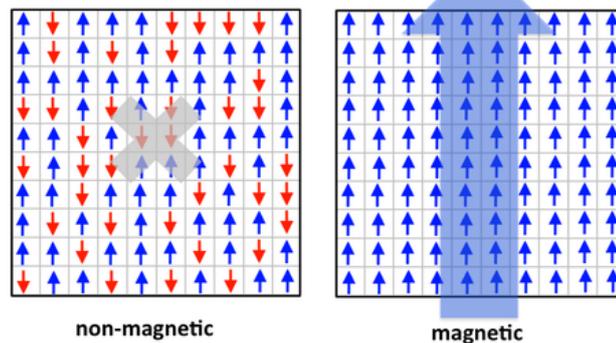
向同步過程的暫態，也可能是已進入某種高維度的 limit cycle 或奇異吸子。這好比磁性物質在磁化過程，環境施予外加磁場，磁性物質由混亂的磁軸分布，漸漸演變成磁軸區域性磁化，假如外磁場夠強，最後物質內部所有的磁軸將會與外加磁場的方向一致，如圖(2)。



圖(2) 磁性物質磁化過程

造成鞭毛同步與磁場磁化的機制，兩者存在著有趣的對應關係。細菌鞭毛地毯裡的流體交互作用之於細菌鞭毛，好比 Ising spin lattice 中的耦合常數(coupling constant)之於 spin；後者屬靜態平衡問題，系統吸子為 fixed point；前者則是動態周期性問題，系統吸子是 limit cycle。此生物系統在趨向同步化或更複雜動態行為過程中，似乎與磁化過程有相對應的行為，進一步的關聯值得討論。例如若改變鈉離子的濃度，相當於改變個別鞭毛的轉速；改變 thrust force 角度，可改變交互作用型態。我們好奇這些參數和統計熱力學裡的溫度、序參數、Lyapunov 函數、關聯長度(correlation length)、相變、鐵磁性材料的遲滯效應等等之間的對應。

magnetic moments



圖(3) Ising Model for magnetism。外加磁場對 Ising model 中個別 spin 的影響

細菌藉由與液體介質耦合形成特別的集體運動，來進行傳遞、掠食、驅動等行為。譬如細菌鞭毛處在高黏滯係數介質及微小尺度的低雷諾數(low Reynold number)環境下，黏滯力取代慣性力掌控系統行為，介質在這些物體間產生一個長程距離的流體交互作用力，導致複雜的多體行為。

雷諾數的定義是，在時間演化的流動液體中，Navier-Stokes equation 的慣性力與黏滯力的比值。對一個重量密度 $\rho$ 、黏滯係數為 $\eta$ 、流體速度 $v$ 、邊界長為 $L$ 的流體系統，其雷諾數為 $R_e = \rho v L / \eta$ 。在低雷諾數的環境裡（低尺度、高黏滯係數）流體動力學中黏滯力較為顯著，對於水中微生物而言，典型的尺度大小為 $l \sim 10 \mu m$ 、 $v \sim 10 \mu m / s$ 、 $\eta = 1.5 \times 10^{-6} (\mu g / \mu m \cdot s)$ ，其雷諾數 $R_e \sim 10^{-4}$ 相當小[2]。

英國物理學家 G.I. Taylor 爵士在 1951 年開始此方面的研究，他將注意力集中在生物體的游動與流體動力學之間的關係，他認為慣性力的作用遠小於黏性耗散，由於慣性力的不顯著，這點意味著早期習慣使用的流體力學知識，無法準確地描述微小生物體是如何地驅動自己前進。於是，透過與英國劍橋大學動物學家 James Gray 所做的一系列研究，Taylor 提出一些重要的概念。當時已有觀察研究顯示，當兩隻或兩隻以上的雄性生殖細胞彼此靠近時，生殖細胞尾巴擺動的頻率會趨向達到一致[2]。針對此發現，Taylor 提出流體交互作用的概念解釋觀察到的現象，並做了定量且有系統的計算，說明同相位同步化的擺動系統可以使能量消散率達到最小值。爾後 Taylor 使用大量的論證和明確的計算說明在沒有外力的作用下，微生物在黏性介質中單向運動是可能的。

在此章緒論之後，下章將回顧過去生物系統的集體行為與流體動力學背景知識；第三章包含了實驗架構與模擬計算的方法；第四章是此研究的分析與探討；最後一章則是結論與未來研究方向。

## 第二章、理論基礎

微生物的群聚運動屬非平衡動態多體問題，其行為千變萬化。這種生物生存於低雷諾數的環境底下，在此環境裡，慣性力和黏滯力之間的消長讓系統有著有別於宏觀系統的行為。理論工作已預言在微生物系統中存在相位同步的可能性。例如 *Uchida* 等人的轉子陣列理論模擬了有趣的細菌地毯，展示出鞭毛群聚在固體表面附近的同步集體行為，這類行為的特性及如何趨向這類行為的過程有待更深入研究。

在低雷諾數介質裡，細菌通過旋轉鞭毛向前推進，能夠在這個系統下展現各種游動行為。自由游動的細菌對周圍流體施加推力產生流場，透過流體力學的交互作用，驅動力藉由水的擴散達到長距離交互作用的特點，使細菌鞭毛彼此之間的運動可以相互耦合，提供了鞭毛之間的液力耦合能力，將導致各種有意思的多體行為。然而由於細菌地毯本身存在著邊界效應，對稱性破壞的因素，水動力相互作用會在固體邊界產生形式上的改變。換句話說，無滑動 (no-slip) 條件的存在，提供了系統額外流量的鏡像來源。邊界附近的流體疊加在遠場處產生了一個淨流場。這樣的研究可以幫助在邊界附近的流體行為進行解析。

### 2.1 低雷諾數生物系統的早期發展

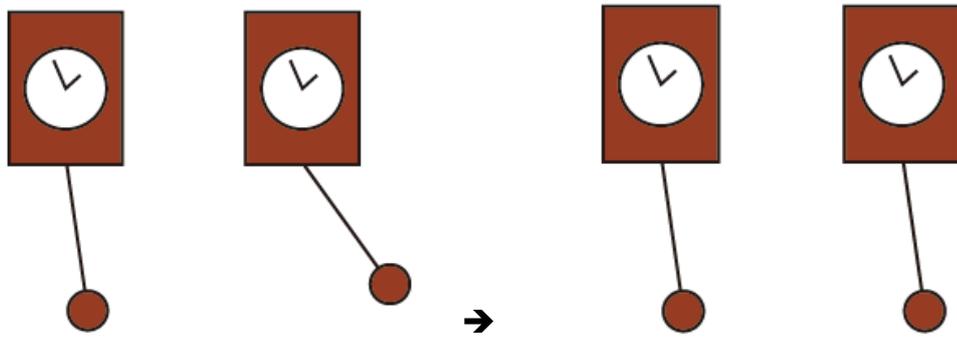
以 G. I. Taylor 為研究的開創先鋒，以及後來提出微生物扭矩模型的 Lighthill 兩人為首，發展出低雷諾數環境下黏性流體動力學的理论研究。該研究起初著重在具有單鞭毛微生物的游動行為，爾後又觀察到多體系統的特性，如纖毛群擺盪圖樣和有趣的 metachronism 現象[2]。當生物系統只存在很少的自由度時，由於方程式(5)的可逆性，使得系統難以達到自我推進的行為。E. Purcell 證實了在低雷諾數環境下，一個微小模型至少要有兩個自由度，只有一個自由度是無法使系統自行推進，他的概念後來成為

發展簡單游動模型的研究基礎。為了明白微觀生物在低雷諾數環境下如何推動自己向前游動，Taylor 以及其他研究夥伴認為，交互影響的運動行為可以提供解釋，這成為一項很具開創性的研究工作。在過去的幾十年裡對相關領域造成影響，研究人員感到興趣的課題包括旋轉鞭毛之間是如何交互運作的，和纖毛傳輸效率是多少。

1973 年 H. Berg 等人首次研究發現細菌是依靠旋轉鞭毛向前游動[8]，在此之前普遍認為細菌是靠擺動鞭毛推進。後來，Purcell 的文章“低雷諾數的生命”(Life at low Reynold number)使黏性流體力學在物理學界得到普及[9]。文中他描述了與 H. Berg 合作進行細菌推進的工作。Taylor 在這個題目上的興趣顯然是受到劍橋大學動物學家 J. Gray 的啟發，要在低雷諾數環境下推進的主要困難是運動是可逆的，通過可逆的運動一週期後，人們總是回到狀態的出發點。Purcell 用扇貝定理來普及這種想法，這個定理是說，一個扇貝(一種只有一個關節的物體)在黏性流體中原則上是不能靠自己游泳的[9]。Taylor 研究一些破壞可逆性的簡單游動方式，並證明了淨單向運動是如何成為可能的。這些想法後來有很多應用，從微機械的設計到奇怪生物推進機制的原始雛形。Taylor 也製作了迄今仍在使用的教學電影“低雷諾數流動”，這部電影很多人是熟悉的，它被視為 Taylor 創造力的佐證。

### 2.1.1 流體動力學的同步化研究

同步現象的歷史可追溯至 17 世紀歐洲大航海時代。隨著太陽與船隻的相對位置不斷改變，增加了天象計時的困難，因此無差錯計時是安全和準確的導航必不可少的，準確的機械鐘成為科學發展的重要目標。Christian Huygens (1629 年至 1695 年) 注意到掛在牆上兩個擺鐘的鐘擺最後會齊聲擺動，如圖(4)，這是因為兩個鐘擺對牆面施加力量產生微小振動，通過此振動建立彼此間的交互作用，據說這是人們第一次發現同步的現象。



圖(4) 節拍器上的鐘擺同步實驗

同步化在自然界中是一件相當獨特的現象，可以在物理、化學、生物、工程，甚至是社會科學上許多系統裡發現。同步化是泛指兩個或兩個以上的振盪元素彼此互相影響致使彼此相位或是頻率達到同調，同步的理論模型經常被簡化成與時間相互依存關係的相位模型，一種基本的演化方程為

$$\frac{d\varphi_i}{dt} = \omega_i - \sum_{j \neq i} G(r_i - r_j) V'(\varphi_i - \varphi_j) \quad (1)$$

$\omega_i$ 是本質頻率(intrinsic frequency)， $r_i$ 是第*i*顆振子的位置，而函數 $V(\varphi)$ 是一種週期性“位能”，它的最小值發生在 $\varphi = 0$ 時，該“位能”會驅使系統朝著完全同步的狀態發展( $\varphi_i = \varphi_j$  for any  $i, j$ )。耦合函數 $G(r)$ 是一個 interaction kernel，它告訴我們位能 $V(\varphi)$ 的作用力隨距離改變的遞減關係。

在互相耦合的轉子陣列中，同步轉動的發生與否端看交互作用的影響範圍，我們可以利用宏觀的參數來刻劃相位同調的特徵。假設平均場耦合函數為  $G(r) = g_0/N$  [2]，當常數  $g_0$  超過臨界值  $g_c$  時，系統會發生全面性的同步震盪，其中  $g_c$  取決於本質頻率。平均場模型展示在靠近  $g_c$  時  $PC = (g_0 - g_c)^\beta$  的臨界行為， $PC$  (phase coherence) 刻劃轉子相位同調的指標量。函數 $V(\varphi)$ 的形式決定了 $\beta$ 的值，目前已知的有  $\beta = 1/2$  或是  $\beta = 1$  兩種[10-12]。有別於與  $r$  無關的平均場耦合 $G(r)$ ，對於近程距離的

耦合 $G(r)$ ，全面性的同步化是不可能的[13]；而對於長距離的耦合函數 $G(r) \propto 1/r^\alpha$ ，在 $V(\varphi) \propto -\cos \varphi$ 的例子裡，當 $\alpha < \frac{3}{2}d$ 時，全面性的同步是允許的；而在 $\frac{3}{2}d < \alpha < \frac{5}{2}d$ 時，可預期沒有全面性的相位同調[14]。

流體交互作用屬長程距離作用力， $G(r)$ 以指數函數 $e^{-\alpha r}$ 衰減。其中 $\alpha$ 隨著系統幾何而異，根據 Oseen Tensor 的計算，系統中的單極驅動力對應到 $\alpha = 1$ ；而在系統中的偶極力或是與表面產生偶極交互作用的單極則是對應到 $\alpha = 3$ 。 $G(r)$ 的指數與陣列的空間維度決定了系統最終集體同步與否。此外，流體交互作用中各向異性的自然性質給問題增加了一個複雜度。交互作用的各向異性可以與系統轉子結構上的各向異性耦合，導致同步化的現象[2]。

### 2.1.2 流體動力學同步化模型

由流體力學交互作用產生的全面性同步，在很多樣的複雜模型中已經被研究許久，從直接模擬彈性纖毛到相位耦合的轉子簡化模型都有。在早期的研究工作中，Gueron and Levit-Gurevich 利用不可伸縮的彈性細線模擬鞭毛的流體行為，揭露出線性排列的鞭毛系統展示了傳遞波的型態(metachronal wave)[15]。Kim and Netz 用布朗力學的方式模擬了半彈性的細線表面[16]。研究中，底部的細線由一股垂直於基板的力矩所驅使，證明了 phase-locking 的產生是由於流體交互作用和提升 pumping 效率。另外，系統耗散率與同步化的關係是 Elfring and Lauga 研究的重點[17]。而 Taylor 考慮兩片彈性薄板的模型，伴隨著波的傳遞能夠形成一固定波前，分析後證明波前的前後不對稱可以造成正相位或反相位的同步化，分別對應到最大與最小的系統耗散率。Guirao and Joanny 用半彈性的細線模擬鞭毛，伴隨著系統內部存在的分子力，解析地顯示了在一個鞭毛陣列裏，由於拍擊同步化產生的宏觀淨流量，造成對稱性拍擊的瞬間破壞[18]。這些直接的仿真方法在闡明流體動力交互作用已經相當有用了，然而由於彈性細線的力學

複雜，到目前為止想將它用來研究相位行為和大數目的流體動力學集體性質的嘗試仍窒礙難行[2]。

過去的研究已揭示要產生流體交互作用的必須因子，豐富多樣的簡化模型告訴我們每一個主動元素(active element)皆擁有幾個自由度。Kim 及 Powers 證實了在力矩固定不變的情況下，兩個具有固定平行軸的旋轉剛體螺旋不會同調[19]。藉由數值分析以及對稱性論述，證實流體交互作用既不會增強亦不會破壞相位的固定(phase locking)。而 Ryskin 及 Lenz 的仿真鞭毛小球模型暗示流體交互作用是扮演最核心的角色[20]。

### 2.1.3 Swimmers 的流體動力學同步化

Gray 的早期觀察與近期實驗顯示在低雷諾數環境下，固體基板上精蟲細胞的流體動力學同步化渦流現象是相當的豐富，相對上這是一個未開發的主題[21-22]。Yang 等人利用具有固定振幅與頻率的半彈性細線，模擬彎曲精蟲尾巴，仿真游動的精蟲細胞。在二維系統模擬中，顯示兩隻精蟲細胞由於流體動力交互作用彼此互相吸引，同時頭與頭的距離隨著相位差而減少[23]。一群精蟲細胞的群聚大小，對甩動頻率的分布寬度，呈現 power-law 的關係。這些研究顯示細菌自由游動的同步化現象，比起被固定位置的鞭毛細線運動來得複雜，細菌之間的距離會隨著相位變化。

## 2.2 生物的集群行為與同步

生物運動模式千姿百態，集群性的動物行為更是讓科學家好奇探索，比如蝗蟲過境、候鳥遷徙、草食性動物逐水草而居、螞蟻行軍等。集群行為指的是，數個以上的個體在相對自發、無組織、無預期以及不穩定的狀態下，對環境衝擊或者刺激產生的反應行為。由於各種因素的影響，這樣的系統相當複雜，有別於前述 2.1.1 同步現象

的一致性與穩定性。但是，我們仍然可以通過一步一步的定量分析和觀察，漸進式的理解現象。例如，魚群呈現有序地移動，同時能夠大幅度地改變行進軌跡如圖(5)。此外，雁型理論提出呈V字形狀飛行的鳥隊，可以增加飛行距離，如圖(6)所示。同樣的行為也能夠在社會上觀察到，例如，人們在超市付款時或索取流行演唱會門票的排隊行為。事實上，群聚行為不僅能夠在宏觀尺度被發現，在微觀生物系統中也有。值得注意的是，此目的被認為是為了降低所需的能量。由Uchida等人以往的理论模擬知道[1]，噪聲的降低同樣能夠導致轉子陣列更顯著的同步和導致各種轉子的時空分布。在這項研究中，藉由實驗研究了流體動力學的驅動力在細菌地毯上散播，同時要釐清參與非平衡系統集體運動的機制是什麼。



圖(5) 海中魚群



圖(6) 鳥群成V字隊形

在不同的非平衡系統裡，每個群聚行為之間有著相似性，形成圖像的來源是相當顯著的。在 Stokes flow 的流體動力學顯示了低雷諾數的特點，它提供流體裏微小物體之間的水動力學耦合。事實上，微觀尺度下微生物的群聚運動所涉及的機制目前仍不清楚。雖然宏觀尺度群聚行為有時表現出類似的結構，但形成圖案所涉及的機制可能是不同的。集體運動所呈現的時空結構背後，一般是在非平衡系統的自我運作過程中，受到連續不斷地影響。

同步現象與集群行為有其相似之處。目前，在生物界各種同步現象先後被發現。舉例來說，大量的螢火蟲圍繞一棵樹聚攏，最終將開始閃爍，並創造同步明亮的閃光。例如最近的實驗觀測指出，與單一細胞的運動相比，大尺度的活性細菌懸浮液也

能夠產生協調一致的運動。另外，人類的身體也有同步的現象，例如心跳起源於心肌細胞組成的心臟肌肉的搏動。如果這些細胞各自跳動，心臟將無法順利運作，因此，要產生健康的心跳必須同步振動所有細胞。同步現象的研究可以幫助我們了解人體資訊，讓我們對生理系統有更深入的理解，因此對於物理學家和生物學家們來說，研究同步的現象既可解開生物行為本質上的秘密、亦對醫學上有所貢獻。

## 2.3 低雷諾數流體的理論

流體性質可以透過雷諾數來刻畫。基於牛頓力學概念的Navier-Stokes方程由下式給出

$$\rho \left( \frac{\partial v}{\partial t} + v \cdot \nabla v \right) = -\nabla p + \eta \nabla^2 v \quad (2)$$

將式(2)無因次化時，得到一個無因次的特徵量，稱為雷諾數(Reynold number)

$$R_e = \frac{\rho v L}{\eta} \quad (3)$$

簡單的說，雷諾數定量地捕捉流體特性，本質上描述了流體內慣性與黏性的比重。

在高雷諾數時，Navier-Stokes方程的慣性項支配著流體力學，意味著可導致不穩定的亂流(turbulence)模式。例如，洋流典型的的速度為 $10 \text{ m/s}$ 的，鯨魚在其中雷諾數近乎 $10^9$ 。藉著尾巴強力擺動，它可以製造一個巨大的回流使之推進，有利於動量的傳輸。與此相反，在低雷諾數底下，黏滯力對流場的影響大於慣性力，流場中流速的擾動會因黏滯力而衰減，流體流動穩定，稱為層流(laminar flow)。微生物如大腸桿菌游泳在水中，典型尺度 $\sim 10 \mu\text{m}$ ，游泳速度 $\sim 10 \mu\text{m/s}$ ，其雷諾數約 $10^{-4}$ 。一旦沒有能量供應，大腸桿菌的運動幾乎在瞬間停止。此時，慣性效應不再發揮重要作用，取而代之

的是黏滯力，該力在此系統中將主導流體力學行為。

當細菌在靠近平面時，由於平面邊界的效應破壞原有自由空間的流場，改變流體力學交互作用的形式，從而演示出不同於自由空間的細菌運動行為。例如，線性的纖毛陣列可以通過液力耦合出現一致性行為、一群精子細胞與甩動的鞭毛可以在平面上發展成一個以上的渦流現象。因此，在邊界附近的流體行為研究，成為解析微生物集體運動的重要課題。

在低雷諾數環境，Navier-Stokes equations (式(2))可簡化成Stokes equations

$$-\eta \frac{\partial^2}{\partial r_i^2} v_i = -\partial_i p + f_i \quad (4)$$

其中  $i = (x, y, z)$  表示三個獨立分量， $v_i$  是流體速度， $f_i$  是加在單位體積液體上的力， $p$  是流體力學壓力。流體在不可壓縮的條件下， $(\partial/\partial r_j)v_j = 0$ ，由不可壓縮流體的限制條件可以解出式(4)中的壓力  $p = (1/\partial^2)\partial_j f_j$  及

$$-\eta \frac{\partial^2}{\partial r_i^2} v_i = \left( \delta_{ij} - \frac{\partial_i \partial_j}{\partial^2} \right) f_j \quad (5)$$

式(5)中流場速度  $v$  和所對應的力  $f$  有可逆關係，因此在逆方向上的流場速度  $-v$  將直接對應到  $-f$ 。這讓一個每半週期就改變施力方向的週期行為無法創造淨運動效應。對一個施在原點的力，方程式(5)告訴我們，在  $r$  處的流場速度將是

$$v_i(\mathbf{r}) = \frac{1}{8\pi\eta|\mathbf{r}|} \left( \delta_{ij} + \frac{r_i r_j}{|\mathbf{r}|^2} \right) F_j(\mathbf{r}') \quad (6)$$

其中  $F_j(\mathbf{r}')$  為施加在  $\mathbf{r}'$  處  $j$  方向的力， $\mathbf{r}$  表示觀察點的位置向量； $\mathbf{r}'$  則是力量來源點的位置向量； $\mathbf{r} = \mathbf{r} - \mathbf{r}'$ 。從方程式(6)明顯的看到，流體動力學交互作用為長距力。對於一個自由空間，以下將該格林函數簡寫為

$$v_i(\mathbf{r}) = \sum G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \cdot F_j(\mathbf{r}') \quad (7)$$

式(7)表示速度流場 $v_i(\mathbf{r})$ 變化來源於 $\mathbf{r}'$ 點的力量 $F_j(\mathbf{r}')$ 所影響。透過流體交互作用的長距離性質，流速以 $1/r$ 的關係隨距離遞減。

## 2.4 The Oseen Tensor

流體交互作用的關鍵機制在於 Oseen tensor，它描述低雷諾數的流體裡頭，A 點一施力在 B 點造成的流體速度大小。現在考慮在水中 B 點有一顆點粒子 $i$ ，此粒子在水中的位置向量為  $\mathbf{r}$ ，在 A 點有另一顆點粒子 $j$ ，位置向量為  $\mathbf{r}'$ 。當粒子 $j$ 對水施一力量  $F_j$ ，B 點流速大小可透過 Oseen tensor  $G(r)$ 如式(7)表達[5]，其中

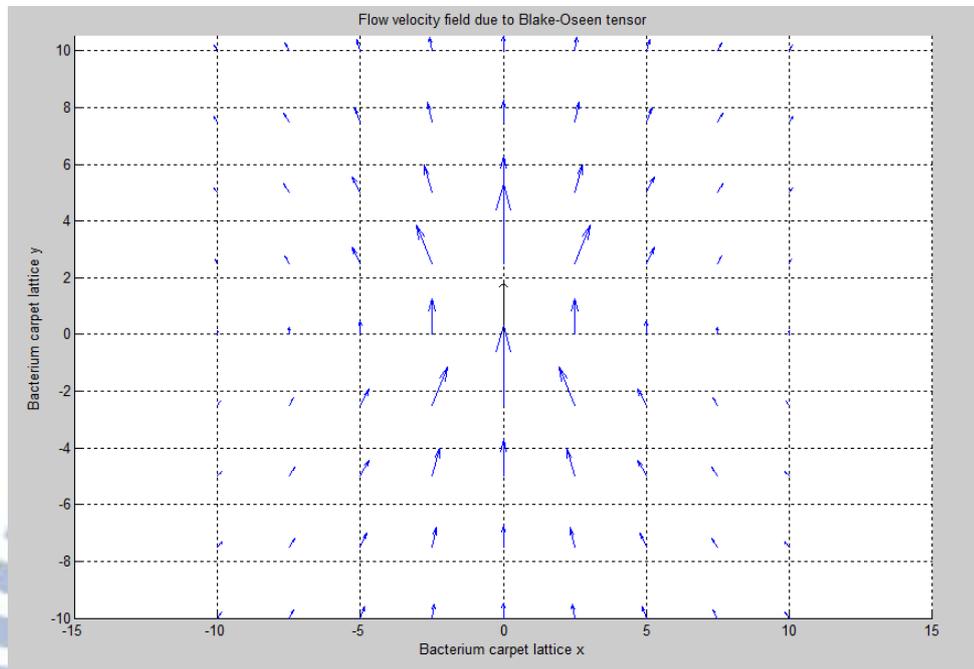
$$G(r) = \frac{1}{8\pi\eta|r|} \left( \delta_{ij} + \frac{r_i r_j}{|r|^2} \right) \quad (8)$$

$G(r)$ 是個 $3 \times 3$ 的矩陣。此張量常見的形式常以下式(9)及式(10)表之，其中 $v_j^k$ ： $k$ 為施力方向； $j = (x, y, z)$  三個獨立分量。

$$G(r) = \begin{bmatrix} v_x^x & v_x^y & v_x^z \\ v_y^x & v_y^y & v_y^z \\ v_z^x & v_z^y & v_z^z \end{bmatrix} \quad (9)$$

$$G(r) = \frac{1}{8\pi\eta} \begin{bmatrix} \frac{1}{|r|} + \frac{(\mathbf{r}_x - \mathbf{r}'_x)^2}{|r|^3} & \frac{(\mathbf{r}_x - \mathbf{r}'_x)(\mathbf{r}_y - \mathbf{r}'_y)}{|r|^3} & \frac{(\mathbf{r}_x - \mathbf{r}'_x)(\mathbf{r}_z - \mathbf{r}'_z)}{|r|^3} \\ \frac{(\mathbf{r}_y - \mathbf{r}'_y)(\mathbf{r}_x - \mathbf{r}'_x)}{|r|^3} & \frac{1}{|r|} + \frac{(\mathbf{r}_y - \mathbf{r}'_y)^2}{|r|^3} & \frac{(\mathbf{r}_y - \mathbf{r}'_y)(\mathbf{r}_z - \mathbf{r}'_z)}{|r|^3} \\ \frac{(\mathbf{r}_z - \mathbf{r}'_z)(\mathbf{r}_x - \mathbf{r}'_x)}{|r|^3} & \frac{(\mathbf{r}_z - \mathbf{r}'_z)(\mathbf{r}_y - \mathbf{r}'_y)}{|r|^3} & \frac{1}{|r|} + \frac{(\mathbf{r}_z - \mathbf{r}'_z)^2}{|r|^3} \end{bmatrix} \quad (10)$$

圖(7)用一簡單例子展示流場的示意圖，黑色箭頭表示施力的方向與位置，藍色箭頭表示該施力造成的流場。

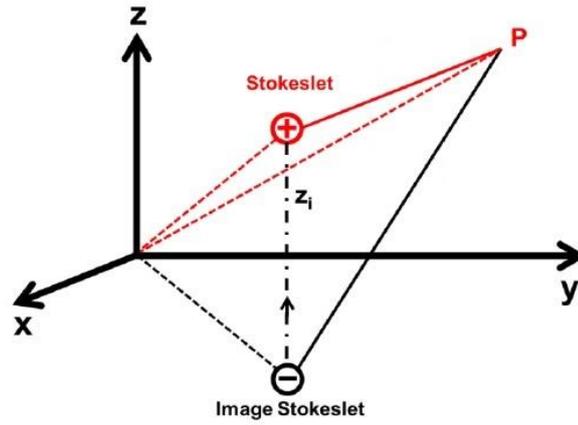


圖(7) 流場示意圖 (Blake-Oseen Tensor)

假如系統中有許多粒子，由於流體交互作用是長程力，每顆粒子對任一被觀察粒子都有貢獻。在 *Uchida* 等人的轉子陣列模型裡，就是用這種任兩轉子有交互作用的設定，仿真了實際系統，展示出鞭毛群聚在接近表面的行為。

## 2.5 地毯結構的細菌陣列

在固定平面邊界附近的一個點力(force point)，稱為 Stokeslet，施加在表面附近的流體，該力將以流體力學交互作用力的衰減方式傳播出去。我們對該處 Stokes's flow 的速度場和壓力場進行了分析。假設一個 Stokeslet 放在一個固定平面邊界上方高度為  $h(z_i)$  的位置，為滿足 no-slip boundary condition 所需的鏡像系統如下圖(8)



圖(8) Image Stokeslet 與 Stokeslet 的對應關係

圖中可以看到在  $xy$  平面的下方有一個鏡像的 Stokeslet，鏡像 Stokeslet 與原來 Stokeslet 除了位置差一負號外，其餘一切相同。結果，施一個點力  $F$  在位置  $\mathbf{r}'$  處，則在位置  $\mathbf{r}$  處的  $P$  點上的速度為  $v(\mathbf{r}) = G^C(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot F(\mathbf{r}')$

$$G^C(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = G^S(\mathbf{r} - \mathbf{r}') - G^S(\mathbf{r} - \tilde{\mathbf{r}}') - 2z_i G^{StoD}(\mathbf{r} - \tilde{\mathbf{r}}') + 2z_i^2 G^{SouD}(\mathbf{r} - \tilde{\mathbf{r}}') \quad (11)$$

其中

$$G_{ij}^S(\mathbf{r}) = \frac{1}{8\pi\eta} \left( \frac{\delta_{ij}}{|\mathbf{r}|} + \frac{r_i r_j}{|\mathbf{r}|^3} \right) \quad (12)$$

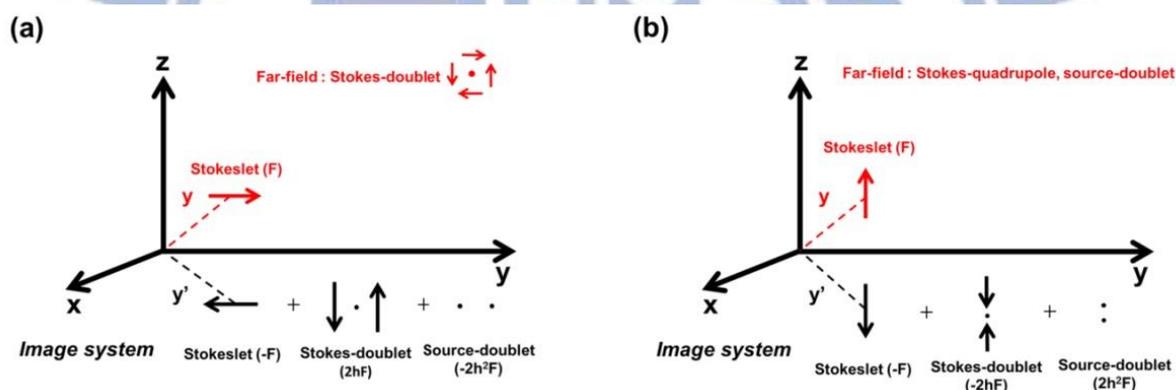
$$G_{ij}^{StoD}(\mathbf{r}) = (1 - 2\delta_{jz}) \frac{\partial}{\partial r_j} G_{iz}^S(\mathbf{r}) \quad (13)$$

$$G_{ij}^{SouD}(\mathbf{r}) = \frac{1}{8\pi\eta} (1 - 2\delta_{jz}) \frac{\partial}{\partial r_j} \left( \frac{r_i}{|\mathbf{r}|^3} \right) \quad (14)$$

之所以多那麼多項是因為為了滿足 no-slip boundary condition，鏡像力源的影響也需要加到格林函數裡。它的貢獻即多出下面幾個力源的 Oseen tensor: anti-stokeslet, stokes

doublet  $G^{StoD}$ ，及 source doublet  $G^{SouD}$ 。其中 stokeslet 及 anti-stokeslet 產生一個 stokes-doublet 遠場，而 stokeslet 垂直於平面產生一個 source-doublet 和 stokeslet-quadrupole 遠場的組合。[3-4]

式(11)被稱作 Blake-Oseen tensor，此特性為靠近點力的地方，速度像由一個 Stokeslet 造成，而遠場的速度場可以分為兩個主要的情形。其一是，如果點力是平行於平面的邊界，則在遠場中初始 image stokeslet、stokes-doublet 以及 source-doublet 的綜合影響，結果在遠場產生一個偶極力(stokes-doublet)淨效應。反之，若點力是垂直於平面邊界，在這個情形下，image stokeslet 和 stokeslet-doublet 由於對稱關係相互抵銷，使得在遠場中顯著的效果來源於四極力(stokes-quadrupole)與源偶極力(source-doublet)。[3-4]



圖(9) 鏡像系統產生由(a) 一個 Stokeslet 平行平面 (b) 一個 Stokeslet 垂直平面

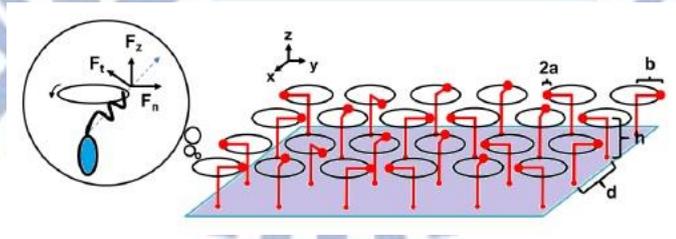
因為 Blake Oseen tensor 有著因方向的不同而有所變化的特性，垂直方向上的力與水平方向上的力，分別產生了 2 種不同的速度分布。運用多極展開的數學方法，可以得到該處流場一組完整的展開型式。二階項對應到系統內偶極力隨  $1/r^2$  關係衰退，三階項則是以  $1/r^3$  方式遞減。在低雷諾數的環境下，黏性力取代慣性項的影響，沒有慣性的效力，Navier-Stokes equations 簡化成 Stokes equations。Stokeslet 在空間上隨著距離以  $1/r$  的方式衰減，而偶極力、源偶極(或四極力)分別以  $1/r^2$ 、 $1/r^3$  的關係遞減，由於平行與垂直方向的力造成的流速不同，導致產生 Blake Oseen tensor 各向異性[3]。

## 第三章、實驗架設

### 3.1 模型建構與模擬計算

為了觀察分區同步的情形，我們試著以分子模擬方法建構轉子陣列模型，模仿細菌鞭毛一根一根固定在培養基板上，形成一個有序排列的方陣，每根鞭毛所處的環境與基本設定均完全一致，並隨機給定每一根鞭毛不同的初始相位。

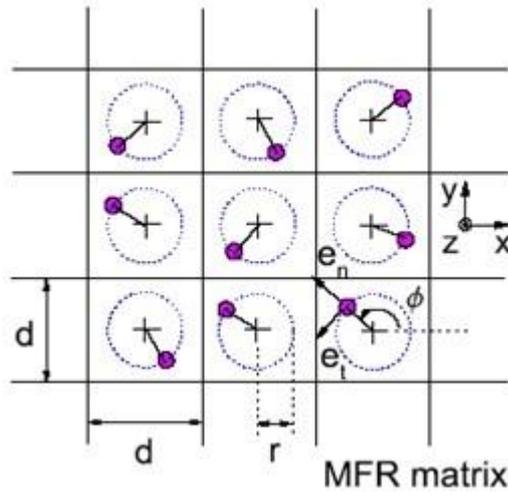
在這篇研究中，為了揭露當細菌鞭毛集合在培養基板上形成一個有序的陣列時，此生物系統集體運行的秘密，將簡化系統模型並且有效地捕捉真實系統的行為。因此提出一個 microorganism-flagellum-rotor (MFR) 力學模型來取代真實世界中複雜的細菌鞭毛運動。模擬真實細菌鞭毛附著在基板上的型態，將細菌鞭毛視為一個轉子，其中包含一顆半徑為  $a$  的剛體小球。每一顆轉子皆被限制在一個半徑為  $b$ 、高度固定在  $h$  上方的圓形軌跡，其每一顆轉子的中心位置彼此距離  $d$ ，MFR 模型是由一顆顆單位轉子所組成的方形陣列，如圖(10)。在本實驗中採用較為簡易的模型，對應到圖(10)中，鞭毛與  $xy$  平面夾角為  $0$  的情形，系統將產生  $xy$  平面上的流場。



圖(10) 細菌陣列示意圖。個別轉子模擬細菌一端固定，尾巴自由旋轉將對周圍液體產生徑向、切向、縱向三個方向的流場變化。

在基板平面( $xy$  平面)上第  $i$  顆轉子的中心位置向量定為  $\mathbf{r}_{i0}$ ，而轉子之位置向量則是  $\mathbf{r}_i = \mathbf{r}_{i0} + b\mathbf{n}_i + h\mathbf{e}_z$ ，其中  $\mathbf{e}_z = (0,0,1)$ ； $\mathbf{n}_i(\omega t) = (\cos \phi_i(\omega t), \sin \phi_i(\omega t), 0)$  為轉子的徑向向量，轉子的速度  $\mathbf{v}_i = b \frac{d\mathbf{n}_i}{dt} = b \frac{d\phi_i}{dt} \mathbf{t}_i$ ， $\mathbf{t}_i$  是圓形軌跡的單位切線向量

$$\mathbf{t}_i = \mathbf{e}_z \times \mathbf{n}_i = (-\sin \phi_i(\omega t), \cos \phi_i(\omega t), 0)。$$



圖(11) 轉子陣列俯視圖

考慮轉子模型在轉動的情況下，轉子所施的力驅動液體介質沿著圓形切線方向流動，在考慮變因上的控制，在影響程度小的情形下簡化模型設計，每一顆轉子本身均擁有一個力  $\mathbf{F}_i$ ，此力可以分解為徑向、切向、垂直方向三個部分， $\mathbf{F}_i = F_n \mathbf{n}_i + F_t \mathbf{t}_i + F_z \mathbf{e}_i$ 。由轉子所驅動的液體速度流場為方程式(7)  $v_i(\mathbf{r}) = \sum G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \cdot \mathbf{F}_j(\mathbf{r}')$ ， $G(\mathbf{r})$ 為Blake-Oseen tensor，在這邊界附近的問題上，Blake-Oseen tensor 是在無滑動邊界條件下，描述靠近基板表面的流體交互作用，此為系統最重要的交互作用影響項。考慮轉子所受到總外力時發現徑向力不易知道，但當寫下力矩方程式時它自然消失。

$$\begin{aligned} \vec{r} \times m_i \ddot{\vec{x}} = & \vec{r} \times \vec{F}_{friction} + \vec{r} \times \vec{F}_{thermal} + \vec{r} \times \vec{F}_{thrust, itself} + \vec{r} \times \vec{F}_{rthrust, others, BOT} + \vec{r} \\ & \times \vec{F}_{external} \end{aligned}$$

(16)

其中  $m_i$ ：第  $i$  顆 rotor 的質量

$\vec{F}_{friction}$ ：流體阻力、 $\vec{F}_{thermal}$ ：熱擾動項、 $\vec{F}_{thrust, itself}$ ：個別轉子的施力、

$\vec{F}_{rthrust, others, BOT}$ ：其餘轉子的淨合力、 $\vec{F}_{external}$ ：額外的施力

在忽略慣性項、不考慮額外的施力與熱擾動的影響下，方程式(16)可簡化為

$$\vec{\omega}_i = \frac{1}{\xi b} \vec{F}_{thrust,i} \cdot \hat{t}(\varphi_i) + \frac{1}{b} \sum_{j \neq i} \vec{V}_{thrust,j} \cdot \hat{t}(\varphi_i) \quad (17)$$

$\vec{\omega}_i$ 是每個轉子的角速度、 $\xi = 6\pi\eta a$ 是轉子的阻力係數(stokes drag coefficient)。

先以最簡單的兩顆轉子模型開始模擬，考慮兩顆半徑為  $a$  的剛體小球，分別被固定在旋轉半徑為  $b$  的圓形軌道上，其旋轉中心距離為  $d$ 、高度則限制在基板上方  $h$ 。每一顆小球皆由一常數力矩所驅動旋轉，或是說由一股切向力驅使  $F = \tau/b$ 。系統轉子間格距離必須遠大於旋轉半徑  $d \gg b$ 。空間某處流體速度將正比於 Oseen-Blake tensor 與施加於  $i$  處流體上的力作用，在我們的系統，該力為轉子施於水的力，亦等同於臂(鞭毛)施於轉子的 thrust force，見圖(12)。

$$\vec{F}_i = F \hat{t}(\varphi_i) = \tau/b \hat{t}(\varphi_i) \quad (18)$$

利用方程式(7)、(18)帶入式(17)改寫，得到

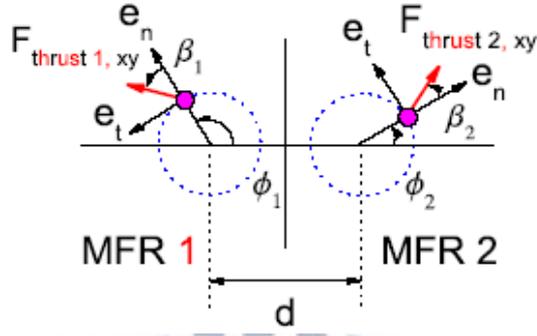
$$\frac{d\varphi_i}{dt} = \frac{\hat{t}(\varphi_i) \cdot \vec{F}_i}{b\xi} + \frac{1}{b} \sum_{j \neq i} \hat{t}(\varphi_i) \cdot G(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \cdot \vec{F}_j \quad (19)$$

其中

$\hat{n}(\varphi_i) = (\cos\varphi_i, \sin\varphi_i, 0)$  radial unit vector；旋轉軌跡的徑(法)向單位向量

$\hat{t}(\varphi_i) = (-\sin\varphi_i, \cos\varphi_i, 0)$  tangential unit vector；旋轉軌跡的切向單位向量

$b = trajectory\ of\ radius$ 。



圖(12) 兩顆轉子模型

假定  $i=1; j=2$

$$\frac{d\varphi_1}{dt} = \frac{\hat{t}(\varphi_1) \cdot \vec{F}_1}{b\xi} + \frac{1}{b} \sum_{1 \neq 2} \hat{t}(\varphi_1) \cdot G(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \cdot \vec{F}_2$$

寫成差分形式

$$\frac{\varphi_1' - \varphi_1}{\Delta t} = \frac{\hat{t}(\varphi_1) \cdot \vec{F}_1}{b\xi} + \frac{1}{b} \sum_{1 \neq 2} \hat{t}(\varphi_1) \cdot G(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \cdot \vec{F}_2$$

$$\varphi_1' = \varphi_1 + \Delta t \left[ \omega_1 + \frac{1}{b} \sum_{1 \neq 2} \hat{t}(\varphi_1) \cdot G(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \cdot \vec{F}_2 \right]$$

其中  $\omega_1$  為 intrinsic frequency。最後得到方程式(20)，

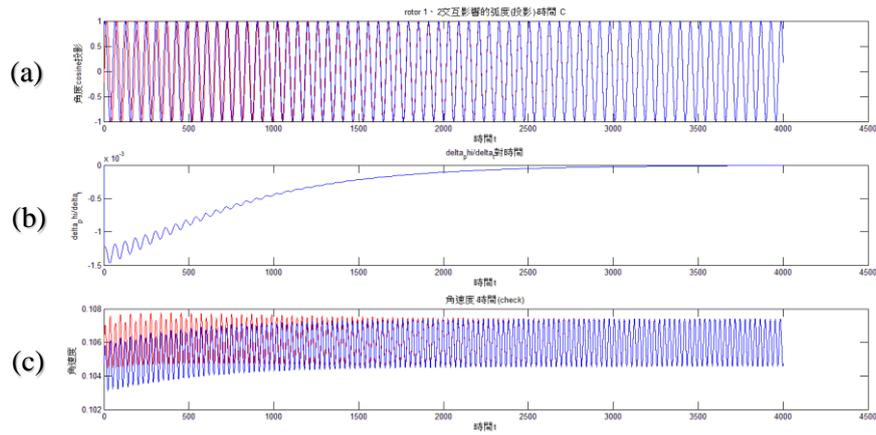
$$\varphi_1' = \varphi_1 + \Delta t \cdot \omega_1 + \Delta t \cdot [\omega_{12}]$$

(20)

$$\omega_{12} = \frac{1}{b} \sum_{1 \neq 2} \hat{t}(\varphi_1) \cdot G(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \cdot \vec{F}_2$$

(21)

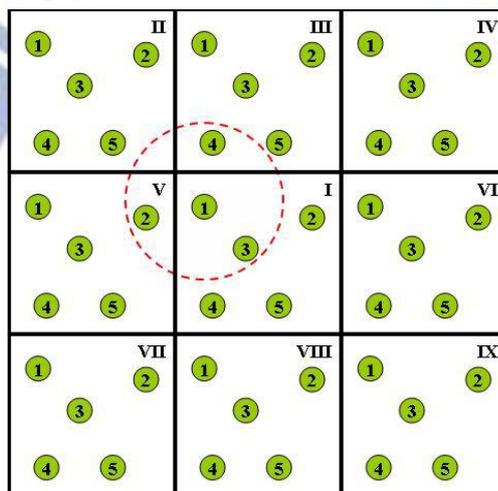
$\omega_{12}$ ：第2顆轉子對第1顆轉子之間影響的作用量。從式(21)中可以看出，Oseen tensor具有對稱性關係  $G(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) = G(\vec{r}_2 - \vec{r}_1)$ 。對應到  $\varphi_1$  和  $\varphi_2$  互換，其相位差  $\Delta\varphi = \varphi_2 - \varphi_1$  會是一常數，隨著流體作用趨向0達到同步，見圖(13)。方程式(20)告訴我們後來的相位與前一時刻相位的差跟轉子交互作用項之間的關係，以此式做為以下分子模擬的基礎。



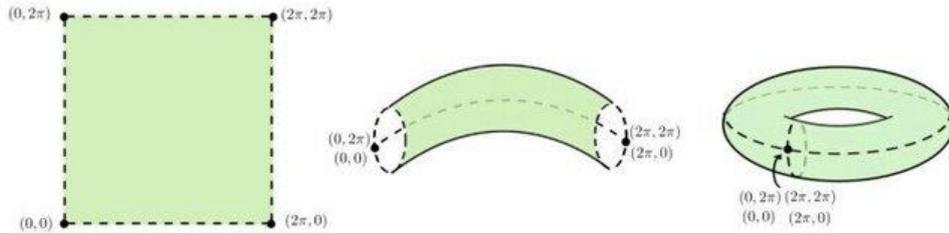
圖(13) 兩顆轉子同步化時(a)軌跡-時間(b)相位差-時間(c)角速度-時間的關係圖

### 3.2 週期性邊界條件

在分子動力學中，一個實際的系統通常囊括了數量相當龐大的原子，受限於電腦的計算能力，無法完全描述擁有如此原子數量的系統，為克服此困難，常從系統中選取一單位空間，並假設該空間的行為有週期性的重複，如此只需要模擬其中一個週期的區域，此即所謂的週期性邊界條件（Periodic Boundary Condition）。



圖(14) 週期性邊界條件示意圖a



圖(15) 週期性邊界條件示意圖 b

增長週期性邊界條件，主要目的在於能觀察到長週期波的行為。圖(14)中編號為I的區域是實際系統模擬的範圍，周圍八個區塊則是行為相同之映象系統。當左右邊等價，上下邊等價，圖(14)的系統將等效於一個甜甜圈模型如圖(15)。在計算模擬過程，由於粒子數量多，計算量龐大，只考慮近鄰與次近鄰粒子間的影響，因此編號為I的區域內每顆粒子除了和自己區域內粒子作用外，還需考慮周圍的映象系統中有沒有粒子和其距離在截斷半徑之內(紅色虛線)，若有亦需將其列入作用力的計算之中。以I中之1號粒子為例，在實際系統中只有3號粒子位於截斷半徑之中，但是由於週期性邊界條件，映射系統中的III-4號粒子及V-2號粒子也落於截斷半徑之中，所以也必須將其列入計算。在轉子陣列系統，我們以相同週期性邊界條件概念選系統大小。建立到21x21大小或甚至更大數目的轉子方陣模型。

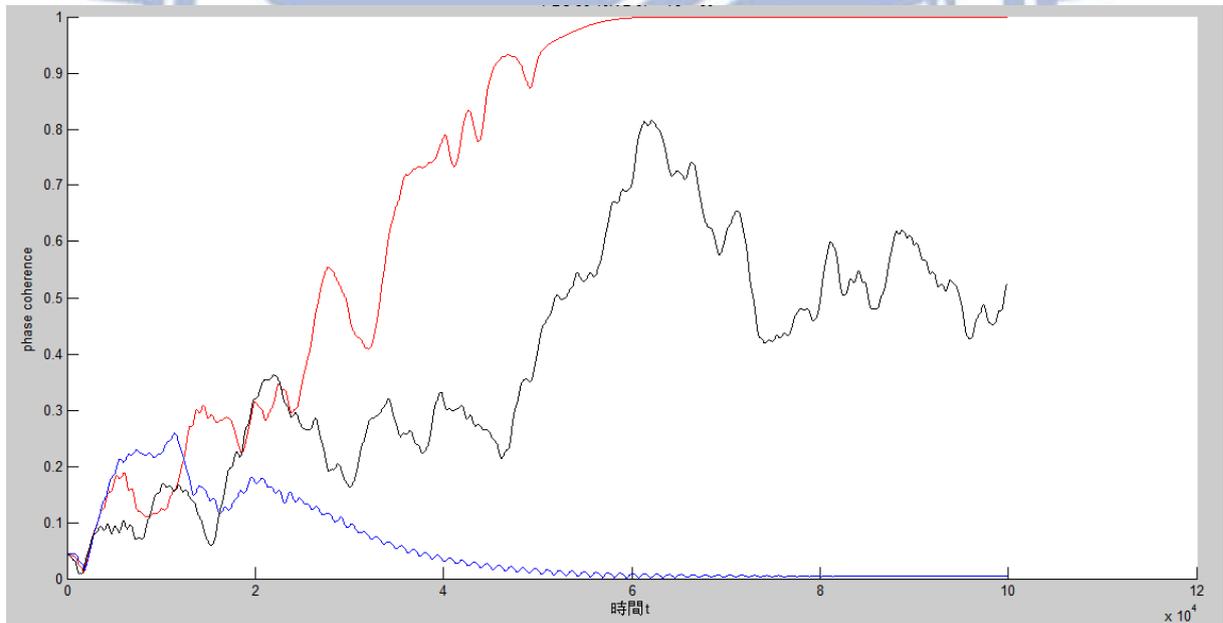
## 第四章、分析與討論

為了瞭解系統是否達到相位同步化，需要一個物理量  $PC$  (*phase coherence*) 作為系統相位是否達到同步化的指標量，當系統中每一顆轉子在某時刻所轉到的角度位置相同，則聲稱系統達到同步化 ( $PC = 1$ )；相反地，完全雜亂無序的狀態表示系統不同步 ( $PC = 0$ )。假如  $\varphi_i$  為第  $i$  顆轉子的角度值、 $N$  表示系統轉子數目，則  $PC$  的定義為

$$PC = \frac{1}{N} \left| \sum_i e^{i\varphi_i} \right|$$

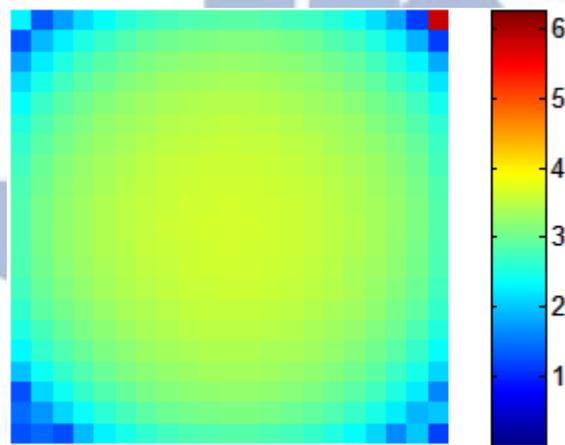
$PC = 1$  相位同步化(完全有序的狀態)

$PC = 0$  相位非同步(雜亂無序的狀態)



圖(16) 轉子系統  $PC$  值。圖中縱軸表示同步化程度  $PC$  (*phase coherence*)，橫軸為時間  $t$  (s)。紅線代表系統相位最終達到完全相同；黑線則表示系統一直不同步，其  $PC$  值會隨時間改變；藍線則是系統達到一個平行波狀態，轉子角度在空間有週期性的分布，但同步化程度卻是低得如完全無序。

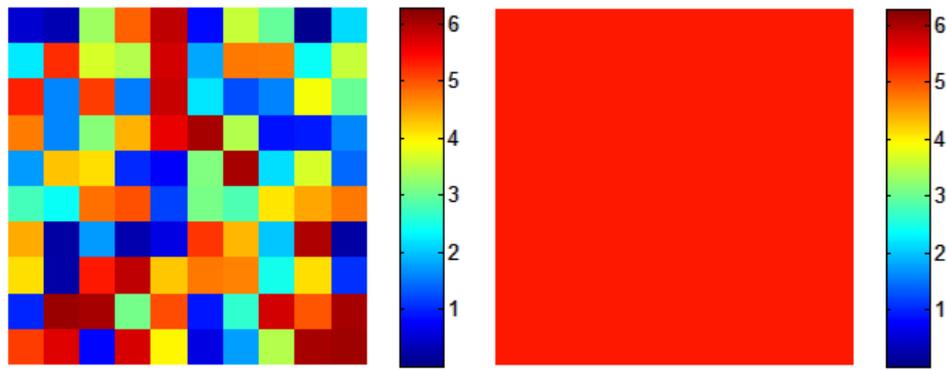
在尚未使用週期性邊界條件時，轉子系統無法產生完整的同步現象。先前提到，由於陣列本身有邊界，因此一顆轉子座落在什麼位置就顯得相當重要。身處中央的轉子，周圍轉子施加的影響是相當對稱的；但靠近邊界的轉子，其環境相當不對稱，邊界的效應顯著。圖(17)可以明顯看出，當系統數目龐大時，中央部分勉強可以視為“大致同步”，為使系統達到更一致性的同步，我們可對系統加入週期性邊界條件。圖(17)為模擬上觀察到鞭毛陣列趨向相位同步的過程，不同顏色表達鞭毛不同的旋轉相位。藍色表示相位從0度開始，當依序逆時針旋轉靠近紅色時，相位將到達360度(6.28)，然後又回到藍色。



圖(17) 轉子系統在無週期性邊界條件下，趨向相位同步過程中的某一瞬間，顏色對應到不同的旋轉相位。

### 徑向力驅動轉子

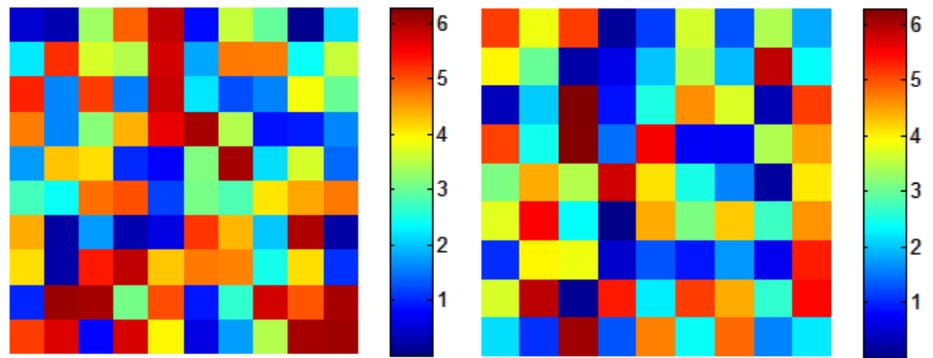
當轉子施予的力量方向與徑向夾角  $\beta = 0^\circ$  時，系統轉子的趨動力僅剩徑向的淨力，此時流場變化由陣列上每一顆轉子成員的徑向力所構成，初始隨機分佈的相位，最後會達到全面性的同步化，如圖(18)、圖(19)10\*10(100)轉子系統。



圖(18) 左圖代表初始相位分布、右圖則是同步化的呈現

### 力矩驅動轉子

當角度 beta angle  $\beta = 0^\circ$ 時，系統中每一顆轉子除了受到自身的臂產生的力矩外，同時還受到鄰近轉子提供的切向趨動力，最終使系統達到一種無序的狀態，轉子之間的關聯性會降到最低，沒有取向的相關性，如圖(19)。

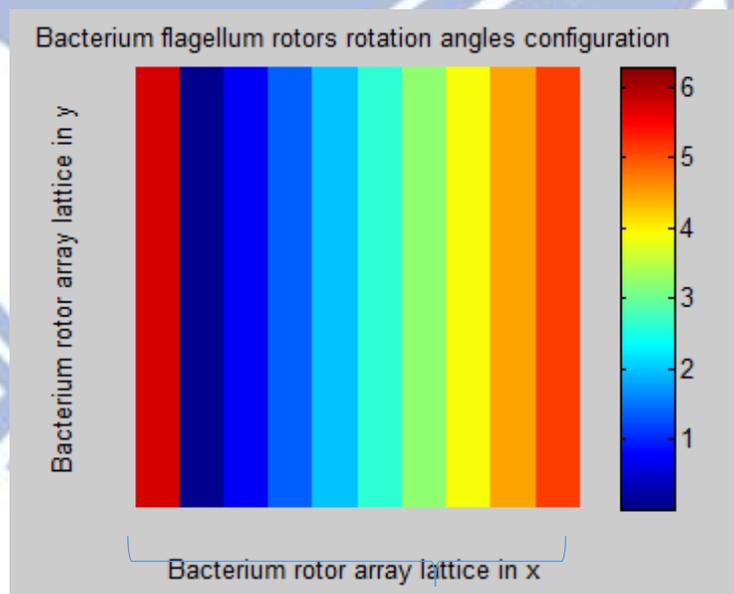


圖(19) 左圖為初始相位分布，經長時間觀察仍看不到同步

角度  $\beta$  介於  $0^\circ \sim 90^\circ$  之間時，模擬計算改變夾角  $\beta$  的值發現到一些特殊狀態。過去電腦模擬揭示在角度  $\beta$  介於  $0^\circ < \beta < 40^\circ$  時，系統最後可以得到同步化的結果，這是第一種情況；而第二種情形角度介在  $40^\circ < \beta < 90^\circ$ ，發現系統將會產生螺旋波。增加週期性邊界條件後，在多數目轉子系統下觀察到分區同步的現象，給定隨機分布的初始相位，在系統趨向同步或不同步的過程中，轉子會區域性地分成好幾個區塊進行同步，最後會完全同步。當  $\beta$  角度漸大時，同步的區域中心會隨時間一直變化，並不會固定

在相同區塊。

初期為檢測模型正確與否，從數目小的系統做測試( $N*N=4、9、16.....121$ )，意外地發現相同角度分布的初始條件，會在某些 beta angle 上出現一種特別的狀態，其  $PC$  值迅速下降，轉子陣列隨時間以週期變化的方式達到一種“平行波”的型態。以  $5*5$  系統為例，在夾角小於  $42^\circ$  時如預期般的會同步化，然而在夾角處於  $42^\circ < \beta < 67^\circ$  時，轉子系統隨著時間轉動，相位從雜亂無序的分布趨向以邊長為固定週期的方式排列轉動，此時  $PC$  值趨近於 0，但此時看起來並非完全無序的排列，相反地；轉子系統呈現有秩序的趨勢轉動。此種平行波具有固定的形式，以圖(20) $10*10(100)$  為例，Y 方向上每一顆轉子的相位呈現一致，然而 X 方向上則是以  $360^\circ/N$  為間隔差的方式依序排列 ( $0^\circ、36^\circ、72^\circ、.....、324^\circ$ )。若以 X 方向上的角度分布作為初始條件改置放於 Y 方向上，同樣可以得到平行波狀態，只是在方向上旋轉  $90^\circ$ 。



圖(20) 轉子系統呈現平行波狀態

此外，在夾角大於  $67$  度時，系統又會回到同步狀態。有趣的是，表(1)呈現各小系統時出現平行波的範圍，其中甚至出現像  $8*8$  系統的例子，出現 2 段平行波的角度範圍。

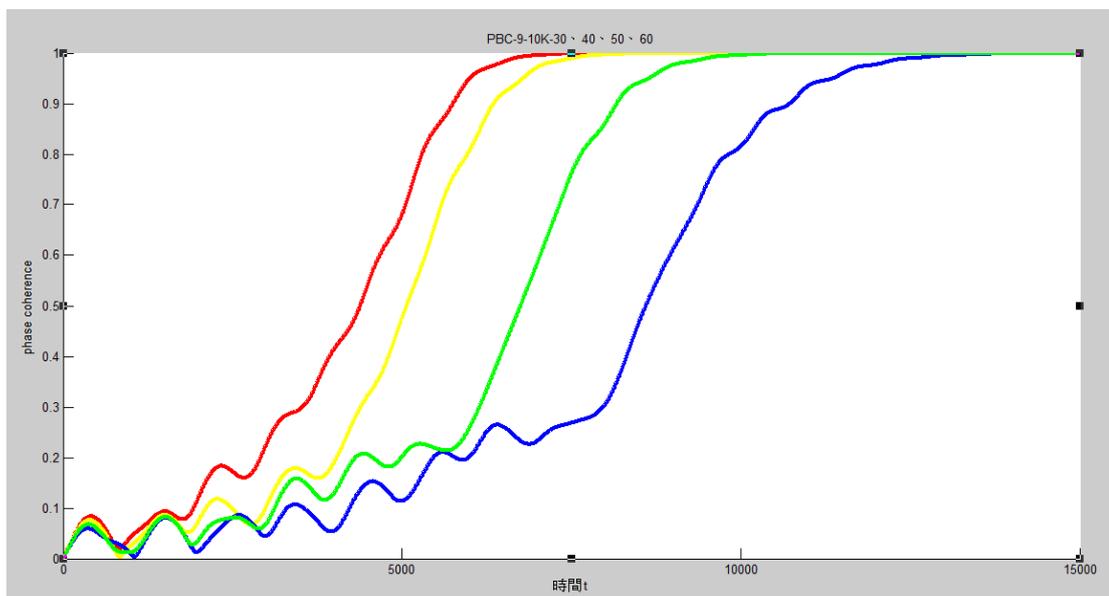
表(1)小系統 beta angle 測試

beta angle		
系統數目	會同步的 beta angle	平行波出現的 beta angle
3*3(9)	0°~89°	沒有出現
4*4(16)	0°~48°、63°~	49°、50°、51°、...、61°、62°
5*5(25)	0°~43°、68°~74°	42°、43°、44°、...、66°、67°
6*6(36)	0°~63°	64°、65°
7*7(49)	0°~49°	50°、51°、52°
8*8(64)	0°~50°、57°~60°	12°~44°、51°~56°
9*9(81)	0°~44°	45°、46°
10*10(100)	0°~48°	49°~55°
11*11(121)	0°~57°	58°、60°

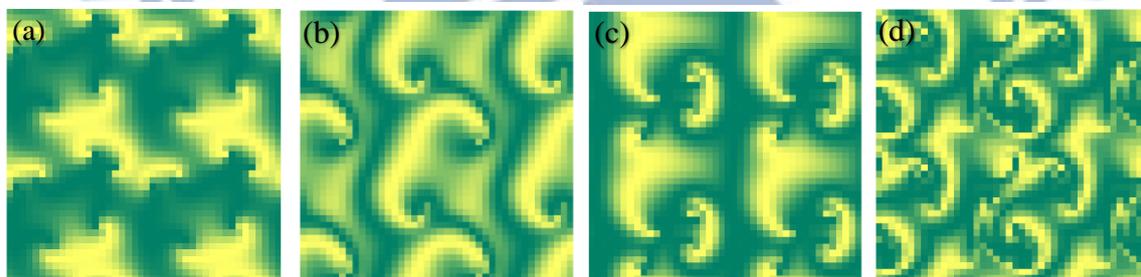
模擬發現在數目小的系統模型下，初始條件具有相當程度的影響力，在某一些角度分布的初始條件下，轉子系統才會達到這種平行波，並不是任意分布都會出現。耐人尋味的是，這些初始角度分布卻沒有太大的關聯性，同樣均以隨機分布給出的角度值，其結果卻有天差地別的不同，暗示涉及混沌理論中，初始條件對此動態系統影響非常敏感的特性。隨著系統數目越大，出現這樣特殊穩定的狀態會越少，相較之下在 16\*16(256)、21\*21(441)的大系統就沒有出現此種分布情形，與之相對的是出現群聚的螺旋波型態，如圖(22)，當角度愈大的時候群聚的數目越密集。

值得注意的是目前最小數目僅 4\*4(16)的系統有發現平行波，而且 2\*2、3\*3 的系統沒有看到。以固定的角度分布(0°、120°、360°)作為 3\*3 系統的初始條件，發現系統維持在平行波的情形一段時間後轉而趨向完全同步化，如圖(21)可以清楚看到當角度越大，從平行波趨向同步化的過程中，作用時間比較長。而 4\*4 以上的系統則沒有出現這樣的情形，因此推測平行波可能是小系統在達到同步之前的過渡型態，若時間持續

夠久，或許過度型態最後也會達到穩定同步。



圖(21) 以固定角度分布( $0^\circ$ 、 $120^\circ$ 、 $360^\circ$ )的  $3 \times 3$  系統平行波。紅線  $30^\circ$ 、黃線  $40^\circ$ 、綠線  $50^\circ$ 、藍線  $60^\circ$ 。



圖(22) 系統  $21 \times 21(441)$  在 beta angle 為(a) $30^\circ$ (b) $40^\circ$ (c) $50^\circ$ (d) $60^\circ$ 時的螺旋波分布情形。

值得注意的是此種穩定週期波類似於 metachronal wave，metachronal wave 是指微生物的鞭毛或纖毛群通過連續動作所產生的波浪運動，注意此時並不是同步的狀態。這些有序的移動導致行進波的出現。Mexican wave 就是一個在宏觀上典型的例子，這種模式廣泛存在於自然界，許多水生生物，如櫛水母動物，軟體動物，纖毛蟲以及許多身體器官的上皮表面的纖毛。纖毛波就是靠連續性運動所產生的，一般纖毛群以列或面的方式排列，鄰近的纖毛會按一定的方向保持一定的相位差運動，若將纖毛列(面)

視作整體觀察時，可以看到波按一定方向依次傳動。

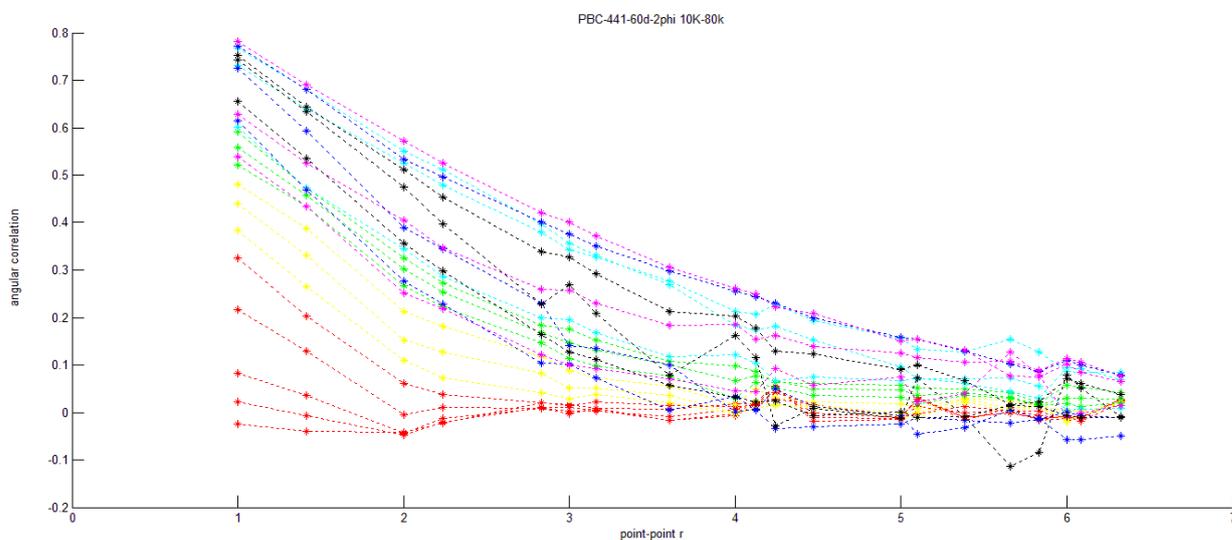
由於轉速來源於力的大小，因此將系統每一顆轉子力量調整為原來的 2~5 倍，發現轉速只影響達到同步化現象的速度快慢，並不會造成整體相位的變化，但不排除施加力量到更大的情況會有其他可能性的產生，這可做為繼續研究的部分。

## 轉子角度的關聯性

以下就模擬上看到的各種情形(包含平行波)，進行轉子間關聯性的探討。為此，我們定義角度關聯函數(angular correlation function)  $\delta(r)$ ，以此物理量來刻劃轉子系統中，轉子之間隨距離增加的連結性強弱關係。該函數定義為

$$\delta(r) = \langle \langle \cos(\theta_i - \theta_j) \rangle \rangle_{j,i} \quad (22)$$

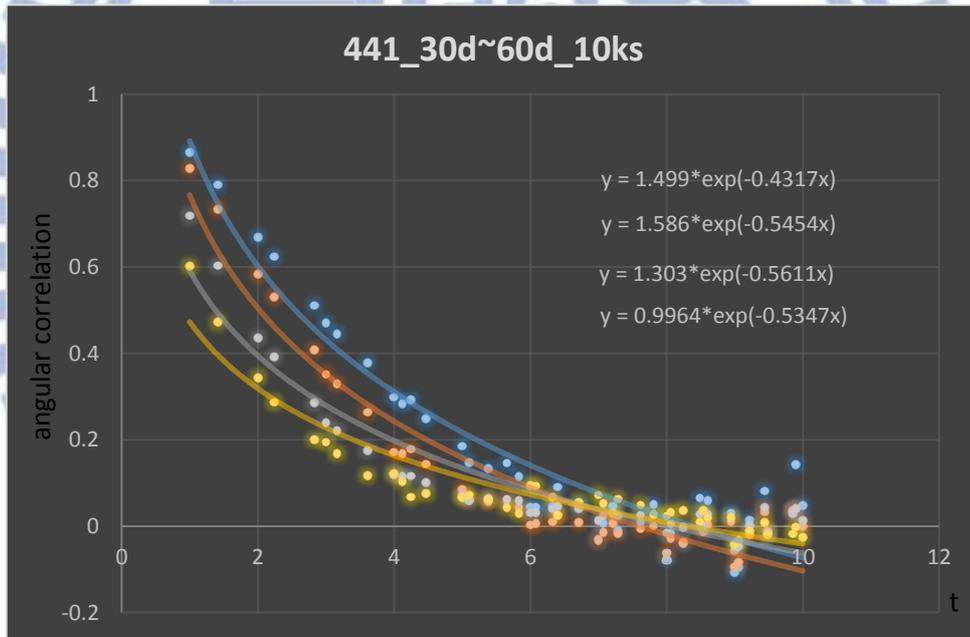
公式表示先選取一轉子*i*，觀察它和跟它相距*r*的一轉子*j*的相關性，以 cos 表達，再對所有轉子*i*與*j*求平均。計算轉子陣列上轉子角度的演化之後發現角度關聯函數隨著距離*r*的增加而遞減，顯示距離越遠相關程度越弱。詳細分析如下：



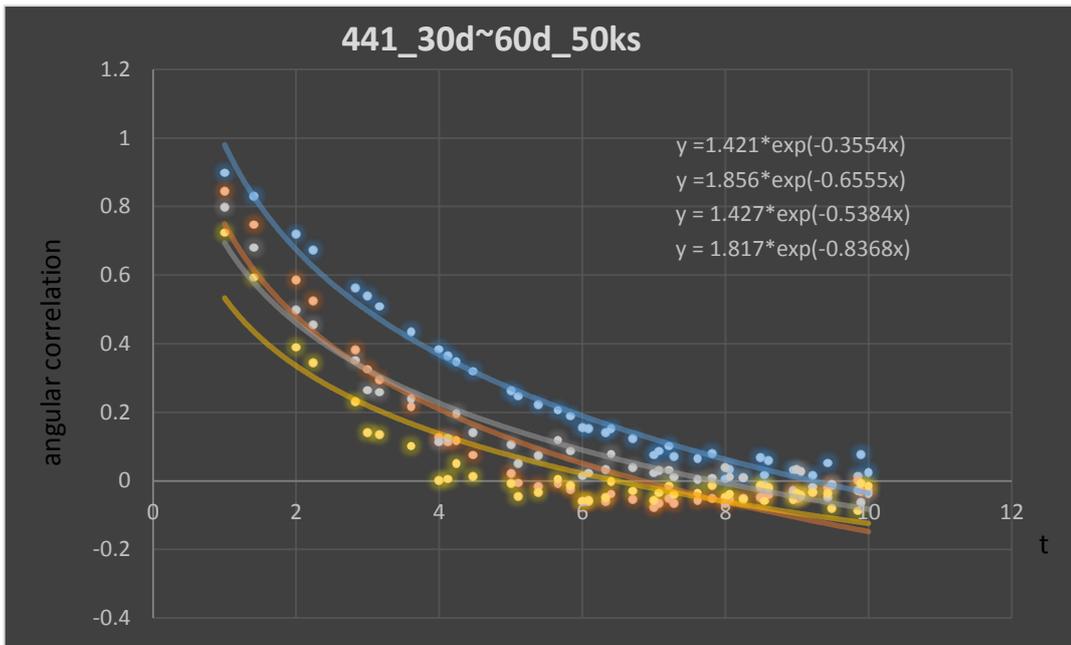
圖(23) 21\*21(441)轉子系統在 beta angle 為 60°時的 angular correlation。

紅色部分表示初始時的 $\delta(r)$ ，可以看出隨著時間增加，系統中彼此距離越靠近的轉子的 angular correlation 有著越明顯的提升，整體而言，轉子間連結性會隨著時間增加慢慢建立起來。時間拉長後(如藍色、紫色曲線) angular correlation 會徘徊在一個區域範圍之內不再繼續上升，此時轉子間的 angular correlation 已達到穩定曲線。此曲線呈現類似指數函數的遞減。即使 *PC* (*phase coherence*)程度不高，如前述的平行波(*PC* 大約在 0.01~0.10 之間)，angular correlation 一樣呈現類似指數的衰減。

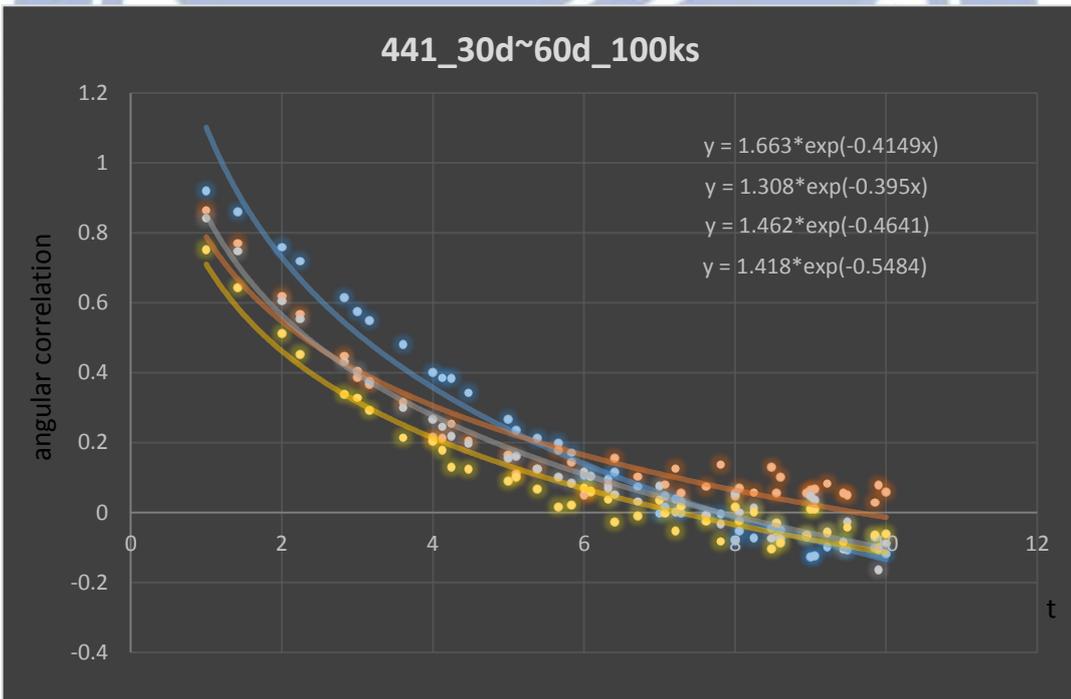
以下圖(24)-(27)為數種 beta angle 的 angular correlation 隨時間增長的演化過程



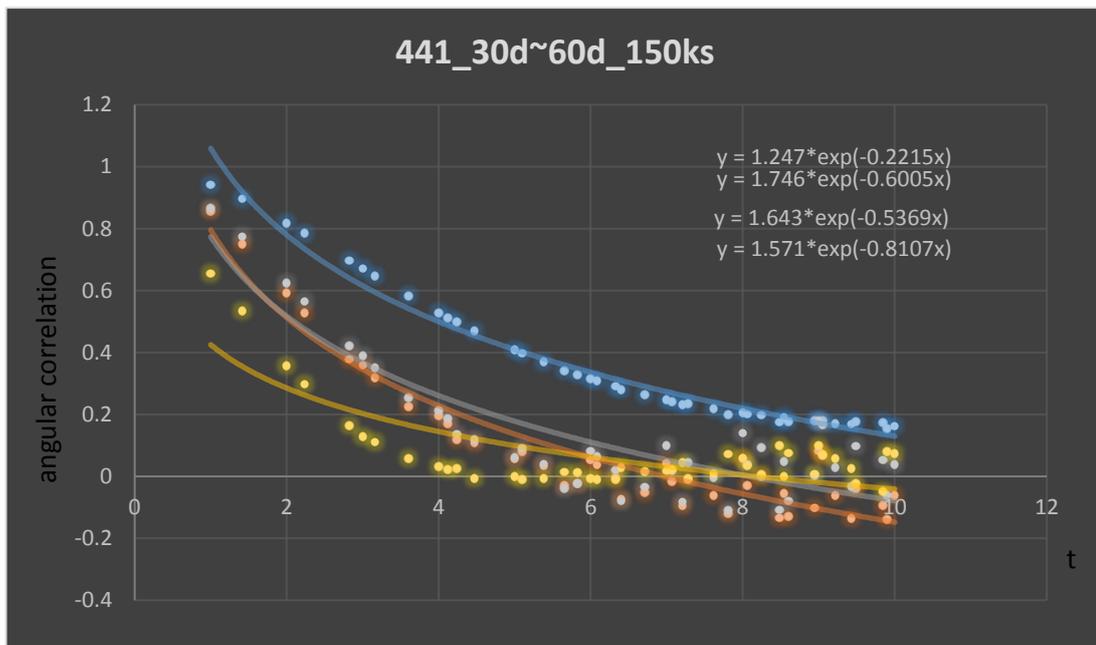
圖(24) 21\*21(441)顆轉子系統，在 1 萬步時 angular correlation 與距離的關係圖。黃色 30°、橙色 40°、灰色 50°、藍色 60°。



圖(25) 21\*21(441)顆轉子系統，在 5 萬步時 angular correlation 與距離的關係圖。黃色 30°、橙色 40°、灰色 50°、藍色 60°。

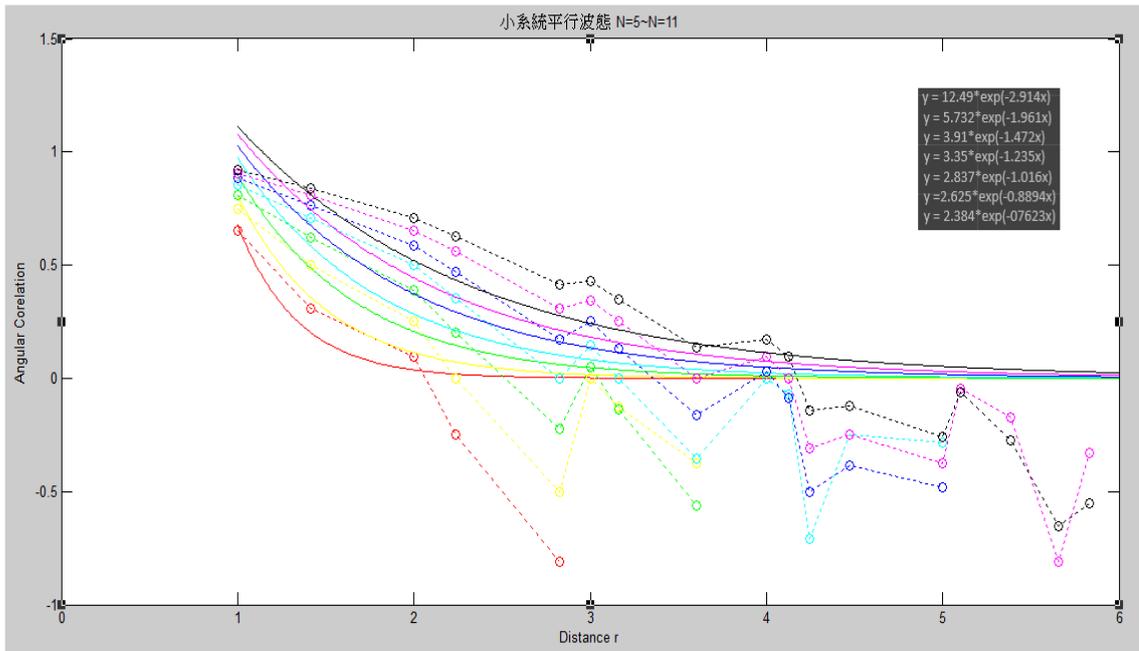


圖(26) 21\*21(441)顆轉子系統，在 10 萬步時 angular correlation 與距離的關係圖。黃色 30°、橙色 40°、灰色 50°、藍色 60°。



圖(27) 21\*21(441)顆轉子系統，在 15 萬步時 angular correlation 與距離的關係圖。黃色 30°、橙色 40°、灰色 50°、藍色 60°。

可以看出 beta angle 越大(如藍色)，angular correlation 越強，但似乎 decay 也越快，暗示有較短的 correlation length，此時對應的系統為較不易同步的系統。以下針對趨向平行波系統的 angular correlation 探討，此現象較易出現在小系統，因此圖(28)搜集了幾個小系統的結果。

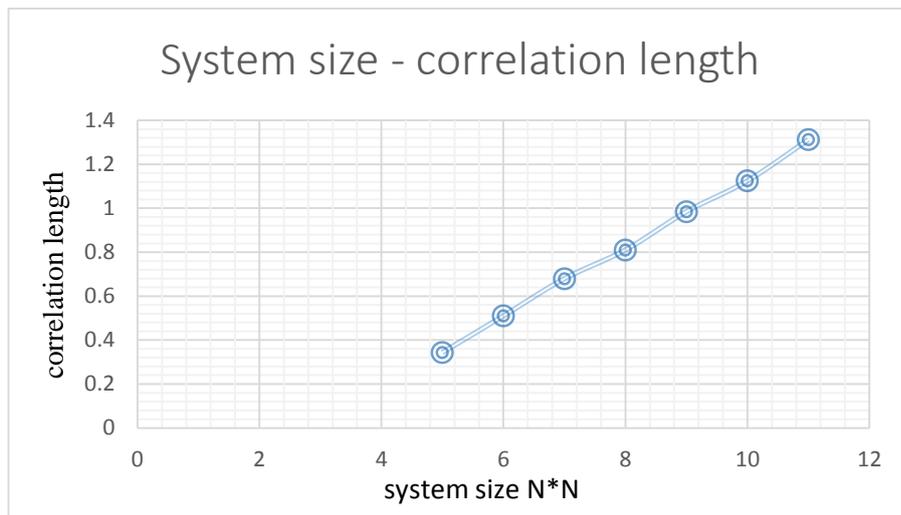


圖(28) 小系統在平行波狀態時，angular correlation 與距離的關係圖。虛線表示不同系統大小，實線為用指數函數擬合出來的趨勢線。依序由下而上為紅色 5\*5、黃色 6\*6、綠色 7\*7、淡藍色 8\*8、藍色 9\*9、紫色 10\*10、黑色 11\*11。

可以看到在平行波狀態時，系統數目越大(如藍色)，轉子系統彼此之間的關聯性越高，顯示互相牽引的能力愈強。有趣的是這類系統的 angular correlation 常衰變到零以下(當轉子彼此遠離時)，零表示完全無序，零以下又表示有了某種秩序，表示轉子在彼此遠離時  $\cos(\theta_i - \theta_j)$  比較常小於零，或  $|\theta_i - \theta_j|$  比較常大於  $\pi/2$ 。將圖(28)的數據利用指數函數作曲線擬合，得到 System size - correlation length 之間的關係。

表(2) System size - correlation length

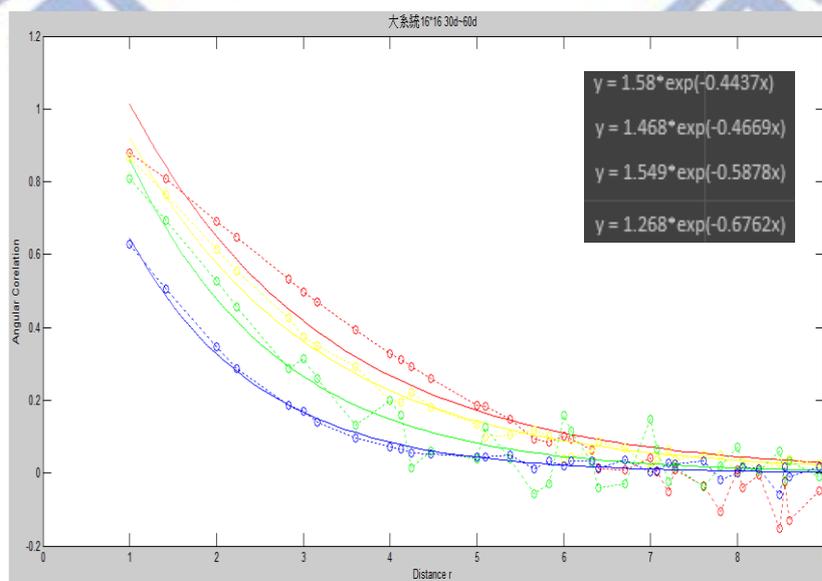
f(x) = a*exp(-x/b), length b>0							
	5*5	6*6	7*7	8*8	9*9	10*10	11*11
a	12.49	5.732	3.91	3.35	2.837	2.625	2.384
b	0.343171	0.509944	0.679348	0.809717	0.984252	1.124353	1.311819
R <sup>2</sup>	0.4023	0.6135	0.6499	0.5898	0.6376	0.5889	0.6287



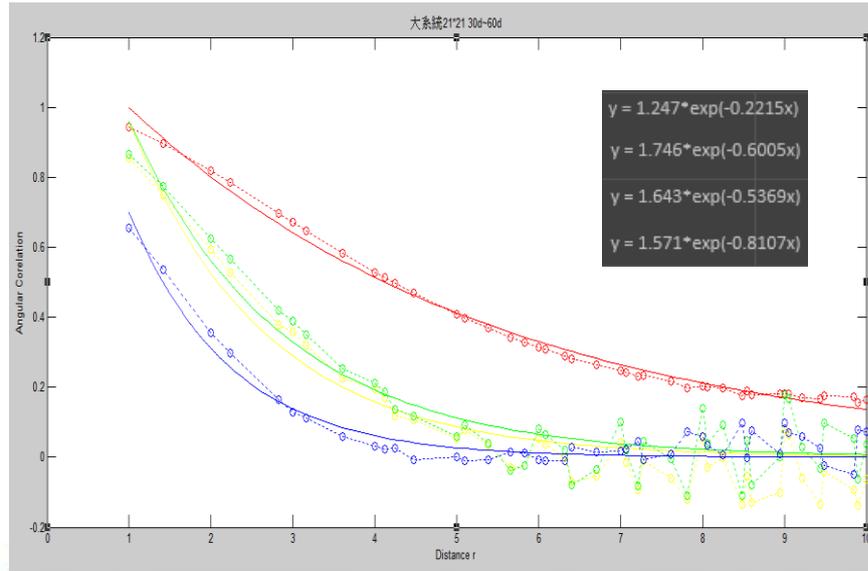
圖(29) 小系統平行波態 System size - correlation length

從圖(29)中可以看到，當小系統處在平行波狀態時，correlation length 隨著系統數目增加而變長，意味著數目越少的系統，具有較短的 correlation length，同時也較不容易達到同步。對應到前述提到 3\*3 系統沒有平行波狀態這個現象，這邊也許就暗示了因為小系統的 correlation length 短，轉子系統之間關聯性弱，不容易穩定，這可能就是我們沒有看到平行波的原因。相對上，當系統數目越多，自然轉子彼此之間的複雜度就會提昇，也就比較容易達到同步，同時擁有比較長的 correlation length。

以下蒐集數目較大的系統(16\*16)、(21\*21)進行討論



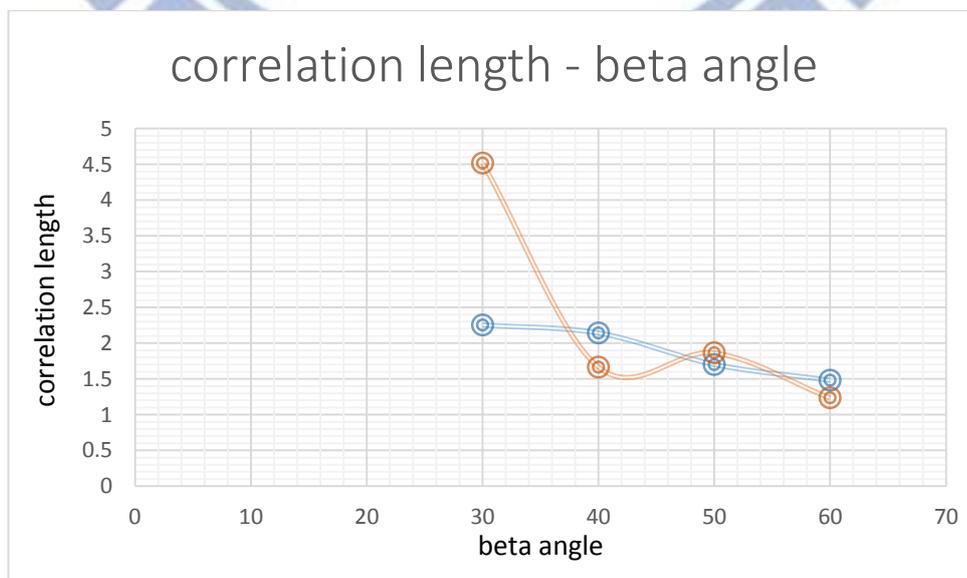
圖(30) 16\*16(256)顆轉子系統，在 15 萬步時 30°到 60°的趨勢圖



圖(31) 21\*21(441)顆轉子系統，在 15 萬步時 30°到 60°的趨勢圖

表(3) correlation length - beta angle

f(x) = a*exp(-x/b) , length b>0				
Size	30	40	50	60
256(b)	2.25	2.14	1.70	1.48
441(b)	4.51	1.66	1.86	1.23



圖(32) 大系統 16\*16(藍色)、21\*21(橘色)顆轉子在 15 萬步時瞬間的 correlation length - beta angle 圖(30°到 60°)

此時大系統轉子雖然尚未達到同步，我們依然可以看出當系統有較小的 beta angle 的時候，具有較長的 correlation length，最後容易趨向同步化。(後來模擬也證實在 30° 時兩系統都會達到同步)。雖然橘色線並不是很好的走勢，但這僅僅是某一瞬間的情形，我們同樣可以看到 correlation length 隨著 beta angle 增加而漸短，此時的大系統因轉子數目多，轉子彼此距離較長，關聯性越低，系統愈不容易同步。



## 第五章、結論與未來工作

最後我們從分析中得到一些總結， $G(r)$ 可以用指數衰減形式表示 $e^{-x/b}$ ， $b$ ：

correlation length：

- (1) 轉子陣列中的 beta angle 愈大，correlation length 愈小，顯示系統不容易同不，轉子之間平均關聯性低；
- (2) 系統轉子數目愈大，correlation length 呈正相關增長，表示轉子數目越多，影響所及範圍愈廣。
- (3) 轉子系統對初始條件十分敏感，與混沌理論有幾分相似，稍微不同的初始相位分布可能會導致完全不一樣的結果發生，從小系統的模擬中可以知道，並非每一組的起始相位分布都會出現平行波的狀態，而發生平行波時的 beta angle 範圍也不會完全一樣。這些都是可以繼續討論的部分。

等待解決的問題：

- (1) 以圖(22)為例，當大系統在趨向同步過程中，會以某幾個點作為同步中心，形成各自區域性旋轉同步，而 beta angle 愈大，分區同步的數目增加，而區域化範圍就會變小。這如我們所預期，看到類似於磁軸磁化過程中會區域性的磁化現象，而轉子系統中同樣也存在。比較麻煩的是，轉子系統區域性的磁化現象是動態的，並非靜止不動的固定點，旋轉中心會隨時間隨機改變位置，同時磁化範圍也會不斷地與周圍區塊交互影響。未來期許可以找出一些物理量來刻劃這些動態過程，如刻劃 beta angle 與區域化的密度、範圍...之間的關係，或是旋轉中心的漂移速度...等。
- (2) 鞭毛地毯同步後，系統會掉入一 limit cycle 吸子，調動離子濃度將改變鞭毛間流體交互作用大小，在增強再減弱離子濃度的過程，吸子行徑可能出現類似 Ising model 的遲滯效應(亦即 limit cycle 吸子走不同路線)，我們可以選擇參數空間觀察轉子系統出現此有趣現象的可能性。

## 文獻參考

- [1] Nariya Uchida and Ramin Golestanian, “Synchronization and Collective Dynamics in a Carpet of Microfluidic Rotors” *Phys. Rev. Lett.* 104, 178103 (2010)
- [2] Ramin Golestanian, Julia M. Yeomans and Nariya Uchida, “Hydrodynamic Synchronization at low Reynolds number” *Soft Matter*, 7, 3074 (2011)
- [3] J. R. Blake, “A note on the image system for a Stokeslet in a no-slip boundary” *Proc. Camb. Phil. Soc.* 70, 303 (1971)
- [4] J. R. Blake and A. T. Chwang, “Fundamental singularities of viscous flow” *Journal of Engineering Mathematics, Vol. 8, No. 1, January 1974*
- [5] Michael Reichert, “Hydrodynamic Interactions in Collidal and Biological Systems”
- [6] Y.-T. Hsiao et al. *Appl. Phys. Lett.* 100, 203702 (2012).
- [7] B. M. Friedrich and F. Juelicher, *Phys. Rev. Lett.* 109, 138102 (2012).
- [8] Berg H C, Anderson R. A. *Nature*, 1973 Oct 19, 245(5425) : 380 ~ 382
- [9] E. M. Purcell, “Life at low Reynolds number”
- [10] Y. Kuramoto, *Chemical Oscillations, Waves, and Turbulence*, (Springer, New York, 1984).
- [11] J. D. Crawford, *Phys. Rev. Lett.*, 1995, 74, 4341.
- [12] S. H. Strogatz, *Phys. D*, 2000, 143, 1
- [13] H.Sakaguchi,S.Shinomoto and Y.Kuramoto, *Prog.Theor.Phys.*,1987,77,1005h
- [14] D.Chowdhury and M. C. Cross, *Phys. Rev. E: Stat., Nonlinear, Soft Matter Phys.*,2010,82,016205
- [15] S. Gueron and K. Levit-Gurevich, *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.*, 1999, 96, 12240.
- [16] Y. W. Kim and R. R. Netz, *Phys. Rev. Lett.*, 2006, 96, 158101.

- [17] G. J. Elfring and E. Lauga, Phys. Rev. Lett., 2009, 103, 088101.
- [18] B. Guirao and J.-F. Joanny, Biophys. J., 2007, 92, 1900.
- [19] M. Kim and T. R. Powers, Phys. Rev. E: Stat., Nonlinear, Soft Matter Phys., 2004, 69, 061910.
- [20] A. Ryskin and P. Lenz, Phys. Biol., 2006, 3, 285.
- [21] J. Gray, Ciliary Movements (Cambridge University Press, Cambridge, 1928)
- [22] I. H. Riedel, K. Kruse and J. Howard, Science, 2005, 309, 300.
- [23] Y. Yang, J. Elgeti and G. Gompper, Phys. Rev. E: Stat., Nonlinear, Soft Matter Phys., 2008, 78, 061903.

