「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。

平成14年度はプロジェクトの準備を行い、平成15年度は粒子法による非圧縮性流体解析手法を開発した。平成16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。平成17年度は、この多相流体計算機能に構造計算機能を追加し、流体構造連成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。

平成18年度はシミュレータの検証を行い、最終的な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

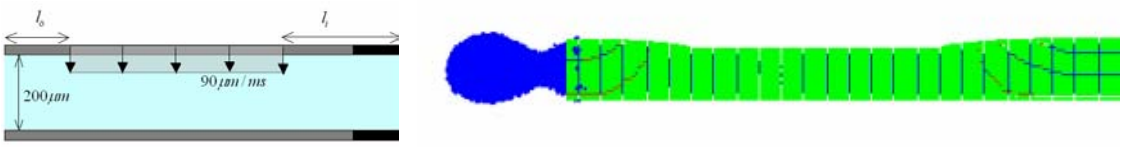
本研究では、MMI（Man-Machine Interface）機能を整備した汎用マルチフィジクスシミュレータを粒子法による多相流体構造連成解析手法に基づき開発し、マイクロ生化学システムの精密な計測実験結果と比較・検討してその有効性を実証する。以下、研究グループ毎に平成17年度に行った研究内容を報告する。

①粒子法研究グループ

平成17年度は、平成16年度に開発した多相流体計算機能に、弾性体の動的計算機能を加えて多相流体構造連成計算機能を開発した。また、これに対応してMMI機能を整備し、当初予定していた粒子法によるマルチフィジクスシミュレータの全ての機能が一通り完成した。図1に多相流体構造連成計算の例としてマイクロディスペンサーの計算結果を示す。

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行っており、平成17年度はマイクロ流体制御研究グループで行われたディジタルミキサーの実験に基づく3次元解析を行った（図2）。従来の2次元解析でみられた実験結果との差異はほぼ解消し、定量的にも実験結果と一致した結果が得られた（図3）。

なお、昨年度開発した多相流体計算プログラムを整備し、ホームページ上で無償配布を開始した。



(a) 計算体系　　(b)計算結果

図1　マイクロディスペンサーの計算

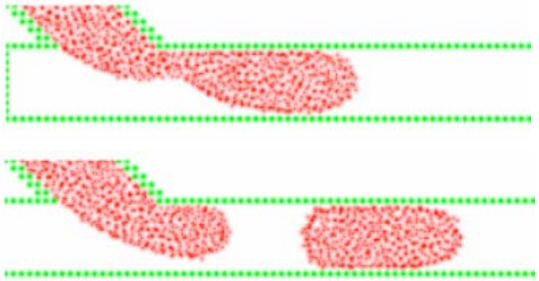


図2　ディジタルミキサーの3次元計算

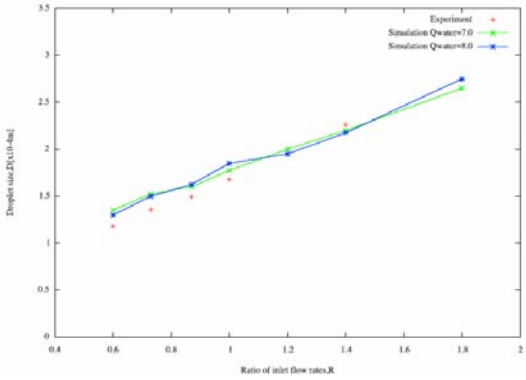


図3　液滴径の計算結果と実験結果の比較

②マイクロ生化学研究グループ

平成17年度は、平成16年度より開始した人工細胞付着実験を引き続き行い、細胞付着のメカニズムの検討を行った。特に平成17年度には、細胞付着と流れ場の相互作用のメカニズムを検討するため、Y字型流路（図4）およびT字型流路（図5）を用いた実験を行い、壁面に向かう流れと速度勾配が人工細胞の付着・離脱に与える影響を検討した。その結果、粒子が付着しやすいのは流れが壁面に向かっている箇所であり、疎水性をもつ壁面に対して粒子の疎水性が強いほどその傾向が強いことが観察された。

また、共焦点マイクロPIVシステムによる液滴内部の流れの観測も平成16年度より継続して行っている。平成17年度では計測断面に垂直な方向の速度成分を評価する手法を開発し、液滴内部

の複雑な3次元流動を完全に捉えることに成功した（図6）。

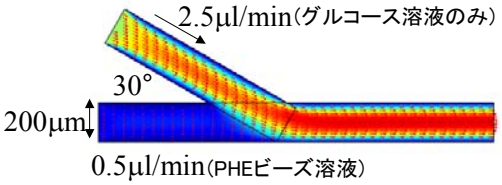


図4　Y字型流路における細胞付着実験

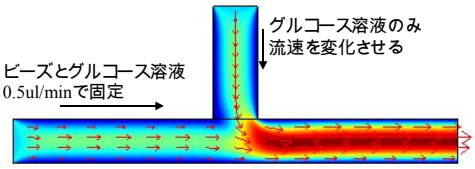


図5　T字型流路における細胞付着実験

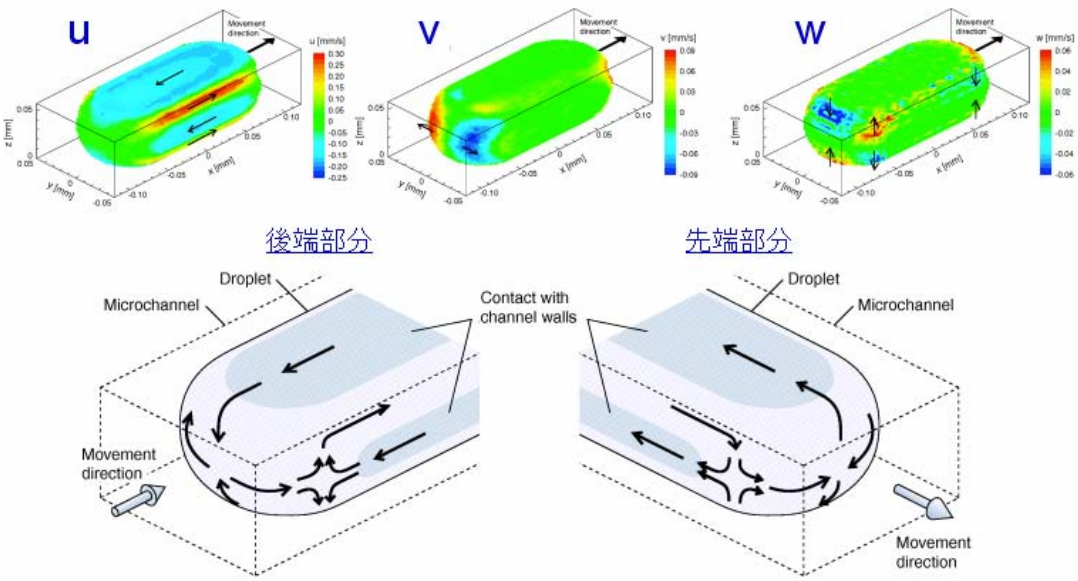


図6　液滴内部における三次元流動の詳細計測

③マイクロ流体制御研究グループ

平成17年度は、平成16年度に引き続き、精密な微量液滴の生成・制御が可能なディジタルミキサーの開発を行った。平成17年度では、特に流路分岐による液滴細分化デバイスの検討を行い、分岐部にピラー構造（図7）を設けることによって均一な細分化が可能であることが実証された（図8）。さらに、段階的に4分割することができるデバイスの開発に成功した（図9および図10）。また、マイクロチャネル内のメッシュ構造体の作成に成功しており（図11）、マイクロ流路内の触媒反応場の形成等への応用を検討した。

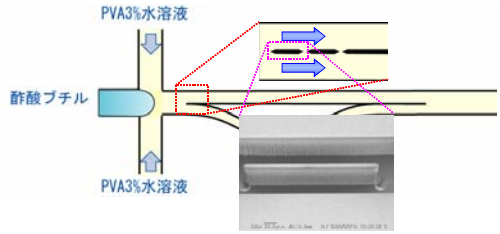


図7　分岐部のピラー構造

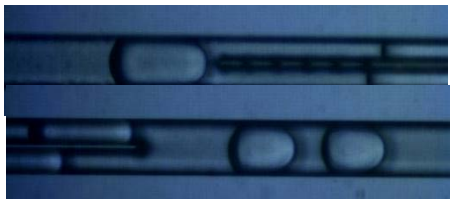


図8　液滴2分割の様子

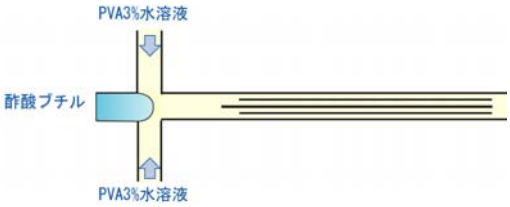


図9　4分割の分岐構造

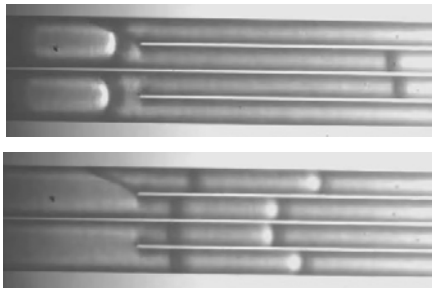


図10　液滴4分割の様子

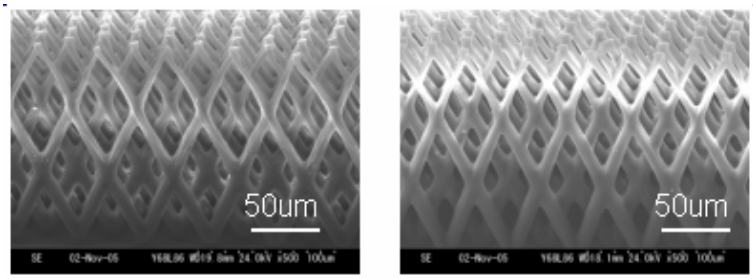


図11　マイクロチャネル内のメッシュ構造体

３．研究実施体制

「粒子法研究グループ」グループ

①研究分担グループ長：越塚　誠一（東京大学、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」グループ

①研究分担グループ長：藤井　輝夫（東京大学、助教授）

②研究項目：マイクロ生化学の計測実験

「マイクロ流体制御研究グループ」グループ

①研究分担グループ長：庄子　習一（早稲田大学、教授）

②研究項目：マイクロ流体制御の計測実験

４．主な研究成果の発表

（１）　論文（原著論文）発表

○　鈴木幸人，越塚誠一，岡芳明，”HMPS(Hamiltonian Moving Particle Semi-implicit)法の開発（第1報，運動方程式の導出）”，Trans. JSCES, Paper No.20050016, (2005)

○　鈴木幸人，越塚誠一，岡芳明，”HMPS(Hamiltonian Moving Particle Semi-implicit)法の開発（第２報，シンプレクティックスキームの適用）”，Trans. JSCES, Paper No.20050017, (2005)

○　原田隆宏，鈴木幸人，越塚誠一，荒川貴博，庄子習一，”MPS 法によるマイクロ流体の液滴生成シミュレーション”，日本機械学会論文集(B) 71, 2637-2641 (2005)

○　H. Sato, D. Yagyu, S. Ito, S. Shoji, “Improved inclined multi-lithography using water as exposure medium and its 3-D mixing microchannel application”, Sensors and Actuators A, Vol. 128 (2006) pp.183-190

○　佐藤寛暢，庄子習一，「化学・生化学分析への応用を目的としたマイクロ流体素子」，混相流，Vol.19, No.2 (2005) pp.86-93