

「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

(東京大学大学院工学系研究科 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

生体および生体工学に関連する微小流動領域のレオロジー現象を取り扱う理論とシミュレータの開発を行う。特に、我々が1998年～2002年にNEDOの大学連携プロジェクトにおいて開発したソフトマテリアルのための統合的シミュレータOCTAの成果を引き継ぎ、(1) シミュレーションプラットフォーム(GOURMET)の全面的改良、(2) バイオゲル、バイオ流体、微粒子分散系などの生体関連の複雑流体を扱う新規シミュレーションエンジンの開発、(3) 摩擦現象、乾燥・塗布の現象などに対する多階層的シミュレーション手法の構築を行う。我々は、これまで、GOURMETの機能拡張、各種新規エンジンのプロトタイプ作成、原子間力顕微鏡(AFM)による高分子表面解析に対する多階層的シミュレーション手法の開発を主に行った。新規に開発したエンジンのプロトタイプを用いて、生体系に関わるゲルの膨潤・収縮過程のメカニズム、任意形状の粒子の沈降・分離のメカニズム、AFMの探針と高分子表面との相互作用のメカニズムなどを解明した。今後は、これらの目標を達成するだけでなく、他のシミュレーションプロジェクトとの連携、実験とのより緊密な連携を行うための手法の開発とそのOCTAへの実装を進め、シミュレーション技術の基盤強化を図っていく予定である。

#### 2. 研究実施内容

- (1) GOURMETの全面的改良：
  - (i) ソフトウェアの開発：GOURMETについて、C-FORTRAN対応ライブラリ、多重配列データのサポート、バイナリ形式への対応による高速化などの機能拡張を行った。
  - (ii) OCTAの普及活動：機能拡張したGOURMETの普及と他のプロジェクトとの連携のために、夏の学校とシンポジウムを開催した。更に、GOURMETの機能解説とユーザー拡大を目指した「物理仮想実験室」(土井正男，滝本淳一編集，名古屋大学出版会，2004年3月出版)を執筆した。
- (2) 新規シミュレーションエンジンの開発：バイオゲル、バイオ流体、微粒子分散系などの生体関連の複雑流体を扱うシミュレーションエンジンのベースとなる理論の構築と基礎機能の設計を行った。
  - (i) 微粒子分散系のシミュレータ：流体が任意形状の微粒子に作用する抵抗、その微粒子のダイナミクスを計算するシミュレータを構築した。

これを用いて、任意形状の微粒子の沈降、せん断流下における右巻き粒子と左巻き粒子(キラルな粒子)の分離現象を調べた。(図1参照) (ii) バイオゲルシミュレータ：水分の浸潤に伴うバイオゲルの変形を解析するシミュレータのプロトタイプを作成した。従来モデルでは説明付けられていない、拘束下での薄膜ゲルの膨潤、薄膜ゲルの外力下での変形、円柱ゲルの自由膨潤の挙動の解析を行い、2流体モデルの基づく高分子ゲルの応力拡散結合理論の有効性を検証した。(iii) DNAシミュレータ：障害物のある流体中におけるDNAの運動をシミュレーションし、スラロームクロマトグラフィーによるDNAの分離機構を明らかにした。(iv) 細長物体の運動シミュレータ：鞭毛虫、精子などの微生物では細長物体の運動により流体を推進するものが多い。任意断面の細長物体に働く抵抗を計算し、振れた細長物体の抵抗を明らかにした。

(3) 多階層的シミュレーション手法の構築：(i) 摩擦現象の研究：AFMによる高分子表面解析に対するシミュレーション手法を開発した。AFMの探針にかかる力について実験結果を定性的に再現できた。さらに、AFM走査時における鎖分子の吊り上げ(ナノフィッシング)(図2参照)、鎖分子の掻き分け等も観測できた。(ii) 乾燥・塗布現象の研究：高分子を含んだ液滴の乾燥過程における変形の問題は、細胞培養、血液の凝固などの生体関連の現象だけでなく、印刷、塗布などの工業上の技術にも関連して重要である。この現象を支配する物理化学的要因をレビューした。現在、乾燥・塗布などの現象をシミュレータのプロトタイプを開発中である。

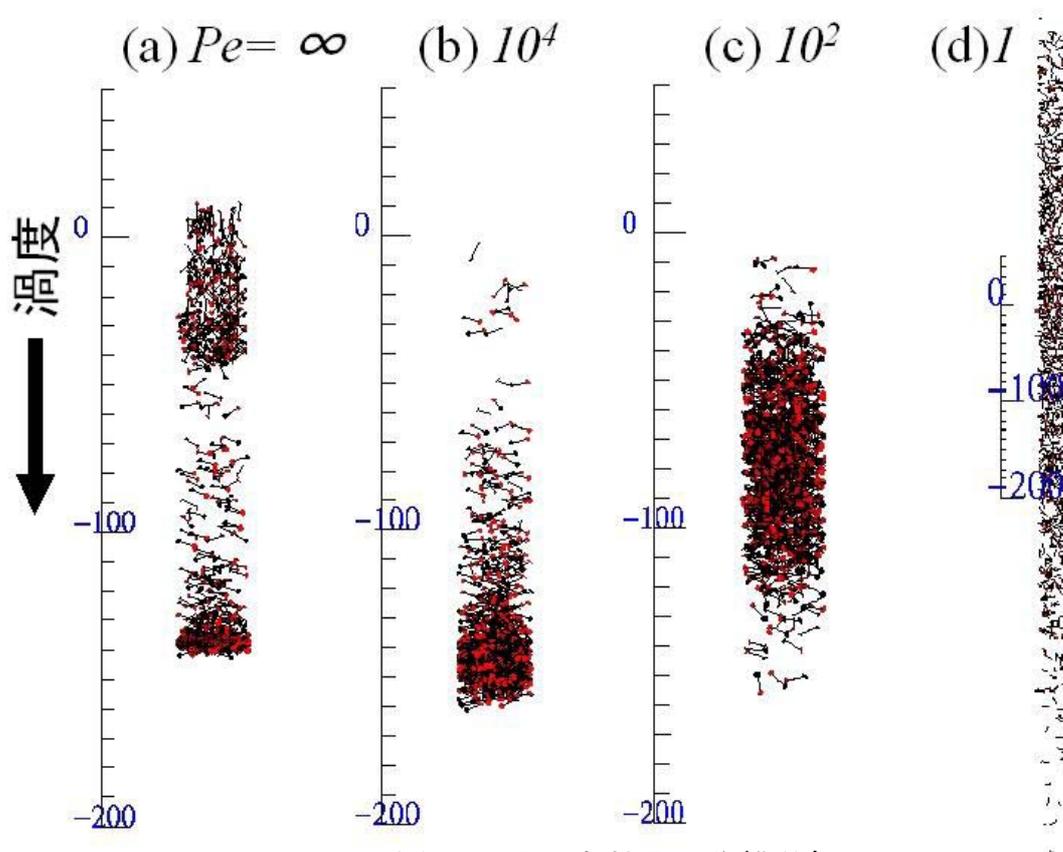


図1：キラルな粒子の分離現象。

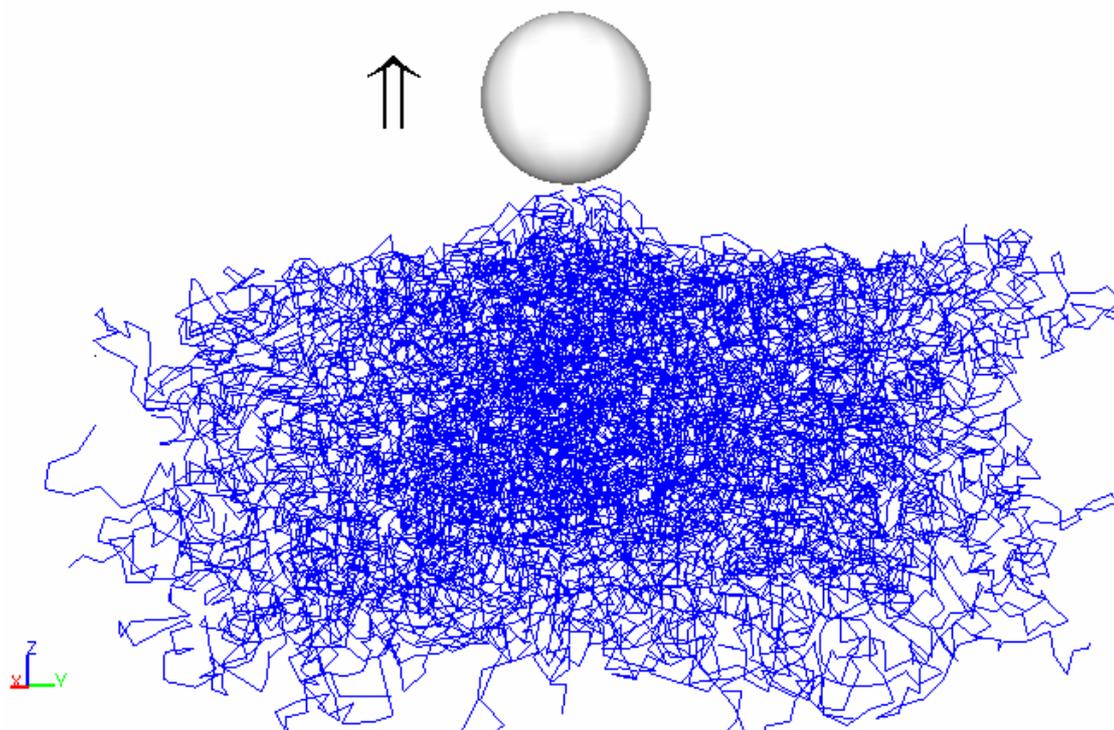


図2：鎖分子のナノフィッシング。

### 3. 研究実施体制

土井グループ

- ① 研究グループ長：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。）

### 4. 主な研究成果の発表（論文発表および特許出願）

#### (1) 論文発表

- M. Doi and J. Takimoto : Molecular modeling of entanglement, Phil. Trans. Roy. Soc. Lond. A, 301, 641-652, (2003).
- M. Doi : OCTA(Open Computational Tool for Advanced Material Technology), Macromol. Symp. Progress in Polymer Science and Technology ed M. Xu (Wiley-VCH), 195, 101-107, (2003).
- T. Shima, H. Kuni, Y. Okabe, M. Doi, X-F. Yuan and T. Kawakatsu : Self-consistent field theory of viscoelastic behaviour of inhomogeneous dense polymer systems, Macromolecules, 36(24), 91-99, (2003).
- M. Doi : Challenges in polymer physics, Pure Appl. Chem., 75(10), 1395-

1402, (2003).

- M. Makino and M. Doi : Sedimentation of a particle with translation-rotation coupling, J. Phys. Soc. Jpn., 72(11), 2699-2701, (2003).
- T. Yamaue, T. Taniguchi and M. Doi : The simulation of the swelling and deswelling dynamics of gels, Molecular Physics, 102(2), 167-172, (2004).
- H. Morita, T. Ikehara, T. Nishi and M. Doi : Study of nanorheology and nanotribology by coarse-grained molecular dynamics simulation, Polymer Journal, 36(3), 265-269, (2004).

(2) 特許出願

H15年度特許出願件数：0件（CREST研究期間累積件数：1件）