

令和元年6月13日現在

機関番号：24506

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2016～2018

課題番号：16K17554

研究課題名(和文) 複雑流体の記憶効果とマルチスケールモデリング

研究課題名(英文) Multiscale modeling and simulation for complex fluids with memory effects

研究代表者

安田 修悟 (YASUDA, Shugo)

兵庫県立大学・シミュレーション学研究所・准教授

研究者番号：70456797

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,500,000円

研究成果の概要(和文)：本研究では、走化性細菌の集団流動と高分子液体の熱流動を対象とし、それぞれの問題における記憶効果を記述することの出来る数理モデルの構築とその数理モデルを基にした新しいシミュレーション手法の開発を行った。走化性細菌集団の問題では、ボルツマン型運動論モデルを基に新しいモンテカルロシミュレーションを開発し、走化性細菌集団の構造形成ダイナミクスをメソスコピックな視点から解析した。高分子液体の熱流動問題では、独自開発した分子動力学と計算流体力学のマルチスケール法を、絡み合い系高分子液体に拡張し、高分子鎖のミクロな絡み合い運動とマクロな熱流動との間のマルチスケール機構を明らかにした。

研究成果の学術的意義や社会的意義

ソフトマターや生物流体の複雑な流動現象を扱う上で、記憶効果は最も重要で扱いが困難な概念の一つである。本研究で開発した計算手法は、この厄介な記憶効果を効率よく且つ物理的に正しく扱うことのできる汎用的な方法論を含んでおり、計算科学における基礎研究として重要な学術的意義を持つ。また、ソフトマターや生物流体は、新奇の機能性材料、環境活用型装置、マイクロロボットなど、次世代のイノベーション技術の開発においても注目されており、今回開発した計算技術が、これらの新しい技術開発を加速させることのできる基盤技術として活用されることが期待できる。

研究成果の概要(英文)：This study aimed to develop the mathematical models and computational methods to analyze the memory effects and the multi-scale mechanics in the complex flows of soft and biological matters. The specific research targets include the collective motions of chemotactic bacteria and the thermal flows of entangled polymeric liquids. In the former target, we developed a novel stochastic simulation method for chemotactic bacteria based on the Boltzmann-type kinetic transport equation and analyzed the traveling wave and aggregation in the pattern formation of chemotactic bacteria. In the latter target, the original multiscale simulation method, say the Synchronized Molecular-Dynamics method, was extended to the entangled polymeric liquids and the multi-scale mechanism between the microscopic dynamics of entanglements of polymer chains and the macroscopic thermal flow with strong viscous heating.

研究分野：計算科学，流体力学

キーワード：マルチスケール 運動論 走化性 高分子液体

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19、CK - 19 (共通)

### 1. 研究開始当初の背景

ソフトマターや生物流体においては、流体を構成する分子や流体中の微生物が過去の“記憶”を持つことによって生じる様々な複雑な現象がある。例えば、高分子液体の粘弾性乱流と呼ばれる複雑な流動やバクテリアのコロニー形成などの問題が挙げられる。高分子液体における記憶効果は、高分子鎖の構造変化の遅いダイナミクスに起因するものであり、高分子の内部構造の記憶効果と呼ぶことができる。一方、バクテリアのコロニー形成の問題では、個体(バクテリア)の環境適応に要する時間遅れが、個体が過去に経験した環境の記憶として残ることによって生じるものであり、環境適応の記憶効果と呼ぶことができる。これらの記憶効果はそれぞれ異なるメカニズムによるものであるが、どちらの場合も、本質的に非線形で非平衡なマルチスケールの問題であり、計算科学分野において取組むべき重要な研究課題である。

### 2. 研究の目的

複雑流体の記憶効果は、理論的な取扱いが非常に困難であり、現象を精度よく記述する理論は一般には構築されていない。このような問題に対して、計算機シミュレーションによるアプローチが重要となる。なかでも、流体を構成する多数の分子・粒子の運動を記述するミクロモデルと流体の熱や運動量輸送を記述するマクロモデルとを相互に接続するマルチスケールシミュレーションや流体を構成する分子・粒子の集団的な振舞いを速度分布関数を用いて記述するメゾスケールシミュレーション(運動論シミュレーション)は、複雑流体の記憶効果を扱う上で重要となる。

本研究では、生物流体とソフトマターの双方を対象とし、ソフトマターの流れでは、構造変化に伴う記憶効果を、生物流体では、個体の環境適応に伴う記憶効果をそれぞれ記述するモデルを構築し、各モデルに対してそれらを効率よく計算するシミュレーション技術を開発する。

### 3. 研究の方法

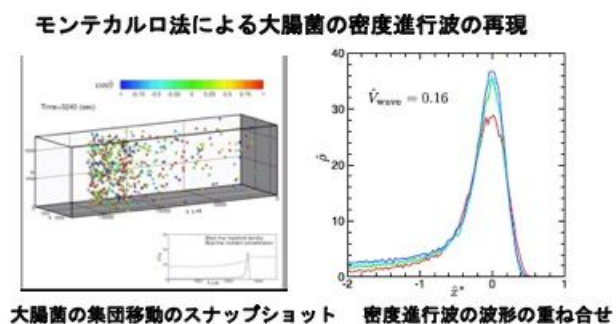
本研究課題は、計算科学、数理科学、物理学、生物学が関係する学際的なテーマであるため、各分野の国内外の専門研究者との学際的、国際的な連携・協力を通して研究を進める。具体的には、ソフトマターの専門家、マルチスケールシミュレーション法を共同開発した京都大学工学研究科の山本量一教授、生物数学の運動論研究において国際的先駆者であるパリ第6大学ジャック＝ルイ・リオンス研究所の Benoît PERTHAME 教授、気体分子運動論の世界的専門家である国立成功大学栄誉講座教授の青木一生教授ら、各分野の経験豊富な研究者から適宜指南を仰ぎながら研究を進める。特に、国際連携では、長期海外研究滞在を通して PERTHAME 教授らと密な国際共同研究を実施し、当該分野の強力な国際学術ネットワークを構築する。また、代表者が直接指導する大学院生数名を研究協力者に置き、効率良く研究を進める。

### 4. 研究成果

本研究における具体的な成果を以下に記述する。

#### (1) 走化性細菌集団のボルツマン型運動論モデルの新しい確率的数値解法の開発

走化性細菌(化学物質の濃度変化に応じて移動する細菌)の集団挙動を記述するボルツマン型運動論方程式に対する新しい確率的数値解法(モンテカルロ法)を独自に開発し、実験で観測されるマイクロチャンネル内の走化性細菌集団の密度パルス波の問題に適用した。シミュレーション結果は実験結果と良い一致を示し、また基礎方程式である走化性運動論モデルの理論解析の結果とも精度よく一致することを数値的に実証した。この研究の成果は、雑誌論文5で発表した。



## (2) 走化性運動論モデルの不安定性解析とパターン形成のダイナミクス

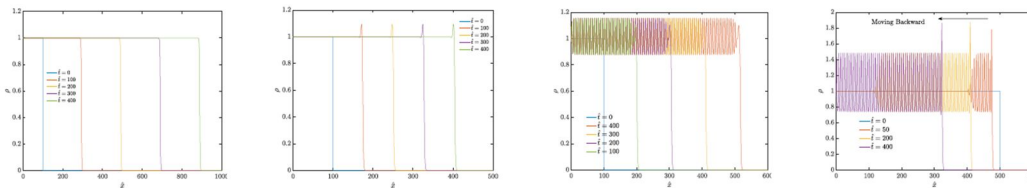
走化性運動論モデルの不安定性解析を行い、一様な密度状態が線形不安定化する物理的な条件を理論的に導出した。また、先に開発したモンテカルロ法を用いて、走化性バクテリア集団のパターン形成の様子を詳細に数値解析した。下の図は、一次元流路内における走化性細菌の構造形成のスナップショットである。この研究の成果は雑誌論文2で発表した。



1次元流路内でのパターン形成のスナップショット

## (3) 走化性バクテリアの増殖における多様な密度進行波の数値解析

走化性運動論モデルから連続体極限で導出される Flux-Limited Keller-Segel モデルを基に、理論と数値解析によって、走化性細菌の自己増殖における密度進行波に多様な形態があることを明らかにした。下の図は、FLKS モデルにおける多様な1次元密度進行波の数値計算結果。この研究の成果は雑誌論文3で発表した。



(a) 単調な波

(b) 単峰型の波

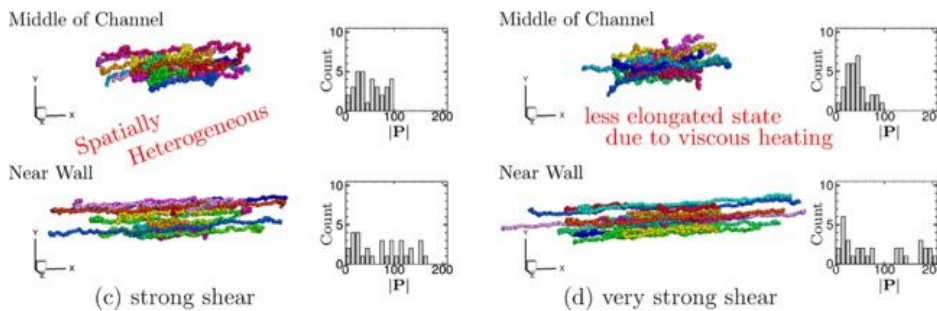
(c) 振動を伴う波

(d) 逆行する波

## (4) マルチスケール法による絡み合いあった高分子液体の熱潤滑挙動の解析

独自に開発した多数の分子動力学セルを流体方程式によって相互に同期させながら計算を進める Synchronized Molecular-Dynamics 法を用いて、絡み合い高分子液体の熱潤滑問題を解析した。流動と発熱の結合によって生じる流路間の不均一な熱流動分布と高分子液体のミクロな絡み合い運動との間の複雑な関係性を明らかにした。特に新奇な現象として、高速な潤滑下では、高分子の絡み合い運動が、せん断流れによる影響と粘性散逸による発熱の影響との競合によって新しい転移的挙動が起こることを明らかにした。下の図は、高速な潤滑下にある高分子液体の流路壁近傍と流路中央部でのミクロな絡み合い構造のスナップショットである。絡み合いの状態が空間的にかなり不均一であることが分かる。この研究の成果は雑誌論文1で発表した。

### (II) Strong viscous-heating regime



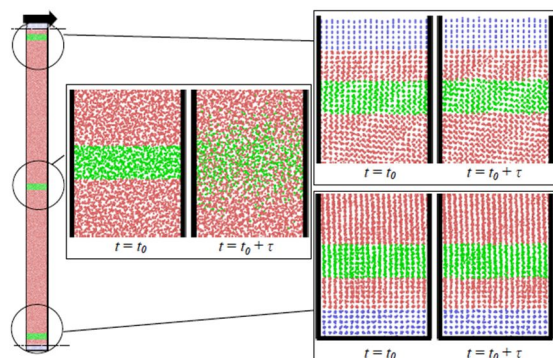
(c) strong shear

(d) very strong shear

## (5) 分子動力学法による高速熱流体潤滑における壁面近傍での相変化挙動の解析

レナード=ジョーンズ(LJ)流体の高速熱流体潤滑を分子動力学法によって解析した。高速な潤滑下では、強い粘性発熱によって、LJ流体が流路中央部で膨張することによって、逆に壁面近傍でLJ流体が壁側に閉じ込められ、壁面近傍で固体化が起こることを明らかにした。右の図は、高速潤滑下にあるLJ流体の壁面近傍と流路中央部での分子拡散の様子である。

この粘性発熱によって誘起される壁面近傍での固体化現象は、雑誌論文4で発表した。



## 5. 主な発表論文等

### [雑誌論文](計9件)

1. Shugo YASUDA, "Pattern formation and instability in a kinetic chemotaxis model", RIMS Kôkyûroku (in press).
2. Kouki NAKAMURA, Ryo OOKAWA, and Shugo YASUDA, "Solidification of the Lennard-Jones fluid near the wall in thermohydrodynamic lubrication", arXiv:1902.03744. <https://arxiv.org/abs/1902.03744>
3. Shugo YASUDA, "Synchronized molecular-dynamics simulation of the thermal lubrication of an entangled polymeric liquid", Polymers **11**, 131 (2019). <http://dx.doi.org/10.3390/polym11010131>
4. Benoît PERTHAME and Shugo YASUDA, "Stiff-response-induced instability for chemotactic bacteria and flux-limited Keller-Segel equation", Nonlinearity **31**, pp. 4065-4089 (2018). <http://dx.doi.org/10.1088/1361-6544/aac760>
5. Vincent CALVEZ, Benoît PERTHAME, and Shugo YASUDA, "Traveling wave and aggregation in a flux-limited Keller-Segel equation", Kinetic and related models **11**, pp. 891-909 (2018). <http://dx.doi.org/10.3934/krm.2018035>
6. Shugo YASUDA and Ryo OOKAWA, "Solidification of a simple liquid near wall in high-speed shear flows", Journal of physics: conference series **1136**, 012027 (2018). <http://dx.doi.org/10.1088/1742-6596/1136/1/012027>
7. Shugo YASUDA, "Monte Carlo simulation for kinetic chemotaxis model: An application to the traveling population wave", Journal of computational physics **330**, pp. 1022-1042 (2017). <http://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2016.10.066>
8. Shugo YASUDA, "Numerical analysis on the traveling pulse in a kinetic chemotaxis model", RIMS Kôkyûroku **2038**, pp. 130-139 (2017). <http://www.kurims.kyoto-u.ac.jp/~kyodo/kokyuroku/contents/pdf/2038-10.pdf>
9. 安田修悟, 山本量一, "Synchronized Molecular-Dynamics 法による高分子液体の熱潤滑解析", 日本流体力学会誌 **ながれ 35**, pp. 291-296 (2016). [http://www.nagare.or.jp/download/noauth.html?d=35-4\\_tokushu3.pdf&dir=77](http://www.nagare.or.jp/download/noauth.html?d=35-4_tokushu3.pdf&dir=77)

### [学会発表](計 31 件)

1. Shugo YASUDA, "Numerical analysis of the pattern formation of run-and-tumble bacteria based on a kinetic chemotaxis model", The 9th International Congress on Industrial and Applied Mathematic, July 2019 (Valencia, Spain). [Invited by session organizer]
2. Shugo YASUDA, "Kinetic transport simulation of chemotactic bacteria", International HPC Summer School 2019, July 2019 (Kobe, Japan). [Invited]
3. 仲村鴻輝, 安田修悟, "高速熱流体潤滑下における壁面近傍でのレナード=ジョーンズ流体の相変化挙動", 第32回数値流体力学シンポジウム, 2018年12月(東京).
4. 平野翔也, 安田修悟, "バクテリアコロニー形成における進行波の高次精度差分解析", 第32回数値流体力学シンポジウム, 2018年12月(東京).
5. Shugo YASUDA, "Numerical simulation of pattern formation in a kinetic chemotaxis model", Math-bio working group, Laboratoire Jacques-Louis Lions, Sorbonne Université, October 2018 (Paris, France).
6. 安田修悟, "複雑流体の熱流動に対するマルチスケールシミュレーション", 近畿化学協会 公開講演会 第103回例会, 2018年10月(大阪). [招待講演]
7. 安田修悟, "自己組織化する微生物集団のメソスコピックシミュレーション ~マイクロとマクロの中間的視点からパターン形成のメカニズムに挑む~", 兵庫県立大学知の交流シンポジウム, 2018年9月(姫路).
8. 仲村鴻輝, 安田修悟, "高速熱流体潤滑における壁面近傍でのレナード=ジョーンズ流体の相変化挙動", 2018年度日本機械学会年次大会, 2018年9月(大阪).
9. 安田修悟, "運動論モデルに基づく走化性バクテリアの自己組織化現象", 日本流体力学会年会 2018, 2018年9月(大阪).
10. 安田修悟, "Pattern formation and instability in a kinetic chemotaxis model", 第15回 生物数学の理論とその応用 -次世代の数理科学への展開-, 2018年9月(京都). [招待講演]
11. Shugo YASUDA, "Traveling wave and aggregation in a flux-limited Keller-Segel model", The 12th AIMS Conference on Dynamical Systems, Differential Equations and Applications, July 2018 (Taipei, Taiwan). [Invited by session organizer]

12. 安田修悟, “走化性運動論モデルの不安定性とパターン形成”, 非線形現象の数値シミュレーションと解析 2018, 2018年3月(札幌). [招待講演]
13. 安田修悟, “走化性運動論モデルの不安定性とパターン形成”, 第7回 兵庫県立大学計算科学連携セミナー ～非平衡現象のダイナミクス～, 2018年3月(神戸).
14. Shugo YASUDA, “Self-organized pattern formation in a kinetic transport equation for chemotactic bacteria”, SIAM Conference on Analysis of Partial Differential Equations, December 2017 (Baltimore, Maryland). [Invited by session organizer]
15. Shugo YASUDA, “Self-organized pattern formation in run-and-tumble chemotactic bacteria with stiff response”, Theoretical Biology Seminar, Dept. Mathematics Penn State University, December 2017 (State College, Pennsylvania).
16. 安田修悟, “Self-organized pattern formation of run-and-tumble chemotactic bacteria”, 日本航空宇宙学会関西支部分科会「運動論方程式、流体力学とその周辺」, 2017年12月(京都). [招待講演]
17. Shugo YASUDA, “Stiff-response-induced instability of chemotactic bacteria”, Recent advances in kinetic equations and applications, November 2017 (Paris, France). [Invited]
18. Shugo YASUDA, “Synchronized molecular-dynamics simulation via global heat and momentum transport”, Seminar at Steinbuch Center for Computing, Karlsruher Institut für Technologie, November 2017 (Karlsruher, Germany).
19. Shugo YASUDA, “Self-organized pattern formation of run-and-tumble chemotactic bacteria: Instability analysis and Monte Carlo simulation”, Seminar at MathCCES Dept. Mathematics, RWTH Aachen University, July 2017 (Aachen, Germany).
20. Shugo YASUDA, “Monte Carlo simulation for pattern formation of run-and-tumble bacteria”, Conference of Computational Physics, July 2017 (Paris, France).
21. Shugo YASUDA and Ryo OOKAWA, “Solidification of a simple liquid near wall in high-speed lubrication flows”, Conference of Computational Physics, July 2017 (Paris, France).
22. Shugo YASUDA, “Self-organized pattern formation of run-and-tumble chemotactic bacteria: Instability analysis and Monte Carlo simulation”, Dept. Mathematics TU Kaiserslautern, June 2017 (Kaiserslautern, Germany).
23. Shugo YASUDA, “Monte Carlo method for kinetic chemotaxis model and its applications on traveling pulse and pattern formation”, Stochastic Dynamics Out of Equilibrium, Institut Henri Poincaré, April 2017 (Paris, France). [Invited]
24. Shugo YASUDA, “Linear instability and pattern formation in a kinetic chemotaxis equation”, Séminaire du Laboratoire Jacques-Louis Lions, UPMC, March 2017 (Paris, France).
25. Shugo YASUDA, “Turing instability of kinetic chemotaxis equation”, Journée de Biologie Mathématique, Université Paris-sud Paris-Sclay, January 2017 (Orsay, France).
26. Shugo YASUDA, “Synchronized Molecular-Dynamics simulation via global heat and momentum transports”, SIAM Conference on Mathematical Aspects of Materials Science, May 2016 (Philadelphia, Pennsylvania). [Invited by session organizer]
27. Shugo YASUDA, “Numerical analysis of the traveling wave on the kinetic chemotaxis model”, RIMS Workshop on Mathematical Analysis in Fluid and Gas Dynamics, July 2016 (Kyoto). [Invited]
28. Shugo YASUDA, “Monte Carlo simulation for kinetic chemotaxis model of bacteria”, 8th Summer School Methods & Models of Kinetic Theory Hotel Don Pedro, June 2016 (Porto Ercole, Italy). [Invited]
29. Shugo YASUDA, “Monte Carlo simulation for kinetic chemotaxis model of bacteria”, Workshop on Kinetic Theory and Fluid Dynamics: From micro to macroscopic modeling, May 2016 (Kyoto). [Invited]
30. 大川凌, 安田修悟, “高速熱流体潤滑における壁面近傍でのレナード・ジョーンズ流体の固体化”, 第30回分子シミュレーション討論会, 2016年11月(大阪).
31. 大川凌, 安田修悟, “分子動力学の熱流体潤滑への応用についての検討”, 関西潤滑懇談会, 2016年7月(神戸).

[図書](計 0件)

[産業財産権]

出願状況(計 0件)

取得状況(計 0件)

〔その他〕  
ホームページ等

## 6. 研究組織

(1) 研究分担者  
該当無し

(2) 研究協力者  
研究協力者氏名：大川凌，仲村鴻輝，平野翔也  
ローマ字氏名：Ryo Ookawa, Kouki Nakamura, Shouya Hirano

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。