

「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 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

連続体の運動を離散粒子群の運動によって近似する粒子法は、複雑な界面変化を伴う多相流問題や流体構造連成問題等において本質的な優位点をもっている。一方、マイクロ化に伴う様々な利点により次世代の生化学分析技術として広範な応用が期待されているマイクロ生化学システムは多相流問題・流体構造連成問題に支配されることが多い。そこで、本研究ではマイクロ生化学システムの研究開発能力の向上に寄与することを目的として、粒子法による多相流体構造連成解析手法に基づいた汎用マルチフィジクスシミュレータを開発する。さらに、それをマイクロ生化学システムの各種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って粒子法によるマルチフィジクスシミュレータの有効性を実証する。

H14年度はプロジェクトの準備を行い、H15年度は粒子法による非圧縮性流体解析手法を開発した。H16年度は、この非圧縮性流体解析機能に界面計算機能を追加し、粒子法による多相流体計算機能を開発した。また幾つかのマイクロ流体デバイスに対して計測実験を行い、そこで得られたデータを用いて粒子法によるシミュレーションを行って粒子法による解析手法の有効性を検討した。

H17年度は粒子法による流体構造連成計算手法を開発する予定である。H18年度以降はシミュレータの検証を行い、最終的に多相流体・構造連成解析を行うことのできる粒子法によるマルチフィジクスシミュレータを完成させる予定である。

2. 研究実施内容

本研究では、MMI (Man-Machine Interface) 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し、マイクロ生化学システムの精密な計測実験結果と比較・検討してその有効性を実証する。以下、研究グループ毎に平成16年度に行われた研究内容を報告する。

①粒子法研究グループ

平成16年度は、平成15年度に開発した非圧縮性流体計算機能に界面計算機能を追加し、3次元MPS (Moving Particle Semi-implicit) 法による多相流解析プログラムを作成

した。なお、粒子法の高精度化の研究ではHamiltonianによる定式化に粘性計算機能を追加した。粒子法シミュレータのMMI機能については平成15年度に開発したプロトタイプ・プログラムに、多相流解析に対応した機能を追加した。図1に粒子法による多相流解析プログラムの計算例を示し、図2に粒子法MMIによるデータ作成例を示す。

また、昨年度に引き続き粒子法のマイクロ生化学システムへの適用性の検討も平行して行っており、マイクロ生化学研究グループで行われたマイクロ流路内の人工細胞付着実験に基づく解析(図3)とマイクロ流体制御研究グループで行われたデジタルミキサーの実験に基づく解析(図4)を行った。

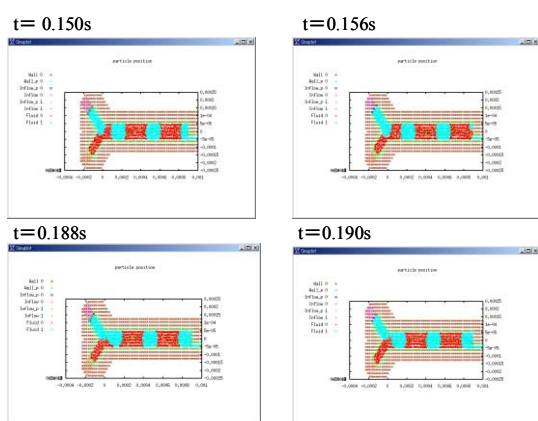


図1 3次元液滴生成の計算例

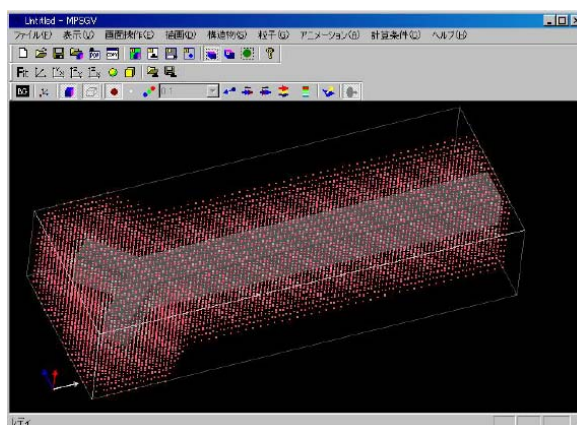
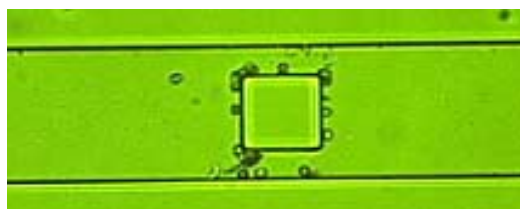
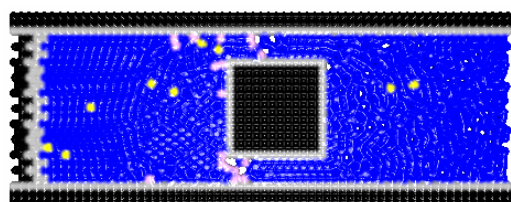


図2 MMIによる粒子データ作成例

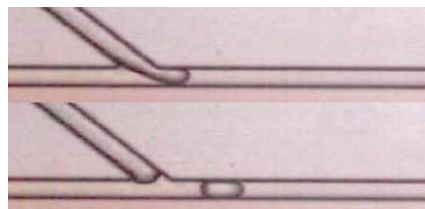


(a) 実験

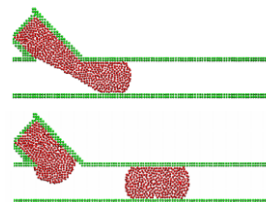


(b) 計算

図3 人工細胞付着実験の計算例



(a) 実験



(b) 計算

図4 デジタルミキサーの計算例

②マイクロ生化学研究グループ

平成16年度は、平成15年度末に着手したマイクロ流路内の人工細胞付着実験を本格的に実施した。これは、マイクロ流路内で細胞培養を行うバイオリアクターの設計をより効率的に行うために、細胞付着の特性を定量的に評価することを目的として行われたもの

である。対象とした流路は幅・高さとも $200\mu\text{m}$ の矩形流路で、付着のトリガーとして四角柱、円柱、三角柱等の障害物を配置し(図5)、その形状と大きさが付着状態に与える影響を調べた。人工細胞にはポリスチレン製のビーズを用い、表面修飾を施すことによってその付着性を3段階に制御している。代表的な実験結果を図6に示す。また同時に流速分布を計測し、流速勾配と付着位置の関係について考察を行った(図7)。

また、共焦点顕微鏡を用いたマイクロPIVシステムを用いて液滴内部の流れの3次元構造を測定し、シミュレーションの検証においても非常に有用なデータを取得した(図8)。

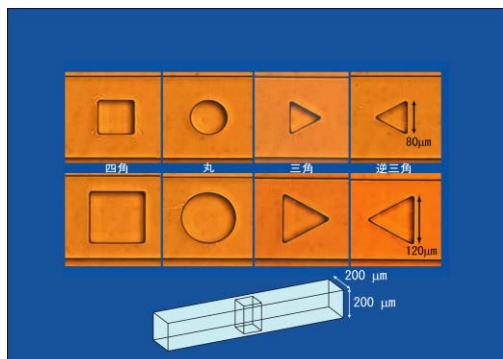


図5 人工細胞付着実験の体系

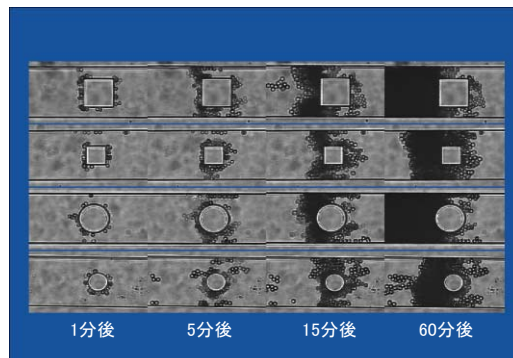


図6 実験結果の例

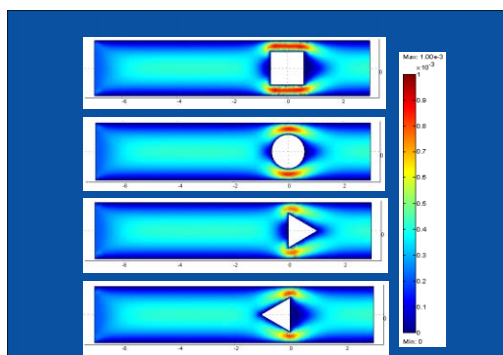


図6 流速分布の計測結果

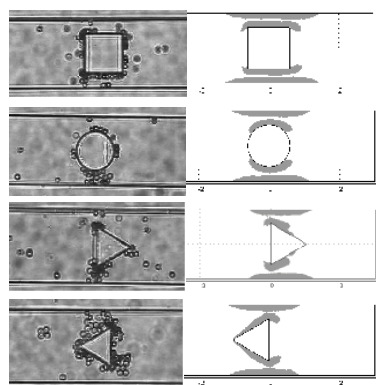


図7 流速勾配と付着位置の比較

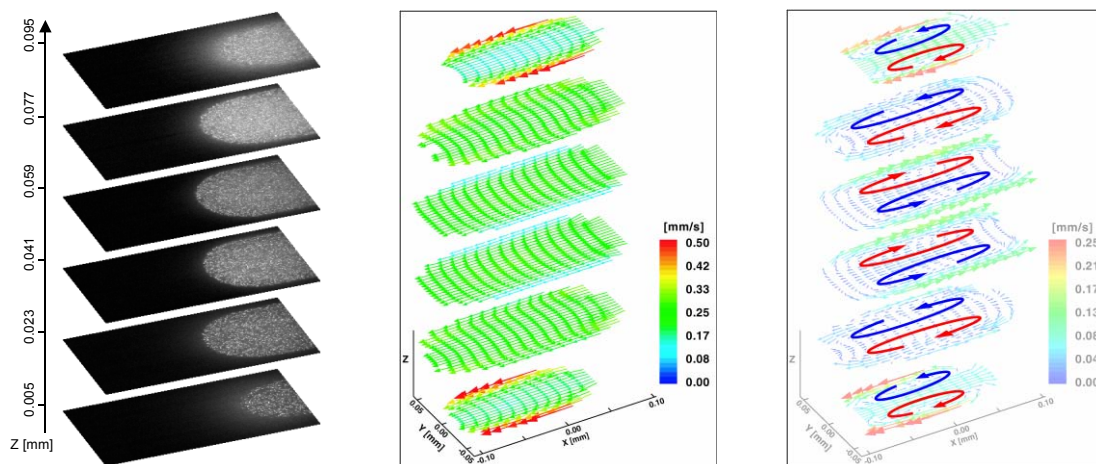


図8 マイクロ液滴内部の3次元流動

③マイクロ流体制御研究グループ

平成16年度は、平成15年度に引き続き、精密な微量液滴の生成・制御が可能なデジタルミキサー（図9）の開発およびその流れ計測を行った。平成16年度は、流路形状、流量比、総流量、水溶液の粘度が生成される液滴の大きさや精度に与える影響を詳細に検討し（表1）、より小さく均一な液滴生成が可能なデバイスの開発を試みた。また、液滴が生成される瞬間の速度分布を計測し（図10）、液滴生成過程の現象に対する知見を得るとともに、シミュレーションの検証にも有用なデータを取得した。

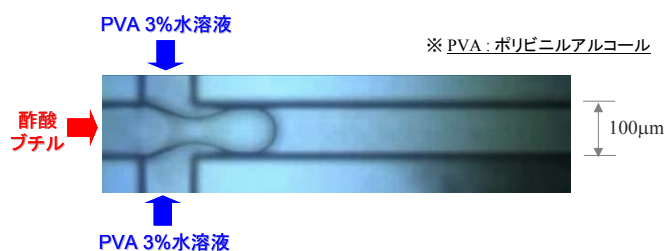


図9 デジタルミキサー

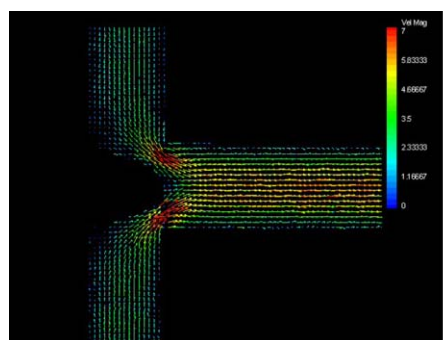


図10 液滴生成における速度分布

表1 各パラメータが液滴生成に与える影響

パラメータ	特性
流量比	流量比を小さくすることで、より小さな液滴の生成が可能
総流量	総流量を大きくすることで、より小さな液滴の生成が可能
流路断面のアスペクト	アスペクト比を小さくすることで、より小さな液滴の生成が可能
水溶液の粘度	粘度差を大きくすることで、より小さな液滴の生成が可能

3. 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、教授）
- ② 研究項目：粒子法による多相流体・構造連成解析手法の開発

マイクロ生化学研究グループ

- 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：マイクロ生化学デバイスの計測実験

マイクロ流体制御研究グループ

- 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：マイクロ流体制御デバイスの計測実験

4. 主な研究成果の発表

(1) 論文発表

- 木下晴之, 大島まり, 藤井輝夫, 山本貴富喜, 金田祥平, 高速共焦点スキャナを用いたマイクロPIVシステムの構築, 生産研究, 57巻・2号, 1-5 (2005)
- Jeung Sang GO and Shuichi SHOJI, "Digital Sorting of Flow-through Droplet Phase Microfluid," Jpn. J. Appl. Phys. Vol. 42 (2003) pp.448-450, Part 2, No. 5A, 1 May 2003