

科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 6 年 6 月 21 日現在

機関番号：14301

研究種目：基盤研究(A) (一般)

研究期間：2020～2023

課題番号：20H00129

研究課題名(和文)メソフルイド分散系の非平衡直接数値シミュレーション

研究課題名(英文)Direct numerical simulations of meso fluids at non-equilibrium conditions

研究代表者

山本 量一 (Ryoichi, Yamamoto)

京都大学・工学研究科・教授

研究者番号：10263401

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 34,100,000円

研究成果の概要(和文)：シミュレーションによる実用的なソフトマターの材料・プロセス設計を想定し、3つの研究項目：1) ナノ微粒子分散系のダイナミクス、2) コロイドガラス系のダイナミクス、3) アクティブ粒子系のダイナミクス、について、マルチスケール・マルチフィジックスシミュレーションを適用し、成果を得た。特に、細胞の集団運動に対する細胞周期の役割や、粘弾性流体中でのマイクロスイマーの回転および泳動形態による泳動速度が変化するメカニズム、水溶液中を自己推進する触媒型マイクロモーターの推進機構の理解に関して、大きな成果を得ることに成功した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

分子動力学法や計算流体力学法など、既存のシミュレーション法ではソフトマターの膨大な自由度のごく一部しか同時に扱うことが出来ず、異なるスケールの運動を同時にまるごとシミュレーションすることは不可能であった。我々は、この問題を解決するために粗視化モデリングとマルチスケール・マルチフィジックスモデリングの2つのアプローチを用いてこの分野の研究を牽引している。これまでは純粋に科学的・学術的な興味为主体であり、材料やプロセスを設計するためのツールとして使える段階に至っていなかったが、本研究の成果はその克服につながるものである。

研究成果の概要(英文)：The research is aimed at designing practical soft matter materials and processes by simulation of three research topics: 1) Dynamics of nanoparticle dispersion systems, 2) Dynamics of colloidal glass systems, 3) Dynamics of active particle systems. Multiscale and multiphysics simulations were applied to the three research topics: 1) dynamics of nanoparticle dispersion systems, 2) dynamics of colloidal glass systems, and 3) dynamics of active particle systems. In particular, significant results were achieved in understanding the role of the cell cycle on the collective motion of cells, the mechanism of rotation of microswimmers in viscoelastic fluids and the change in swimming speed due to the swimming morphology, and the propulsion mechanism of catalytic micromotors that self-propel in aqueous solutions.

研究分野：ソフトマターの計算科学

キーワード：ソフトマター シミュレーション 流体力学 直接数値計算 コロイド分散系 微粒子分散系 マイクロスイマー アクティブマター

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、研究者個人に帰属します。

1. 研究開始当初の背景

ソフトマター科学は比較的新しい分野であるが、その背景にはしっかりとした歴史がある。統計力学に立脚した液体論がソフトマター科学の先駆けであり、理想化された単純液体について大きな成果をもたらした。久保の線形応答理論や森公式、川崎のモード結合理論などこの分野で日本人の貢献は大きい。液晶や高分子など複雑な系の理論的取扱いについてはフランスの de Gennes が成功し、1991年にノーベル物理学賞を受賞した。ソフトマターという言葉はその受賞記念講演で用いられたことにより一般的に知られるようになった。日本人研究者の貢献も大きく、特に理論・モデリング関連では、長年に渡って世界のソフトマター科学を牽引して来た。シミュレーション技術から見たソフトマターの特殊性は、そのほとんどがマルチスケール・マルチフィジックスの連成系となっていることにある。例えば、高分子系では巨大分子間からみあいが発生するために、系のダイナミクスは分子スケール (ns) から流体スケール (1000s) まで著しく広く分布する。コロイドも同様で、周囲の流体やイオン雰囲気による長距離相互作用のために、非常に遅いダイナミクスが系の性質を決定する。このような広い時空間スケールを通常の分子シミュレーションや流体シミュレーションで扱うことは出来ないため、ソフトマター分野では、他の分野に先駆けて粗視化モデリングが発展した。しかしこれまでの粗視化モデリングでは、系の普遍的な挙動にのみ重点が置かれるあまり、物質の個性は非常に大雑把なパラメーターに押し込められており、物質のミクロな情報からそのパラメーターを決める処方箋がなかった。よって、これまでは純粋に科学的・学術的な興味为主体であり、材料やプロセスを設計するためのツールとして使える段階に至っていない。十分なポテンシャルがありながら、科学と工学の間の死の谷によってブレークスルーが阻害されている典型例であり、その克服を我々は目指している。

2. 研究の目的

分子動力学法や計算流体力学法など、既存のシミュレーション法単体ではソフトマターの膨大な自由度のごく一部しか同時に扱うことが出来ず、異なるスケールの運動を同時にまるごとシミュレーションすることは不可能であった。我々は、この問題を解決するために粗視化モデリングとマルチスケール・マルチフィジックスモデリングの2つのアプローチを発展させる。前者は基本的にメソスケールのシミュレーターで構成されており、密度汎関数法や液体論(及びそれらの改良版)などの統計力学的手法を用いてミクロな階層の効果をメソスケールの階層の中に反映する。異なる階層の別々のシミュレーションをつなぐという技術的な困難が存在しない大きな利点があるが、適用範囲は粗視化モデリングが有効な問題に限定される。後者ではミクロ階層でシミュレーションを実行し、その結果をメソ階層のシミュレーションに反映させる。新しく強力な方法であるが、実用化へのハードルが高い。我々はこの2つのアプローチの両方で実績があり、それらを相補的に用いることで、世界的な競争の中で我々独自の強みを発揮する。

3. 研究の方法

シミュレーションによる実用的なソフトマター材料・プロセス設計を想定し、本研究期間中に我々自身が実施可能な例として以下の具体的研究項目をあげる。いずれにおいてもソフトマター材料自身、あるいはソフトマター材料と外部との連携で、マルチスケール・マルチフィジックスの連成系となる難しい問題を含んであり、有効なシミュレーションを行うためにはその系のミクロな自由度～メソスケールの自由度～マクロな自由度間の関係を正しく理解し、定式化することが必要である。

- 研究項目1. ナノ微粒子分散系のダイナミクス
- 研究項目2. コロイドガラス系のダイナミクス
- 研究項目3. アクティブ粒子系のダイナミクス

4. 研究成果

申請段階で想定した3つの研究項目(上記)について、各年度にそれぞれ以下の成果を得ることに成功した。

2020年度: 二成分流体にコロイド粒子が分散した系では、溶媒の各成分や相分離界面と分散粒子との親和性の変化によって様々な分散状態が実現する。その中の1つである Pickering エマルションは、流体-流体界面に固体微粒子が吸着されることによって安定化されたエマルションである。溶媒中の微粒子が界面活性剤のような働きをするこの現象は100年以上前から報告されているが、近年、さまざまな固体粒子を用いることが出来る、低い毒性で高い安定性、導電性・高反応性・多孔性などの特性を付与出来る、などの理由で注目されており、ドラッグ

デリバリーシステム、食品、触媒などさまざまな用途へ向けての研究が進んでいるため、Pickering エマルションのメカニズムを解明することは工学的、医学的応用上非常に重要である。したがって本研究では、直接数値シミュレーションによってこの現象を再現するために粒子を添加した二成分流体のシミュレーションを行った (図 1)。

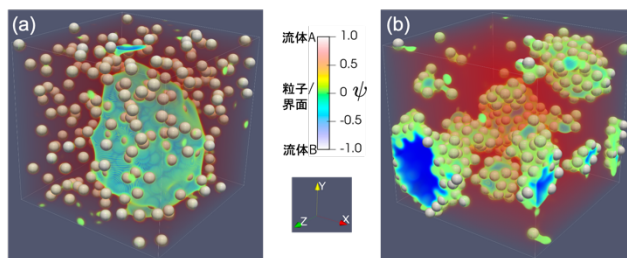


図 1. $N = 400$ における $z = 0$ (a)/ $z = -1$ (b) コロイド分散系のスナップショット

2021 年度:細胞の集団運動に対する細胞周期の役割 (図 2): 生物学の分野では、外力や相互作用力は細胞という小さな化学物質のネットワークへの入力だと考えられており、物理学の場合のように、その発生源を明らかにすべきものであるとは認識されていない。本研究では、物理学と生物学のハイブリッドモデルを用いて多細胞システムの成長ダイナミクスを予測することに成功した。個々の細胞には「細胞周期」と呼ばれる、細胞の成長と分裂を制御するための生化学的ネットワーク (図 2(a)) が組み込まれており、環境 (周囲からその細胞に作用する力) に応じて (図 2(b)) その細胞周期が影響を受けるというハイブリッドモデルを用いて、細胞コロニーの成長則を予測した (図 2(c))。今回の研究では、コロニーの端の近くで成長が最も速くなる事実に対する物理学的な理解に加えて、端から遠く離れたコロニー内部の細胞の集団が、通常の流体とはまったく異なる挙動を示すメカニズムも説明されている。同様の効果は実験でも観察されていたが、そのメカニズムについて本研究ではじめて明らかになった。

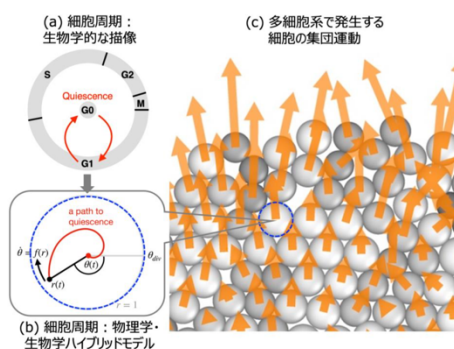


図 2. 個々の細胞に成長と分裂を制御するために組み込まれている細胞周期 (a), (b) と、コロニーの成長などの多細胞系で発生する統率された集団運動 (c) の概念図。

2022 年度: 近年、バクテリアなどの微生物の運動に関する研究が様々な分野で活発に行われ、最も単純な純粘性流体である Newton 流体中を泳動する微生物に対する理解は進んできた。しかし、微生物は、非 Newton 性を示す生体内の複雑流体中を泳動することが多く、このような流体中での挙動は Newton 流体中とは異なることが知られている。例えば、大腸菌は Newton 流体中では直進せず、曲がりくねった軌跡を描くのに対し、複雑流体中では容易に直進し速く泳動することや、精子は複雑流体中でのみ集団運動を行うというような予想外の結果などが報告されている。このような Newton 流体中と複雑流体中で微生物の泳動が異なる原因は未解明である。そこで、直接数値計算を用いて、代表的な複雑流体である粘弾性流体中でのマイクロスイマーの回転および泳動形態による泳動速度が変化するメカニズムを調べた。

回転による泳動速度の上昇 (図 3): 大腸菌のように、胴体と鞭毛が逆向きに回転する微生物を、回転双極子をもつ球形のマイクロスイマーで表現した。このようなマイクロスイマーは Newton 流体中では回転双極子の有無に関わらず一定の泳動速度で泳ぐ。それに対して、粘弾性流体中では泳動速度が上昇することが報告されている。粘弾性流体中では、流体の弾性とマイクロスイマーの回転双極子によって生じる旋回流が結びつき、泳動速度の上昇を引き起こしていることを明らかにした。回転双極子が作り出す推進軸周りの旋回流により、粘弾性流体中では、マイクロスイマーの上半球に沿って法線応力差がリング状に生じ、推進軸に付加的な力が働くことを見出した (図 3(a))。Weissenberg 効果 (図 3(b)) としてよく知られたこの現象により、流体がマイクロスイマーの上半球 (下半球) に沿って押し上げ (下げ) られ、上半球 (下半球) ではマイクロスイマーが推進軸に沿って減速 (加速) される。マイクロスイマーの泳動により、周辺の世界速度場が上下非対称であるた

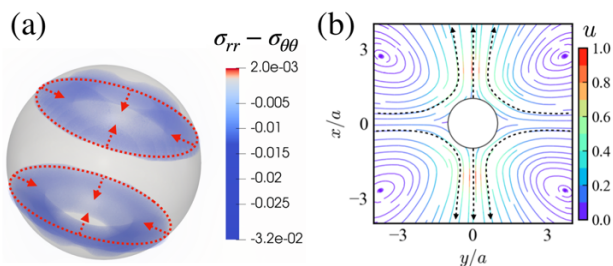


図 3. (a) マイクロスイマーの回転運動により生じた法線応力差および中心向きにかかる力. (b) 流体がマイクロスイマーに沿って押し上げ (下げ) られる Weissenberg 効果.

め、上下半球に働く Weissenberg 効果が上下非対称に生じ、下半球に加速する方向にかかる力が支配的になる。その結果、粘弾性流体中での回転双極子を持つマイクロスイマーの泳動速度が上昇する。

2023 年度：熱エネルギーを介さずに化学エネルギーを運動エネルギーに変換し、流体中を自己推進する粒子をマイクロモーターと呼ぶ。近年、化学技術の発展によりマイクロモーターを人工系で作製しようという研究が精力的に行われている。本研究では、球状粒子表面の半分が Pt 触媒で修飾されたヤヌスシリカ粒子(SiO₂-Pt)が過酸化水素水溶液中を自己推進する触媒型マイクロモーターに焦点を当てた(図4)。自己拡散泳動による推進機構を用い、粒子、流体、過酸化水素濃度の3つの自由度を同時にシミュレーションする直接数値計算モデルの構築とその妥当性の検討を行った。

直接数値計算モデルの詳細：本研究では、過酸化水素濃度を $\psi(\mathbf{r})$ で表し、触媒型マイクロモーターの直接数値計算を行った。流体界面関数 ψ の時間発展は、触媒による過酸化水素の加水分解を考慮した Cahn-Hilliard 方程式によって記述される(図5)。

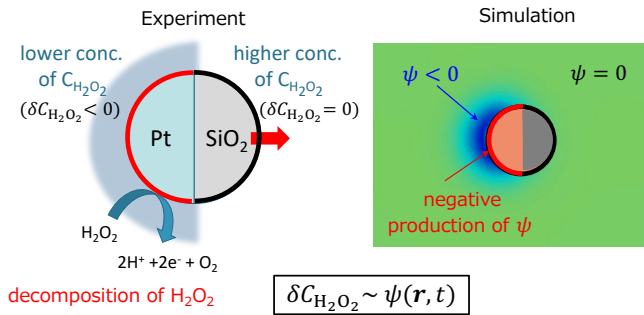


図4. 過酸化水素中における SiO₂-Pt 粒子の自己推進機構の概略図(左)と、直接数値計算モデルの模式図(右)。モデルの $\psi(\mathbf{r})$ は実験系の過酸化水素濃度に相当し、赤く示された左側の Pt 触媒上で加水分解により消費される。

$$\psi(\mathbf{r}, t) \quad \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{J} - k \left[|\nabla \psi|^2 - \frac{\int d\mathbf{r} |\nabla \psi|^2}{V} \right]$$

rate of catalytic reaction ↑ conservation of ψ

$$\mathbf{J} = \psi \mathbf{u} - D \nabla \mu_\psi$$

diffusion constant of ψ

$$\mu_\psi = \frac{\delta F}{\delta \psi} \quad F = \int d\mathbf{r} \left[f(\psi) + \frac{\alpha}{2} (\nabla \psi)^2 + d(\psi - \bar{\psi})^2 \phi \right]$$

color of ψ inside particle

$$f(\psi) = \frac{a}{4} \psi^4 + \frac{b}{2} \psi^2 \quad \bar{\psi} = \frac{a\psi_0^3 - (b - 2d)\psi_0}{2d}$$

図5. 直接数値計算モデルの詳細。過酸化水素濃度 $\psi(\mathbf{r})$ の時間発展を、一番上の移流拡散方程式で解く。 \mathbf{J} は物質流束、 \mathbf{u} は流速、 ϕ は粒子の内部(1)と外部(0)を連続的につなぐプロファイル関数、 k は加水分解の反応速度定数、 μ_ψ は化学ポテンシャル、 D は拡散係数、 F は系の自由エネルギー、 $\bar{\psi}$ は粒子内部を $\psi \approx \psi_0$ に固定し、粒子と加算加水濃度との親和性を調整するためのパラメータである。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計15件（うち査読付論文 15件 / うち国際共著 9件 / うちオープンアクセス 6件）

1. 著者名 Feng Chao, Molina John J., Turner Matthew S., Yamamoto Ryoichi	4. 巻 4
2. 論文標題 Dynamics of microswimmers near a soft penetrable interface	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review Research	6. 最初と最後の頁 43202
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevResearch.4.043202	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する
1. 著者名 Li Jintao, Schnyder Simon K., Turner Matthew S., Yamamoto Ryoichi	4. 巻 4
2. 論文標題 Competition between cell types under cell cycle regulation with apoptosis	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review Research	6. 最初と最後の頁 33156
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevResearch.4.033156	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する
1. 著者名 Tarama Mitsusuke, Mori Kenji, Yamamoto Ryoichi	4. 巻 10
2. 論文標題 Mechanochemical subcellular-element model of crawling cells	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Frontiers in Cell and Developmental Biology	6. 最初と最後の頁 1-17
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3389/fcell.2022.1046053	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Uzair Muhammad, Qasim M. Danyal, Bhatti M. Aashan, Zaidi Ali Abbas, Molina John J., Yamamoto Ryoichi, Hamid Adnan	4. 巻 418
2. 論文標題 Direct numerical simulations of isolated rigid particles; Validation of smooth profile method	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Powder Technology	6. 最初と最後の頁 118280 ~ 118280
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.powtec.2023.118280	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Imamura Shun, Sawaki Kohei, Molina John J., Turner Matthew S., Yamamoto Ryoichi	4. 巻 6
2. 論文標題 Collective Motion of Quincke Rollers with Fully Resolved Hydrodynamics	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Advanced Theory and Simulations	6. 最初と最後の頁 2200683
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/adts.202200683	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Li Jintao, Schnyder Simon K., Turner Matthew S., Yamamoto Ryoichi	4. 巻 11
2. 論文標題 Role of the Cell Cycle in Collective Cell Dynamics	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review X	6. 最初と最後の頁 31025
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevX.11.031025	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Kanayama Kohsei, Hoshino Taiki, Yamamoto Ryoichi	4. 巻 4
2. 論文標題 Relation between dynamic heterogeneities observed in scattering experiments and four-body correlations	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review Research	6. 最初と最後の頁 L022006
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevResearch.4.L022006	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 山本 量一	4. 巻 65
2. 論文標題 コロイド分散系の直接数値計算	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 粉碎	6. 最初と最後の頁 11~17
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.24611/micromeritics.2022006	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Fadda Federico, Molina John Jairo, Yamamoto Ryoichi	4. 巻 101
2. 論文標題 Dynamics of a chiral swimmer sedimenting on a flat plate	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review E	6. 最初と最後の頁 052608-1 ~ 11
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevE.101.052608	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Yamamoto Ryoichi, Molina John J., Nakayama Yasuya	4. 巻 17
2. 論文標題 Smoothed profile method for direct numerical simulations of hydrodynamically interacting particles	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Soft Matter	6. 最初と最後の頁 4226 ~ 4253
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D0SM02210A	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Imamura Shun, Sawaki Kohei, Molina John J., Turner Matthew S., Yamamoto Ryoichi	4. 巻 6
2. 論文標題 Collective Motion of Quincke Rollers with Fully Resolved Hydrodynamics	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Advanced Theory and Simulations	6. 最初と最後の頁 2200683
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/adts.202200683	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Feng Chao, Molina John J., Turner Matthew S., Yamamoto Ryoichi	4. 巻 35
2. 論文標題 Dynamics of microswimmers near a liquid-liquid interface with viscosity difference	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Physics of Fluids	6. 最初と最後の頁 51903
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0148008	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Feng Chao, Molina John J., Yamamoto Ryoichi	4. 巻 92
2. 論文標題 Dynamics of a Model Microswimmer in the Vicinity of a Liquid Droplet	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 74802
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.92.074802	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Sankaewtong Krongtum, Molina John J., Turner Matthew S., Yamamoto Ryoichi	4. 巻 107
2. 論文標題 Learning to swim efficiently in a nonuniform flow field	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Physical Review E	6. 最初と最後の頁 65102
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevE.107.065102	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Kobayashi Takuya, Jung Gerhard, Matsuoka Yuki, Nakayama Yasuya, Molina John J., Yamamoto Ryoichi	4. 巻 19
2. 論文標題 Direct numerical simulations of a microswimmer in a viscoelastic fluid	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Soft Matter	6. 最初と最後の頁 7109 ~ 7121
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D3SM00600J	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

〔学会発表〕 計48件 (うち招待講演 12件 / うち国際学会 30件)

1. 発表者名 Ryoichi Yamamoto
2. 発表標題 Simulations of hydrodynamically interacting particles
3. 学会等名 JNCASR - CECAM Conference - MD@60 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 Ryoichi Yamamoto
2. 発表標題 Dynamics of microswimmers in complex media: influence of interface or viscoelasticity
3. 学会等名 StatPhysHK 2023: A Satellite Meeting of The XXVIII IUPAP International Conference on Statistical Physics (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Ryoichi Yamamoto
2. 発表標題 Direct Numerical Simulations (DNS)of active particles in complex environments
3. 学会等名 New statistical physics in living matter: non equilibrium states under adaptive control, Workshop at the Isaac Newton Institute for Mathematical Sciences (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Ryoichi Yamamoto
2. 発表標題 Direct Numerical Simulations (DNS)of active particles in complex environments
3. 学会等名 New statistical physics in living matter: non equilibrium states under adaptive control, Workshop at the Isaac Newton Institute for Mathematical Sciences (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Ryoichi Yamamoto
2. 発表標題 Dynamics of microswimmers in complex media: influence of interface or viscoelasticity
3. 学会等名 StatPhysHK 2023: A Satellite Meeting of The XXVIII IUPAP International Conference on Statistical Physics (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Ryoichi Yamamoto
2. 発表標題 Direct numerical simulations of active particles with fully resolved hydrodynamics
3. 学会等名 Advanced core-to-core network for the physics of self-organizing active matter, workshop in Wenzhou (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 Ryoichi Yamamoto
2. 発表標題 Simulations of hydrodynamically interacting particles
3. 学会等名 JNCASR - CECAM Conference - MD@60 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 Ryoichi Yamamoto
2. 発表標題 Direct numerical simulations (DNS) of active particles with fully resolved hydrodynamics
3. 学会等名 28th International Conference on Statistical Physics, Statphys28 (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Kenta Ogawa
2. 発表標題 Direct numerical simulations (DNS) of active particles with fully resolved hydrodynamics
3. 学会等名 28th International Conference on Statistical Physics, Statphys28 (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 山本量一
2. 発表標題 KAPSELによる粒子分散系の直接数値シミュレーション
3. 学会等名 OCTA20周年記念講演会（招待講演）
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Chao Feng
2. 発表標題 Dynamics of micro-swimmers near deformable and penetrable interfaces
3. 学会等名 APPC15: The 15th Asia Pacific Physics Conference (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Takuya Kobayashi
2. 発表標題 Microswimmers in viscoelastic fluids
3. 学会等名 APPC15: The 15th Asia Pacific Physics Conference (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Krongtum Sankaewtong
2. 発表標題 Learning to swim efficiently in a nonuniform flow field
3. 学会等名 The International Soft Matter Conference (ISMC 2022) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Ryoichi Yamamoto
2. 発表標題 DNS of active particles with fully resolved hydrodynamics
3. 学会等名 The International Soft Matter Conference (ISMC 2022) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Ryoichi Yamamoto
2. 発表標題 Direct numerical simulations of active particles with fully resolved hydrodynamics
3. 学会等名 25th Anniversary Symposium of German-japanese Joint Research Project on Nonequilibrium Statistical Physics Perspective for Future Collaboration (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Ryoichi Yamamoto
2. 発表標題 Direct numerical simulations of active particles with fully resolved hydrodynamics
3. 学会等名 KPS 70th Anniversary and 2022 Fall Meeting (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Ryoichi Yamamoto
2. 発表標題 Direct Numerical Simulations (DNS)of active particleswith fully resolved hydrodynamics
3. 学会等名 The 31st International Toki Conference on Plasma and Fusion Research (ITC31)Expanding academic world emerging from fusion science (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Ryoichi Yamamoto
2. 発表標題 Direct Numerical Simulations (DNS)of active particles with fully resolved hydrodynamics
3. 学会等名 Active Matter in Complex Environments (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Takuya Kobayashi
2. 発表標題 Direct numerical simulations of microswimmers in viscoelastic fluids
3. 学会等名 The 16th International Workshop for East Asian Young Rheologist (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 John J. Molina
2. 発表標題 Direct Numerical Simulation of Metallodielectric Janus Particles
3. 学会等名 APS March Meeting 2023 (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 小林巧弥
2. 発表標題 粘弾性流体中を泳動するマイクロスイマー：回転運動による速度上昇
3. 学会等名 日本物理学会 2022年秋季大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 山本量一
2. 発表標題 コロイド分散系の直接数値計算
3. 学会等名 ホソカワ粉体工学シンポジウム
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 小林巧弥
2. 発表標題 直接数値計算による粘弾性流体中を泳動するマイクロスイマーのダイナミクス
3. 学会等名 第70回レオロジー討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 小林巧弥
2. 発表標題 粘弾性流体中を泳動するモデル微生物の直接数値計算
3. 学会等名 第10回ソフトマター研究会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 山本量一
2. 発表標題 粒子分散系の直接数値シミュレーター-KAPSELの紹介
3. 学会等名 先端化学・材料技術部会 CC分科会 高分子WG勉強会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Chao Feng
2. 発表標題 Direct numerical simulations of a model microswimmer near a liquid-liquid interface
3. 学会等名 Active Matter Workshop 2023
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 山本量一
2. 発表標題 直接数値計算による自己推進粒子のダイナミクス
3. 学会等名 生物とソフトマターに関する理論とシミュレーションについての研究会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Simon K. Schnyder
2. 発表標題 Rational policy design for epidemics
3. 学会等名 27th International Conference on Computing in Economics and Finance (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Ryoichi Yamamoto
2. 発表標題 DNS of self-propelled particles
3. 学会等名 RIMS Workshop Mathematical Mechanobiology (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Ryoichi Yamamoto
2. 発表標題 Direct numerical simulation of Quincke rollers
3. 学会等名 11th Liquid Matter Conference (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Simon K. Schnyder
2. 発表標題 Cell migration and colony growth in a monolayer of model cells
3. 学会等名 11th Liquid Matter Conference (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Jintao Li
2. 発表標題 The role of the cell cycle in collective cell dynamics
3. 学会等名 Physics meets Biology 2021 (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Simon K. Schnyder
2. 発表標題 Rational policy design for epidemics
3. 学会等名 24.5th Workshop on Economics with Heterogeneous Interacting Agents 2021 (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Jintao Li
2. 発表標題 Competition between two cell types under cell cycle regulation with apoptosis
3. 学会等名 American Physical Society (APS) March Meeting 2022 (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Shun Imamura
2. 発表標題 Collective Dynamics of Quincke Rollers with Fully Resolved Hydrodynamics
3. 学会等名 American Physical Society (APS) March Meeting 2022 (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Simon K. Schnyder
2. 発表標題 Rational policy design for epidemics
3. 学会等名 American Physical Society (APS) March Meeting 2022 (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 John J. Molina
2. 発表標題 Nash Neural Networks
3. 学会等名 American Physical Society (APS) March Meeting 2022 (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Simon K. Schnyder
2. 発表標題 Role of the Cell Cycle in Collective Cell Dynamics
3. 学会等名 RIMS Workshop on Mathematical Mechanobiology
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 金山昂生
2. 発表標題 X線散乱実験と分子シミュレーションの連携による過冷却液体の動的構造の解明
3. 学会等名 日本物理学会2021年秋季大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 小林巧弥
2. 発表標題 直接数値計算による液滴乾燥過程のダイナミクス
3. 学会等名 第69回レオロジー討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 金山昂生
2. 発表標題 X線散乱実験と分子シミュレーションの連携による過冷却液体の動的構造の解明
3. 学会等名 第35回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Simon K. Schnyder
2. 発表標題 Role of the Cell Cycle in Collective Cell Dynamics
3. 学会等名 Active Matter Workshop 2022
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Jintao Li
2. 発表標題 Mechanical competition between different cell types
3. 学会等名 Active Matter Workshop 2022
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Simon Schnyder
2. 発表標題 A mechano-chemical cell cycle for growing cell colonies
3. 学会等名 American Physical Society (APS) March Meeting (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 金山 昂生
2. 発表標題 直接数値計算による二成分流体コロイド分散系の粘弾性の評価
3. 学会等名 第68回レオロジー討論会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 江里口 拓哉
2. 発表標題 直接数値計算によるヤヌス粒子の誘起電荷電気泳動
3. 学会等名 第68回レオロジー討論会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 佐脇 航平
2. 発表標題 直接数値計算によるクインケローラーの挙動解析
3. 学会等名 第68回レオロジー討論会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 金山 昂生
2. 発表標題 MDシミュレーションによるせん断流下での過冷却液体の解析
3. 学会等名 化学工学会第86年会
4. 発表年 2021年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

<p>Welcome to KAPSEL-5 HP https://kapsel-dns.com/v5/ Welcome to KAPSEL-4 HP https://kapsel-dns.com/v4/ KAPSEL HP https://kapsel-dns.com/</p>

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
--	---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------