

「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

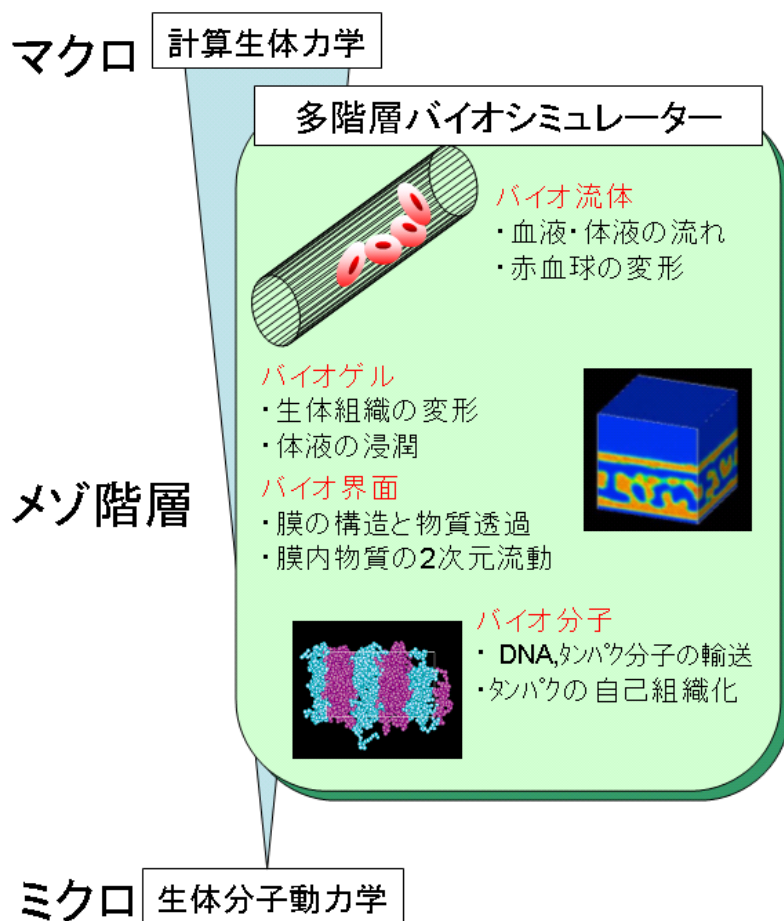
土井 正男

(名古屋大学大学院工学研究科 教授)

「多階層的バイオレオシミュレータの研究開発」

1. 研究実施の概要

本プロジェクトでは、経済産業省のプロジェクト(2002年3月終了)の中で研究代表者らが開発した「ソフトマテリアルのための統合化シミュレータOCTA」を拡張し、生体組織やバイオマテリアルにおける物質の変形、流動、拡散などのレオロジー現象を解析し、先端医療に役立てうる多階層的シミュレータを構築する。



図、バイオレオシミュレータの概念図

従来の生体関係のシミュレーションは、マイクロレベルのもの（例えば分子・化学反応）とマクロレベルのもの（例えば血液流動，骨の変形等）に着目するものであった。本研究では，これまで扱われてこなかったメゾスコピックレベルに関する現象に着目し，既存のシミュレーションとの連携を考えながら，生体組織やバイオマテリアルにおける，物質透過，変形，流動等の現象に対応しうるシミュレータを構築する．具体的には，(a) バイオ流体シミュレータ，(b) バイオゲルシミュレータ (c) バイオ界面シミュレータ，(d) バイオ分子シミュレータの4つのシミュレータを構築し，これらを共通のシミュレーションプラットフォームの上で連携させることにより，生体組織やバイオマテリアルに対する多階層的なシミュレーションを実現する。

本年度の実施内容は以下のとおりである．

① バイオ流体シミュレータ

生体内の流動シミュレーションに関する国内外の研究の動向を調査した。とくに、流体・弾性体連成問題、自由境界問題の数値解法についての様々な方法を比較検討した。前者についてはLighthillの方法、後者についてはLevel Set法をさらに深く検討することとした。

② バイオゲルシミュレータ

バイオゲルシミュレータの要件整理を行い全体的な構想を練った。特に生体内で重要な相互作用の1つである電解質効果を取り扱うモデルの検討を開始した。

③ バイオ界面シミュレータ

界面近傍の流れ、Microfluidicsのシミュレーション手法について情報収集をおこなった。具体的な手法として、Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH)、Lattice Boltzman法等の候補について調査を行い、練習的なプログラムを作った。

④ バイオ分子シミュレータ

バイオ分子シミュレータの一つの目標として流れ場のなかの分子運動をシミュレーションすることと定め、プログラム作りを開始した。

⑤ 連携プラットフォーム

高分子材料設計プラットフォームとして開発したGOURMETについての問題を整理し、必要な拡張機能の設計を行った。またCやFortranユーザのために、GOURMETを使うときに必要なインターフェースプログラムの α 版を開発した。

2. 研究実施体制

土井グループ

① 研究分担グループ長：土井 正男（名古屋大学大学院工学研究科、教授）

② 研究項目 多階層的バイオレオシミュレータの研究開発

（多階層的バイオレオシミュレータを実現することを目的とし，シミュレータを構築する各計算エンジンとプラットフォームの開発を行う。）