

研究課題別中間評価結果

1. 研究課題名： 多階層的バイオレオシミュレータの研究開発

2. 研究代表者名： 土井 正男（東京大学大学院工学系研究科 教授）

3. 研究概要

本研究課題では、生体および生体材料のメゾ階層（マイクロ - マクロの中間階層）のレオロジー現象を扱うシミュレーションプログラムの構築とその検証を目的とする。具体的には、先の経済産業省プロジェクトで開発したOCTAのプラットフォームを拡充・発展させつつ、上記の現象を扱う新たなシミュレータを開発し、その実験的な検証を進める。プラットフォーム機能強化についてはほぼ作業を終え、現在は実験データとシミュレーション連携のためのツールの開発に移っている。新規シミュレータについては4つのシミュレータを開発中であり、α版CDを作り限定公開を行った。検証研究については、3つのテーマを選定し実験研究をスタートさせた。

4. 中間評価結果

4 - 1. 研究の進捗状況と今後の見込み

生体および生体工学における微粒子流動現象を扱うための4つの要素シミュレータ（バイオゲルシミュレータ、バイオ流体シミュレータ、微粒子分散系シミュレータ、ミセルシミュレータ）および、総合プラットフォームの開発が順調に進んでいる。

当初の計画ではバイオ分子シミュレータの開発を予定していたが、前のプロジェクトで開発済のもので十分であることが判明したため、新しい微粒子分散シミュレータの開発に切り替えている。その結果、キラルな分子の分離についての新しい知見が得られている。

各シミュレータに関しては、検証実験、機能追加、応用からマニュアル化まで、総合プラットフォームに関しては、機能強化、実験装置との連携など、さらに全体システムの検証と必要な項目は適切に計画されている。

4 - 2. 研究成果の現状と今後の見込み

各シミュレータの検証も兼ねたシミュレーションと実験の過程において、多様な成果が得られている。論文も多数出版されているが、何よりも国際会議の招待講演が多いことは、成果が出ていること、質が高いことを示す。

マルチスケールモデリングの基本はオープンな環境の元でのシミュレータの連携という独自の立場で、先駆的な研究を行ってきたことがこの分野の近年の進展に貢献しつつある。

現在、ソフトマテリアルは多くの研究者開発者から注目を浴びており、このようなシミュレーションへの需要は多いと考えられる。研究代表者がかつて開発したOCTAシステムとの統合により、今後マルチスケールのシミュレーションの基本プラットフォームになると期待される。

4 - 3 . 今後の研究に向けて

開発したそれぞれのシミュレータとこれを連携動作させるプラットフォームが完成され、この開発システムによって、様々な多階層モデリングによって微小流動現象の解析が進展することが期待できる。プラットフォームは、他で開発されたソフトなども統合した環境で使えるようにするもので、徐々にコミュニティに広まりつつある。

本研究のシミュレータは完成後、種々の実問題に適用されることが期待される。

4 - 4 . 戦略目標に向けての展望

本プロジェクトは本研究チームがすでに開発してきたOCTAというソフトウェアをさらに発展させるものである。シミュレータの開発においては、新しいアルゴリズムの開発も行われているし、それらをプラットフォーム上に統合することにより、実問題を解くための実用基盤の構築にもつながっている。現在、他のプロジェクトで開発しているプログラムを本研究のプラットフォームとのインタフェースをとる例もできており、本ソフトウェアを使用するユーザの更なる拡大を期待したい。

4 - 5 . 総合的評価

生体および生体工学における微小流動現象を扱うための4つのシミュレータの開発および総合プラットフォームの開発は順調に進展している。今後は、シミュレータの検証実験、機能追加、応用、さらに、総合プラットフォームの機能強化とシミュレータの連携が推進され、開発されたシステムを用いた多階層モデリングによって微小流動現象の解析が進展することが期待できる。

本研究課題の最終的な評価は、シミュレータ、プラットフォームおよび開発システムの有効性が検証されるだけでなく、これらが公開され、その利用者が自己増殖する状態を生み出しているか否かにかかっている。