

「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。

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、グラフト鎖高分子の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てきた。

平成16年度は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、液滴蒸発のメカニズムをシミュレーションと実験により解明した。さらに、任意形状の粒子の流れ場における挙動、鞭毛運動、ミセル粒子、グラフト高分子の振る舞いなどをシミュレーションにより解析した。

今後は、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

・以下のシミュレーションエンジンの開発を行った。

(1) バイオゲルシミュレータ：高分子電解質ゲルの電場による変形を利用した人工筋肉のダイナミクスとして、高分子電解質ゲルの応力拡散結合モデルを定式化し理論解析を行った。高分子電解質、カウンターイオン、水の3流体モデルに基づき、定電圧印可での人工筋肉の曲げと緩和時間の理論解析を行い大きいイオンで緩和が遅くなる現象を説明付けた。平衡状態での曲率についてイオン種依存性を実験的に観測し、理論モデルを構築した。バイオゲルシミュレータ α 版の開発を行い、ゲルの曲げの緩和過程のシミュレーション研究を進めた(図1)。

(2) バイオ流体シミュレータ：Moving Particle Semi-implicit(MPS)法及び境界要素法に

よるモデルで液滴の蒸発過程のシミュレーションとその比較検証実験を開始した。とくにMPS法では、高分子溶液系への拡張と界面張力効果の実装を行い、基板上的高分子液滴蒸発現象を計算した(図2)。また、粘弾性構成式をMPS法での定式化および粘弾性流体部分の実装をし、テスト計算も実施した。

(3)微粒子分散系シミュレータ：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プログラムの公開のためプロトタイプを作成した。また計算精度向上のために境界要素法を用いて検証した。さらに、生体分子の特殊な形状に対する基礎研究として螺旋形状(図3)のものについてプログラムを使って知見を得た。

(4)ブロック高分子シミュレータ：ブロック高分子をシミュレーションするために密度汎関数法による計算スキームを考え、これを実装し、公開に向けたプロトタイプを作成した。これにより効率的にブロック高分子の自己組織構造が予測できることがわかった(図4)。ドラッグデリバリーシステムなどへの応用が期待されるミセル系の形状の変化も研究した。

(5)細長物体の運動シミュレータ：鞭毛虫、精子などの細長物体の運動を細長物体理論と境界要素法を用いたハイブリッド計算を行った。

・また既存のシミュレーションエンジンを使って、以下の研究を行った。

(6)マルチスケールモデリング：例としてグラフト鎖表面間摩擦、及び修飾表面間摩擦の研究を進めた。

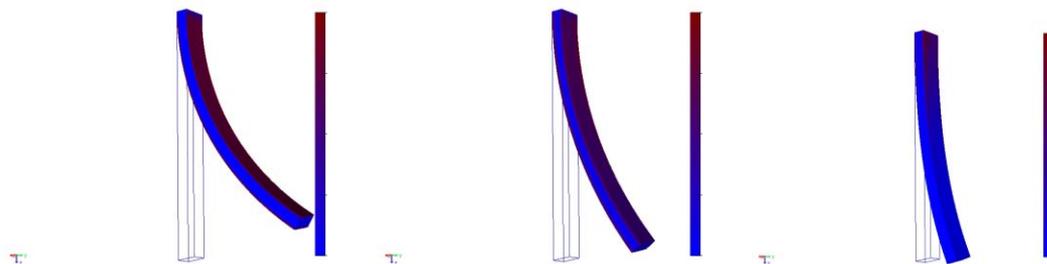


図1：定電圧印可での人工筋肉の緩和過程（左：初期、中央：緩和過程、右：平衡状態）

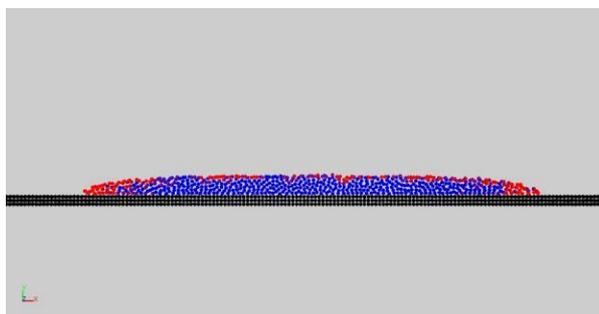


図2：基板上的での高分子溶液の蒸発現象（赤色部分が高分子濃厚部分）

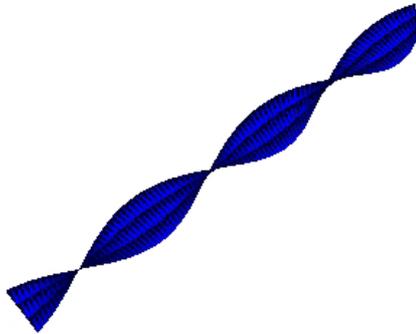


図3：螺旋形状をした粒子

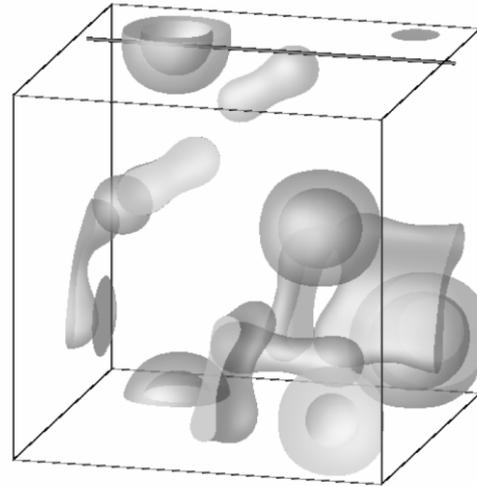


図4：高分子の自己組織化

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（東京大学大学院工学系研究科、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

- T. Yamaue (Univ. of Tokyo, JST/CREST) and M. Doi (Univ. of Tokyo, JST/CREST) : “The Theory of One-Dimensional Swelling Dynamics of Polymer Gels under Mechanical Constraint” Physical Review E Vol. 69, 41402 5pages (2004) (2004年4月26日掲載)
- H. Morita (JST/CREST), T. Kawakatsu (Tohoku Univ.), M. Doi (Univ. of Tokyo), D. Yamaguchi (Kyoto Univ.), M. Takenaka (Kyoto Univ.) and T. Hashimoto (Kyoto Univ.): “Phase separated structures in a binary blend of diblock copolymers under an extensional force field -Helical domain structure-” Journal of Physical Society of Japan. Vol. 73, No. 5 May 2004, 1371-1374 (2004年5月1日掲載)
- T. Yamaue (Univ. of Tokyo, JST/CREST) and M. Doi (Univ. of Tokyo, JST/CREST): “Swelling Dynamics of Constrained Thin-Plate Gels under an External Force” Physical Review E, Vol. 70, pp. 011401 7pages (2004年7月26日掲載)
- T. Yamaue (Univ. of Tokyo, JST/CREST) and M. Doi (Univ. of Tokyo,

JST/CREST): “The Stress Diffusion Coupling in the Swelling Dynamics of Cylindrical Gels” Journal of Chemical Physics, Vol.122, 084703 (2005) 6pages (2004年11月15日掲載)

- M. Makino (JST/CREST) and M. Doi (Univ. of Tokyo, JST/CREST): “Viscoelasticity of dilute solutions of particles of general shape” Journal of the Physical Society of Japan, Vol.73, No. 11, November, 2004, pp. 3020-3025 (2004年11月1日掲載)
- T. Yamaue (Univ. of Tokyo, JST/CREST), H. Mukai(Nagoya Univ.), K. Asaka(AIST) and M. Doi (Univ. of Tokyo, JST/CREST): “Electro Stress Diffusion Coupling Model for Polyelectrolyte Gels” Macromolecules, Vol. 38, No. 4, 1349-1356 (2005年2月22日掲載)
- M. Makino (JST/CREST) and M. Doi (Univ. of Tokyo, JST/CREST): “Brownian motion of a particle of General Shape in Newtonian Fluid” Journal of the Physical Society of Japan, Vol. 73, No. 10, October, 2004, 2739-2745 (2004年10月15日掲載)

(2) 特許出願

H16年度特許出願件数 : 3件 (CREST研究期間累積件数 : 4件)