

「シミュレーション技術の革新と実用化基盤の構築」

平成14年度採択研究代表者

越塚 誠一

(東京大学大学院工学系研究科 助教授)

## 「粒子法によるマルチフィジクスシミュレータ」

### 1. 研究実施の概要

本研究では、MMI機能を整備した汎用マルチフィジクスシミュレータを粒子法による多相流体構造連成解析手法に基づき開発する。さらに、このマルチフィジクスシミュレータを微量液体操作技術あるいはマイクロバルブ等のマイクロ生化学システムのデバイスに実際に適用し、精密な計測実験結果と比較・検討して十分な定量的評価を行うことによりその有効性を実証する。

平成14年度では、5ヵ年計画の初年度としてその準備を行った。まず、粒子法研究グループでは、粒子法を汎用シミュレータに採用するにあたって解決すべき問題点を検討する上で有用であると目される関連研究、あるいは粒子法の更なる高度化を検討する上で有用であると目される関連研究などについて文献調査を行い、平成15年度より着手する粒子法による高精度流体・構造解析手法の開発において有用な情報を収集・整理した。具体的には、以下の項目について調査を行った。

#### ・Finite Mass Method

MPS法あるいはSPH法などの粒子法では質点群の(並進)運動として連続体運動を近似する。それに対して、Finite Mass Methodではある大きさをもった粒子を考えてそれらの並進運動に加えて回転および歪み運動も合わせて連続体運動を近似する。したがってFinite Mass MethodはMPS法等よりも自由度が多く本質的に高次精度の解法であると考えられる。さらに、Finite Mass Methodの運動方程式はLagrangianから変分原理を用いて導出されており、空間的に離散化を行った段階でも線形および角運動量、エネルギーの各種保存則を満足する。ただし、現時点のFinite Mass Methodは、等エントロピーの圧縮性流体を対象としており、境界のない無限大領域の中の流れを対象としている。したがって、Finite Mass Methodをマイクロ生化学システムのような工学的問題に適用するにあたっては、非圧縮条件の取り扱いと固定境界条件の取り扱いを工夫する必要がある。

#### ・Vortex Methods

Vortex Methodは、ある渦度をもった粒子が流れに沿って移動することによって流体運動を表す手法であり、渦度方程式を粒子法で解くものとみなすこともできる。渦度法では、離散渦度群から誘導される速度場は連続的に非発散条件(質量保存則)を満たすなど非圧

縮流れを粒子的に扱う上で優れた性質をもっている。なお、渦度法では渦度から誘導される速度場とポテンシャル速度場に分解し、境界条件を満たすようなポテンシャル速度場をパネル法等で計算することによって壁面境界条件を課すため、渦度法の壁面境界条件を与えるアルゴリズムは粒子法にそのまま直接適用することはできない。ただし、渦度法に関連してparticle strength exchange、diffusion velocity method等の各種粘性モデルなど粒子法に応用できる可能性がある手法が提案されている。

#### ・Geometric Numerical Integration

Hamilton系の構造を保存するSymplecticスキームに代表される幾何学的数値積分法は、エネルギー保存特性に優れる等の利点を持つことから近年注目を集めている。対称なSymplecticスキームでは代表的なものとしてStörmer/Verletスキームがあり、Holonomicな拘束条件を伴う場合にはRattle法などが提案されている。粒子法の運動方程式をHamiltonianにより書き下すことができれば、これらの時間積分法をそのまま適用することができる。

また、上記の調査に加えマイクロスケールの流体シミュレーション手法に関する調査と粒子法シミュレータの概念設計を行った。これらH14年度の成果に基づき、H15年度よりMMIも含めた粒子法による高精度流体・構造解析手法の開発に着手する予定である。

マイクロバルブ研究グループでは、MicroPIV装置を購入しその基本特性の評価を行うと同時にマイクロチャネル内の流体3次元計測装置の検討を行った。具体的には、図1に示す蛍光共焦点顕微鏡とNipkow-Type光学ユニットを用いて蛍光ビーズの高速な流れをリアルタイムで観察する系を実現した(図2)。3次元的な流れ観測のため、ピエゾアクチュエータを用いることにより、数 $\mu\text{m}$ ピッチでの断層撮影も可能にしている。また、PDMSを素材としたパッシブマイクロバルブの設計・試作にも着手している。なお、同時にCoventor Wareを用いた有限要素法による試験的シミュレーションを行っており、粒子法シミュレーションを評価する上で比較となる知見を得ている。今後、マイクロバルブの流れ計測を行って、粒子法による流体・構造連成シミュレーションに有効なデータを取得し粒子法研究グループに提供していく予定である。

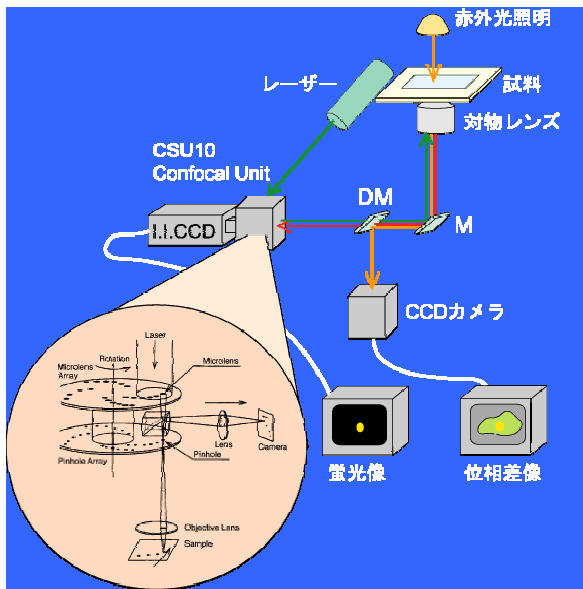


図1 マイクロ流路内3次元流体観測系の構成

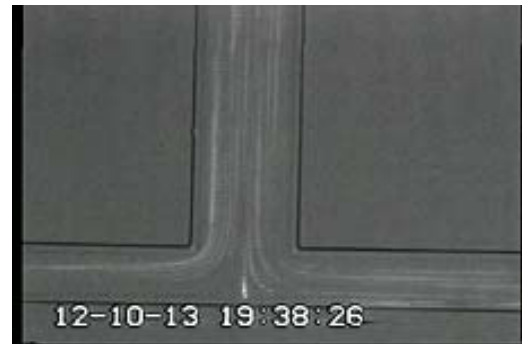


図2 T字型流路における流れの観測例

微量液体操作技術研究グループでは、高出力レーザーを用いたPIVシステムと蛍光顕微鏡を用いたPIVシステムの2種類のMicroPIVシステムを構築した(図3および図4)。高出力レーザーによるMicroPIVシステムを用いて、直線流路、気泡周り、直角流路等の2次元デバイス内圧力駆動流れの計測を行った。気泡周りの流れの計測例を図5に示す。この装置により $630\mu\text{m} \times 500\mu\text{m}$ の領域を $10.4\mu\text{m}$ 間隔で速度ベクトルの計測を行うことが可能となった。また、蛍光顕微鏡を用いたMicroPIVシステムにより電気浸透流を伴う静電駆動流れの計測を行った(図6)。今後、3次元構造を有するマイクロ流路を用いたバイオリクターなどの流れ計測を行って、粒子法による多相流体シミュレーションに有効なデータを取得し粒子法研究グループに提供していく予定である。

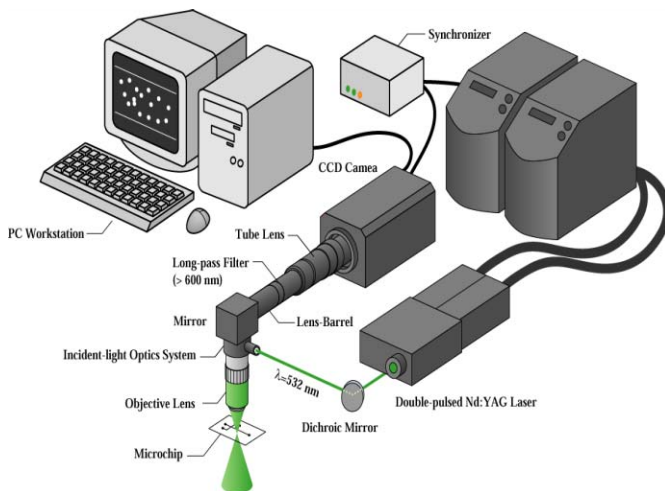


図3 MicroPIVシステム

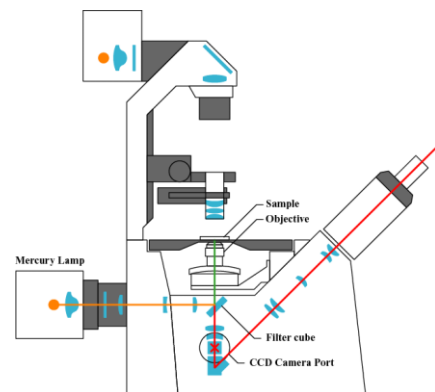


図4 蛍光顕微鏡システム

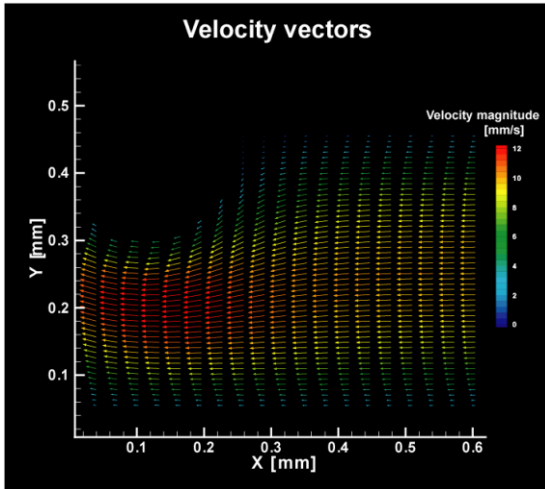


図5 気泡周りの流れの平均速度分布

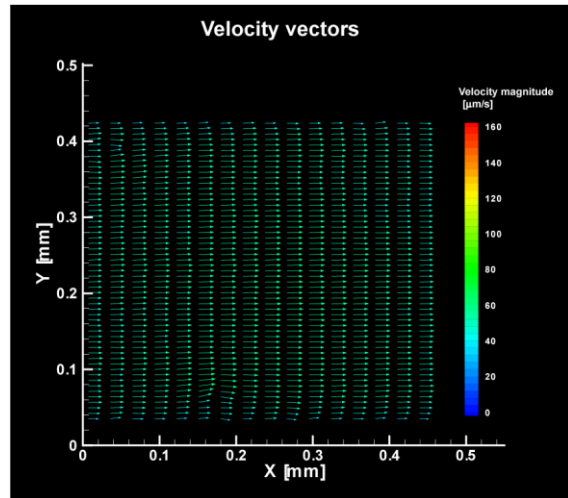


図6 静電駆動流れの平均速度分布

## 2. 研究実施体制

### 粒子法研究グループ

- ① 研究分担グループ長：越塚 誠一（東京大学大学院工学系研究科、助教授）
- ② 研究項目
  - ・粒子法の高度化に関連する研究動向の調査
  - ・マイクロスケールの流体シミュレーション手法に関する研究動向の調査
  - ・粒子法によるマルチフィジクスシミュレータの設計（I）

### 微量液体操作技術研究グループ

- ① 研究分担グループ長：藤井 輝夫（東京大学生産技術研究所、助教授）
- ② 研究項目：
  - ・微量液体操作技術の計測実験の準備（I）

### マイクロバルブ研究グループ

- ① 研究分担グループ長：庄子 習一（早稲田大学理工学部、教授）
- ② 研究項目：
  - ・マイクロバルブの計測実験の準備（I）