

文章编号:1004-7220(2015)02-0131-06

多根螺旋体鞭毛在二维微小周质空间内的受力特性

费继友^{1,2}, 曾俊雄², 高铁瑜¹, 朱江楠¹, 徐勋¹, 王悦³

(1. 西安交通大学 能源与动力工程学院, 西安 710049; 2. 大连交通大学 机械工程学院, 大连 116028;

3. 中船重工第703研究所 无锡分部, 无锡 214151)

摘要: **目的** 研究多根螺旋体鞭毛成带状分布情况下在微小周质空间内的受力特性。**方法** 使用两平行平板的二维模型简化周质空间,采用数值模拟方法,研究鞭毛间距和偏心率对螺旋体鞭毛受力和力矩以及对螺旋体原生质柱切应力的影响规律。**结果** (1)鞭毛水平方向受力曲线随偏心率呈抛物线变化规律,鞭毛两侧压力差和黏性阻力随偏心率逐渐增大是造成鞭毛水平方向受力曲线出现峰值的主要原因,鞭毛间距对鞭毛水平方向受力影响较小;(2)鞭毛力矩曲线随偏心率呈指数变化规律,鞭毛间距越小,鞭毛力矩越大;(3)鞭毛间距对原生质柱壁面切应力没有显著影响,但随鞭毛数量增多和偏心率增大而增大。**结论** 数值模拟结果可以定性反映螺旋体鞭毛受力特性,为进一步认识螺旋体形态结构、运动机制以及治病特性提供参考。

关键词: 螺旋体鞭毛; 微小周质空间; 数值模拟; 生物流体力学

中图分类号: R 318.01 文献标志码: A

DOI: 10.3871/j.1004-7220.2015.02.131

Mechanical characteristics of the spirochete flagella in 2D micro-periplasmic space

FEI Ji-you^{1,2}, ZENG Jun-xiong², GAO Tie-yu¹, ZHU Jiang-nan¹, XU Xun¹, WANG Yue³

(1. School of Energy and Power Engineering, Xi'an Jiao Tong University, Xi'an 710049, China; 2. School of Mechanical Engineering, Dalian Jiao Tong University, Dalian 116028, Liaoning, China; 3. Wu Xi Division of No.703 Institute, China Shipbuilding Industry Corporation, Wuxi 214151, Jiangsu, China)

Abstract: Objective To investigate mechanical characteristics of the spirochete flagella with tight-fitting ribbon configuration in micro-periplasmic space. **Methods** The 2D model of two parallel plates was used to simplify the periplasmic space, and the effects of flagellum spacing and eccentricity on force and torque acted on the spirochete flagella, and wall shear stress acted on the spirochete protoplasmic cylinder were studied by using numerical simulation method. **Results** (1) The relationship between the flagellum horizontal force and eccentricity was presented as a parabolic curve, and the peak value of the flagellum horizontal force was mainly caused by the gradual increase of pressure difference at two sides of the cylinder and the resistance viscous force as well. Flagellum spacing had no significant influence on flagellum horizontal force. (2) The relationship between the flagellum torque and eccentricity was presented as an exponential curve, and smaller flagella spacing would cause bigger flagella torque. (3) Flagellum spacing had no significant effect on wall shear stress of the protoplasmic cylinder, but it would be increased with the number of flagella and the eccentricity increasing. **Conclusions** Numerical simulation results in this study can qualitatively reflect mechanical characteristics of the spirochete flagella, and also provide references for further understanding the morphology of spirochete as well as its kinematic mechanism and pathogenic characteristics.

Key words: Spirochete flagella; Micro-periplasmic space; Numerical simulation; Bio-fluid mechanics

螺旋体细菌是细菌家族中非常独特的一类细菌,与其他类别的细菌相比具有复杂的形态结构和神秘的运动特性,而这种独特的形态结构和运动特性与螺旋体的致病特性密切相关^[1]。螺旋体细菌能够在复杂环境高黏性凝胶状介质中游动,比如血液和胞外基质等聚合物环境中;它们寄宿在人体以及动物体内,通常具有很强的致病特性^[2]。螺旋体细菌在结构上与其他细菌最显著的区别在于:螺旋体的所有鞭毛(7~11根)都内置于微小螺旋体周质空间内(细胞外膜与原生质柱细胞体之间),故螺旋体鞭毛并不会与外界环境直接接触;每根螺旋体鞭毛都与成线性分布在螺旋体细菌两端的鞭毛电机相结合,且沿着原生质柱细胞体轴线缠绕在原生质柱细胞体上^[3]。对于不同螺旋体类别,其结构尺寸、周质空间内鞭毛数量和分布规律以及因螺旋体运动而产生螺旋形态或者平波形态而有所差别^[2,4]。其中,伯氏螺旋体的形态结构和运动特性最具有代表性,国外学者通常以它作为研究螺旋体形态结构和运动特性的对象。其运动特性为:呈左螺旋状的鞭毛在周质空间内由鞭毛电机的驱动而旋转,并与原生质柱细胞体相互作用,导致整个螺旋体产生向后传递的平动波,从而推动螺旋体向前运动^[2,4,6]。正是因为螺旋体拥有如此特殊的形态结构和运动特性,它才具有两大独特优势:①螺旋体细菌能够在高黏性的凝状介质中有效游动,而其他类别的细菌不具备这项能力;②由于螺旋体鞭毛内置于周质空间内,鞭毛可以免遭外部恶劣环境的破坏以及特定抗体的攻击,故螺旋体的生存能力和致病能力比其他类别的细菌会更强。

Stuart等^[1]使用高压电子显微镜发现,周质空间内的鞭毛呈束状分布(7~11根鞭毛捆绑在一起);Charon等^[6]通过使用更为先进的低温电子断层扫描技术发现,周质空间内的鞭毛呈带状分布,并分析认为这种带状分布的鞭毛在结构上更具优势,能够提高螺旋体鞭毛游动效率。因为周质内呈带状分布的每根鞭毛均等地直接施加力和扭矩在螺旋体原生质柱细胞体上,可减少鞭毛束状分布状态下每根鞭毛之间的相互影响和干涉作用,从而提高螺旋体的游动效率。Vigm等^[7]研究螺旋体鞭毛产生力矩与螺旋体产生向后传递平波频率的关系,结果发现在鞭毛施加力矩小于 $0.4 \text{ pN} \cdot \mu\text{m}$ 时,螺旋体的

波动频率为0;在鞭毛施加力矩大于 $0.4 \text{ pN} \cdot \mu\text{m}$ 时,螺旋体的波动频率随鞭毛施加力矩成线性分布。Yang等^[8]通过简化物理模型,研究单根鞭毛在流体阻力模型(鞭毛未与原生质柱接触)和摩擦模型(鞭毛与原生质柱接触)下的受力和力矩情况,并建立相应的数学表达式和阻力系数。随后Yang等^[9]采用数量级分析方法和润滑理论分析方法推导出单根鞭毛在二维3种不同几何形状(两平行平板模型、两弧形平板模型、两同心圆模型)下受力和力矩的理论解析解,并与相应模型下的数值模拟结果相吻合;该研究表明,除了两同心圆模型对受力曲线有较大影响外,其余两种几何模型对鞭毛受力和力矩曲线无太大影响,不同的几何约束参数 $k = a/b$ 和曲率 ξ 对鞭毛受力和力矩影响也不大,但偏心率对鞭毛受力和力矩影响较大。

因此,为研究多根鞭毛之间相互作用对鞭毛受力和力矩的影响,本课题组在文献^[9]研究基础之上,结合文献^[6]中多根鞭毛在周质空间内成带状分布且鞭毛间距约为3 nm的情况,采用数值模拟方法,只考虑3根鞭毛在两二维平行平板、鞭毛等间距变化、不同偏心率条件下,研究鞭毛受力和力矩特性以及对原生质柱壁面的受力影响。这种多根鞭毛模型比文献^[9]中单根鞭毛模型更能真实地反映螺旋体鞭毛的受力特性。本研究将对进一步理解和认识螺旋体独特形态结构、运动特性、致病特性以及对微型流体机械设备^[10]的设计提供参考。

1 物理模型及计算方法

图1所示为螺旋体的结构,其主要尺寸为:螺旋体长 $\sim 10 \mu\text{m}$,原生质柱直径 $\sim 300 \text{ nm}$,在包含鞭毛的周质空间厚度 $\sim 40 \text{ nm}$,螺旋体鞭毛直径 $\sim 16 \text{ nm}$ ^[6,8]。带状分布的螺旋体鞭毛均以逆时针方向旋转,带动周围的黏性流体以驱动原生质柱顺时方向旋转。

图2所示为2根和3根鞭毛的计算物理模型(模型简化原理见参考文献^[9])。比较2根鞭毛模型下鞭毛1水平方向受力和3根鞭毛模型下鞭毛2水平方向受力情况发现,在3根鞭毛模型中,另外2根鞭毛对最左端的鞭毛2在水平方向受力影响比在2根鞭毛模型中,另外1根鞭毛对最左端的鞭毛1受力的影响小于10%。因此,在3根鞭毛模型中,可以忽略鞭毛2左侧的鞭毛与鞭毛3右侧的鞭毛对

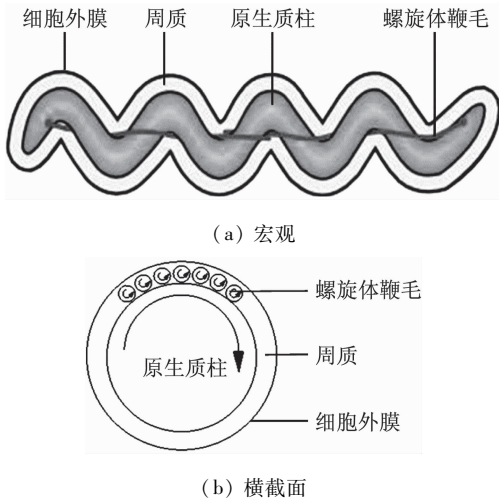


图1 螺旋体结构示意图

Fig.1 Structure schematic of the spirochete

(a) Macroscopic view, (b) Cross-sectional view

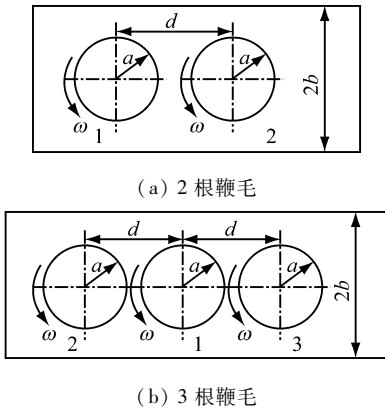


图2 计算物理模型

Fig.2 Computational physical model (a) 2 flagella, (b) 3 flagella

鞭毛1水平方向受力的影响,即只考虑3根鞭毛相互作用的情况对鞭毛1受力特性的影响。在文献[9]研究基础之上,在二维平行平板中,只讨论3根鞭毛呈带状分布且在不同偏心率和不同鞭毛间距(但在相同相对偏心率条件下,3根鞭毛是等间距的)条件下的物理模型,采用有限体积数值分析方法,研究鞭毛1受力和力矩以及原生质柱水平切应力变化规律。3根鞭毛计算模型的鞭毛半径 $a = 8 \text{ nm}$,两平行平板间距 $2b = 40 \text{ nm}$,设物理模型的坐标原点选定在鞭毛1的圆心上。文献[6]中研究表明,带状相邻鞭毛之间间隙约 3 nm ,故选取鞭毛间距 $d = 17 \sim 21 \text{ nm}$,旋转角速度 $\omega = 1570 \text{ rad/s}^{[11]}$ 。定义几何约束参数 $k = a/b = 0.4$,偏心率 $e = c/b$,其

中 c 为鞭毛圆心到两上下平行平板中心线之间的距离。由于物理模型具有关于水平轴线对称结构,故考虑3根鞭毛同时向下壁面(原生质柱壁面)逐渐靠近的情况。

模型网格采用结构化网格,重点考察3根鞭毛和两上下平行平板之间的区域,并在该区域进行网格加密处理。经过多次试算,确定模型网格总量大于 35000 ,此时鞭毛受力大小与网格数量无关。定义雷诺数 $Re = 2\rho\omega a^2/\mu$,以水作为介质, μ 为水的动力黏性系数。由于螺旋体细菌尺寸在 nm 数量级上,故 $Re \propto 10^{-4} \leq 1$,属于低雷诺数流动。由斯托克斯数 Ns 与 Re 的关系 ($Ns = St \cdot Re$) 可知,当 $Re \rightarrow 0$ 时, $Ns \rightarrow 0$ 。因此,忽略 $N-S$ 的局部惯性力,将该模型流动转化为定场流动。由于鞭毛尺寸很小,进一步忽略质量力。则控制方程可简化为:

$$\nabla^2 \mathbf{u} = \mu^{-1} \nabla P, \quad \nabla \cdot \mathbf{u} = 0$$

采用 ANSYS Fluent 14.5 有限元软件进行计算。考虑到该计算模型为低雷诺数下的层流定场流动,故选用关于静止和运动区域并存问题模型中最简单、计算量也最为经济的多重参考系模型。求解器使用分离隐式求解器,方程采用离散格式为二阶迎风格式,压力速度耦合方法采用 SIMPLE 方法,压力插值方式采用标准方式。

2 计算结果

2.1 鞭毛受力结果

图3为鞭毛间距 $d = 17 \sim 21 \text{ nm}$ (3根鞭毛模型)和 $d = \infty^{[9]}$ (单根鞭毛模型)鞭毛1水平方向受力曲线。从图3单根鞭毛模型中($d = \infty$)鞭毛1水平方向受力曲线可以看出,鞭毛水平方向受力随着相对偏心率 e/e_{\max} 的增加而增大,最后曲线趋于平缓。因为鞭毛水平方向受力主要是由鞭毛两侧的压力差产生,而鞭毛两侧压力差是由于鞭毛的旋转拖动流体流过变截面通道引起流体的收敛性和发散性流动而产生^[9]。

从3根鞭毛模型($d = 17 \sim 21 \text{ nm}$)鞭毛1水平方向受力曲线可以看出,鞭毛1水平方向受力在 $e/e_{\max} = 0.5$ 时达到峰值 25.8 nN ,与单根鞭毛水平方向受力最大值相比减少约 43.3% 。在 $e/e_{\max} > 0.5$ 以后,受力曲线逐渐下降。在 $e/e_{\max} > 0.9$ 以后,鞭毛间距对鞭毛受力有较大影响,在 $e/e_{\max} = 1$ 时,

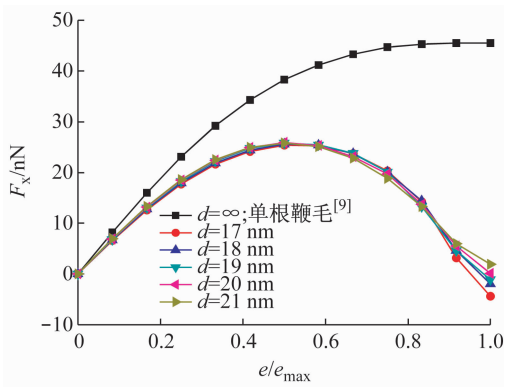


图3 不同鞭毛间距下鞭毛1水平方向受力曲线
Fig. 3 Horizontal force curves of No. 1 flagellum with different flagella spacing

最大鞭毛间距 ($d = 21 \text{ nm}$) 与最小鞭毛间距 ($d = 17 \text{ nm}$) 受力值相差为 6.2 nN , 相对于单根鞭毛受力最大值减小幅度大于 95% 。

2.2 鞭毛压力与流场分布

图4、5所示为在鞭毛间距 $d = 20 \text{ nm}$ 、不同 e/e_{\max} 条件下的压力分布情况。在 $e/e_{\max} = 0$ 时, 鞭毛1所处的位置压力分布云图为反对称分布; 从与之相对应的, 鞭毛1所在位置上下壁面的压力差为 0 , 导致鞭毛水平方向受力为 0 。当 e/e_{\max} 逐渐增加到 0.5 时, 鞭毛1两侧的压力差从 0 Pa 增加到 2.0 Pa 。当 $e/e_{\max} > 0.5$ 以后, 鞭毛1两侧的压力差从 2.0 Pa 增加到 8.3 Pa 。随着 e/e_{\max} 逐渐增大, 鞭毛1两侧的压力差也逐渐增大。

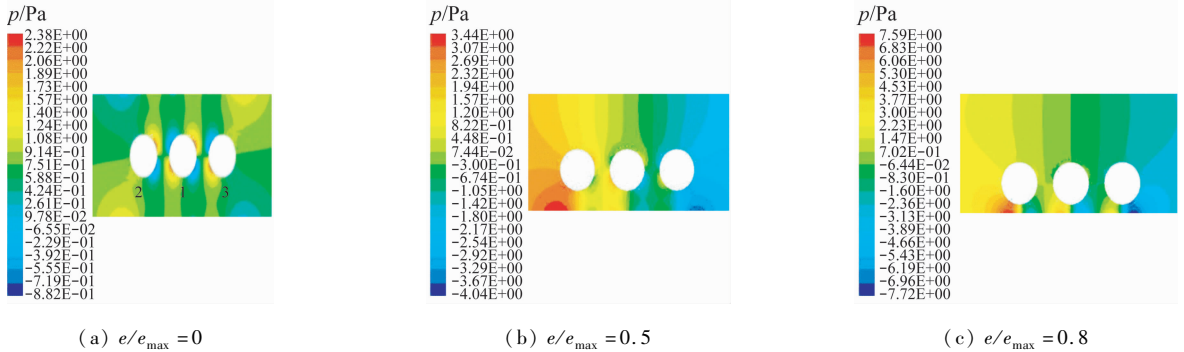


图4 3根鞭毛模型在不同相对偏心率下压力云图 ($d = 20 \text{ nm}$)

Fig. 4 Pressure contour of 3-flagellum model at different relative eccentricity

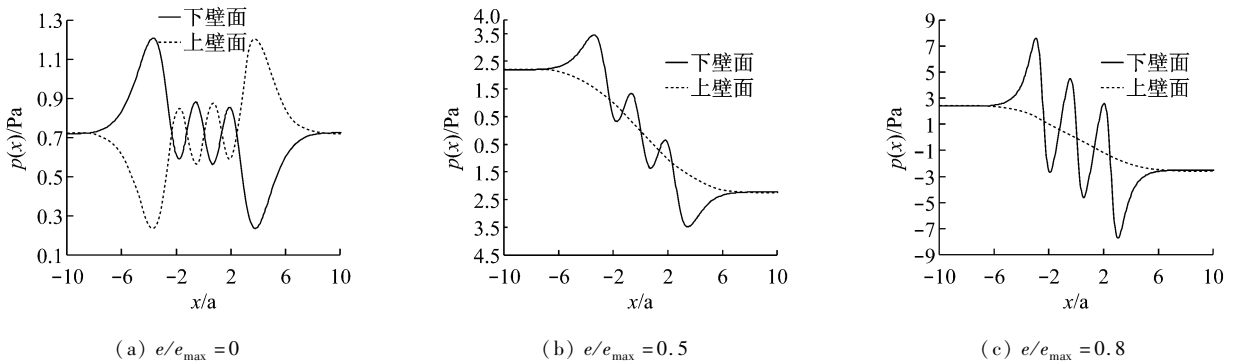


图5 3根鞭毛模型在不同相对偏心率下上下壁面压力分布曲线 ($d = 20 \text{ nm}$)

Fig. 5 Pressure distributions on the upper and lower wall of 3-flagellum model at different relative eccentricity

图6所示为在鞭毛间距 $d = 20 \text{ nm}$ 、不同 e/e_{\max} 条件下的流线图。随着 e/e_{\max} 逐渐增大, 鞭毛1附近的反向涡旋数量增多, 涡旋强度也不断增强, 导致鞭毛1的黏性阻力会迅速增大, 阻碍鞭毛的运动。

2.3 鞭毛力矩

图7所示为不同鞭毛间距条件下, 鞭毛1力矩与 e/e_{\max} 关系曲线。鞭毛1力矩随着 e/e_{\max} 呈指数分布规律, 对于相同鞭毛间距, 最大力矩约是最小力矩

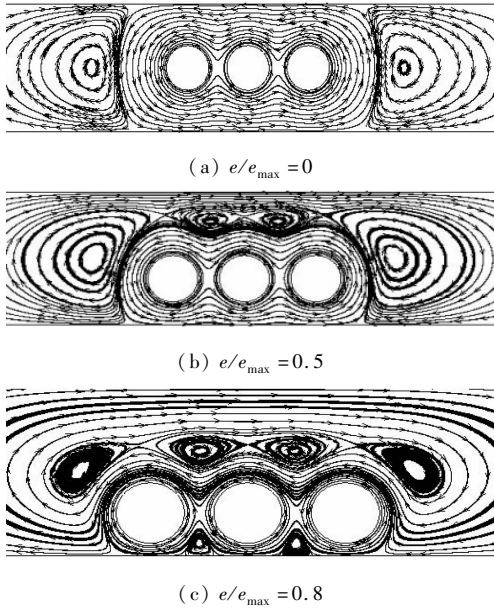


图6 不同相对偏心率下3根鞭毛模型流线图($d = 20 \text{ nm}$)

Fig.6 Streamline chart of 3-flagellum model at different relative eccentricity

的1.3倍;随着鞭毛间距的增大,鞭毛力矩逐渐减小;在 $d = 17 \text{ nm}$ 和 $d = 21 \text{ nm}$ 时,最小力矩分别比单根鞭毛最小力矩大53%和20%;当鞭毛间距足够大时,即 $d = \infty$,此时可以忽略鞭毛之间的影响。

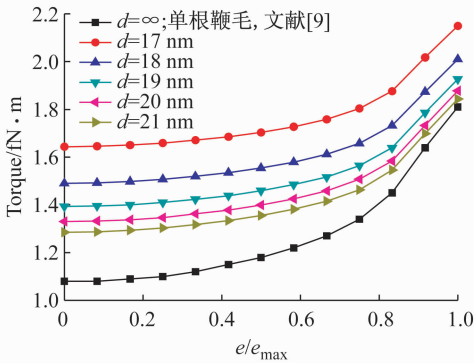


图7 不同鞭毛间距下鞭毛1力矩曲线

Fig.7 Torque curves of No.1 flagellum with different flagellum spacing

2.4 原生质柱壁面水平切应力

图8所示为在不同鞭毛间距条件下,原生质柱壁面水平切应力与 e/e_{\max} 之间的关系曲线。随着 e/e_{\max} 增大,原生质柱壁面水平切应力几乎呈线性增加,鞭毛间距对受力没有显著影响。图9所示为鞭

毛数量和原生质柱壁面受力之间的关系曲线。鞭毛数量和 e/e_{\max} 对原生质柱壁面上的切应力影响很大,在 $e/e_{\max} = 1$ 时,2根和3根鞭毛模型下对原生质柱壁面的切应力分别是单根鞭毛情况下的2.9倍和4.8倍。因此,可以推测当鞭毛数量为7~11根时,螺旋体原生质柱壁面上的切应力会更大,这将极大地提高螺旋体的游动效率。

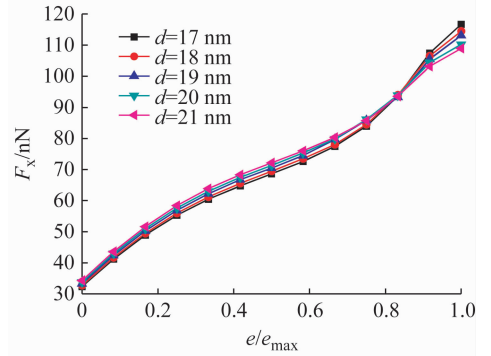


图8 鞭毛间距对原生质柱壁面水平切向力的影响

Fig.8 Effects of flagellum spacing on wall shear stress of the protoplasmic cylinder

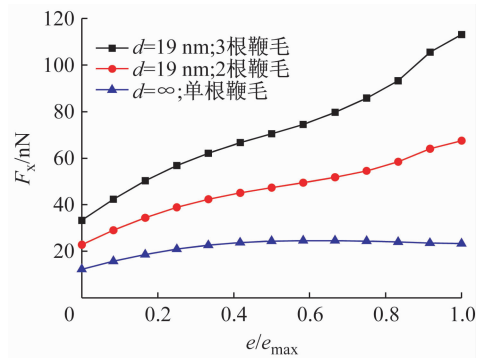


图9 鞭毛数量对原生质柱壁面水平切向力的影响

Fig.9 Effects of flagellum number on wall shear stress of the protoplasmic cylinder

3 讨论

3.1 鞭毛受力分析

从鞭毛压力云图与上下壁面压力曲线分布结果以及流场分布结果可以看出, $e/e_{\max} = 0 \sim 0.5$ 时,鞭毛1的黏性阻力增量相对于其两侧的压力差增加量较小,从而导致鞭毛两端压力差与黏性阻力的合力随 e/e_{\max} 增大而增大,即鞭毛1水平受力曲线逐渐上升。当 $e/e_{\max} > 0.5$ 以后,尽管鞭毛1两侧的压力差

也逐渐增大,但是由于流入3根鞭毛与上下壁面之间区域的流体存在较大的逆压梯度而产生反向涡旋;且 e/e_{\max} 越大,旋涡数量会增多,涡旋强度也会增强,导致鞭毛1的黏性阻力大于其两侧的压力差,最终使得鞭毛1受力曲线在 $e/e_{\max} > 0.5$ 以后逐渐下降至0。这也就是多根鞭毛模型下,鞭毛水平方向受力会出现峰值的根本原因。在文献[9]中单根鞭毛模型下,流场产生的反向涡旋数量少(鞭毛附近始终就两个反向漩涡),强度也相对较小,故对鞭毛产生的黏性阻力也相对较小,使得鞭毛受力曲线最终趋于平缓。与文献[9]中单根鞭毛水平方向受力曲线相比,本文3根鞭毛模型鞭毛受力曲线更能真实地反映鞭毛实际的受力情况。

3.2 鞭毛力矩及原生质柱壁面水平切应力分析

鞭毛力矩是由于流体的黏性力造成的。随着 e/e_{\max} 的增大,鞭毛1壁面法向速度梯度逐渐变大,鞭毛力矩变大。鞭毛间距越大,鞭毛壁面法向速度梯度越小,故鞭毛力矩也越小。原生质柱壁面水平切应力也是由于流体的黏性力产生的, e/e_{\max} 越大,原生质柱壁面的法向速度梯度越大,壁面水平切向力也就越大。这对提高螺旋体细菌的游动效率具有重要意义。

4 结论

本研究通过数值模拟方法,分别探讨3根鞭毛模型在不同偏心率和鞭毛间距条件下对鞭毛1水平方向受力和力矩以及原生质柱壁面上水平切应力的影响,得出的结论如下:

(1) 对于鞭毛水平方向受力特性,在相对偏心率较小时,鞭毛水平方向受力由鞭毛两侧的压力差起主导作用,随相对偏心率增大而增大;在相对偏心率较大时,由于涡旋的存在会增大鞭毛的阻力,减小鞭毛水平方向受力。鞭毛1水平方向受力极大值比单根鞭毛极大值减小43.3%^[9],鞭毛间距越大,对鞭毛水平方向受力影响越小。

(2) 鞭毛力矩曲线随相对偏心率呈指数变化规律。鞭毛间距越小,鞭毛壁面法向速度梯度越大,故鞭毛力矩也越大。对于相同鞭毛间距,最大力矩约是最小力矩的1.3倍。

(3) 鞭毛间距对原生质壁面水平切应力影响不明显,随着偏心率呈线性变化规律。鞭毛数量增加对原生质柱壁面水平切向力有显著影响,且数量越大切向力越大。因此,在螺旋体鞭毛成带状分布条件下,鞭毛数量增加和偏心率增大会提高螺旋体游动效率。

参考文献:

- [1] Stuart FG, Buttle KF, Charon NW. Structural analysis of the leptospiraceae and *Borrelia burgdorferi* by high-voltage electron microscopy [J]. *J Bacteriol*, 1996, 178 (22): 6539-6545.
- [2] Li CH, Motaleb MA, Sal M, *et al.* Spirochete periplasmic flagella and motility [J]. *J Mole Microbiol Biotechnol*, 2000, 2(4): 345-354.
- [3] Limberger RJ. The periplasmic flagellum of spirochetes [J]. *J Mole Microbiol Biotechnol*, 2004, 7(1-2): 30-40.
- [4] Dombrowski C, Kan W, Motaleb MA, *et al.* The elastic basis for the shape of *Borrelia burgdorferi* [J]. *Biophysical J*, 2009, 96(11): 4409-4417.
- [5] Charon NW, Cockburn A, Li CB, *et al.* The unique paradigm of spirochete motility and chemotaxis [J]. *Ann Rev Microbiol*, 2012, 66: 349-370.
- [6] Charon NW, Goldstein SF, Marko M, *et al.* The flat-ribbon configuration of the periplasmic flagella of *Borrelia burgdorferi* and its relationship to motility and morphology [J]. *J Bacteriol*, 2009, 191(2): 600-607.
- [7] Vigm DK, Wolgemuth CW. Swimming dynamics of the Lyme disease spirochete [J]. *Phys Rev Lett*, 2012, 109(21): 218104-1-218104-5.
- [8] Yang J, Huber G, Wolgemuth CW. Forces and torques on rotating spirochete flagella [J]. *Phys Rev Lett*, 2011, 107(26): 206801-1-206801-4.
- [9] Yang J, Wolgemuth CW, Huber G. Force and torque on a cylinder rotating in a narrow gap at low Reynolds number: Scaling and lubrication analyses [J]. *Phys Fluids*, 2013, 25(5): 051901-1-051901-5.
- [10] Götze IO, Gompper G. Dynamic self-assembly and directed flow of rotating colloids in microchannels [J]. *Phys Rev E Stat Nonlin Soft Matter Phys*, 2011, 84 (3 Pt 1): 031404-1-031404-11.
- [11] 王蒙利. 鞭毛电机的运行机理和特性研究[D]. 天津: 天津大学硕士学位论文, 2004.