

「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、検証を行っている。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 GUI 環境(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および検証を行っている。

平成 17 年度は本プロジェクト発足以来、新規に開発したシミュレータ群を“BRUNCH”と命名し、試作版として限定配布を行った。これらのシミュレータは、バイオゲル、バイオ流体、微粒子分散系を扱うものである。また多階層的シミュレーション手法の構築としてグラフト鎖表面間の粘着に関するシミュレーションを行った。さらにバイオに関する問題として界面の実際の現象を確認するため実験も進めた。具体的には摩擦、粘着、液滴の蒸発について、簡易な生体モデルについて実験を行った。

今後は、試作版の作成により確立されたシミュレータ技術を応用することを目指して、シミュレータの機能拡充、実験による検証を行う。さらに、従来のシミュレーションでは難しい問題に対して、多階層的シミュレーションを行う予定である。

2. 研究実施内容

- (1) シミュレーション GUI 環境(GOURMET)の改良および機能拡張を進めた。特に描画部分の改良、データ編集画面の大規模配列対応、Python スクリプトの機能追加を行った。
- (2) 新規シミュレーションの開発として、本年度は、バイオレオシミュレータ BRUNCH の試作版を作成、限定配布した(図1)。



図 1: バイオレオシミュレータ "BRUNCH"

(a) バイオゲルシミュレータ:

バイオゲルシミュレータ Gelato の研究開発とインターフェースの整備を行い、電解質ゲルの電場応答と緩和、応力誘起膨潤、高分子濃厚液滴の乾燥過程に関連し、弾塑性膜の負圧増加下でのバックリング過程の解析を行った(図 2)。また、アダプティブ有限要素法ライブラリ ALBERTA の有効性検討、ゲルの乾燥過程における溶媒移動と弾性変形の解析を開始した。

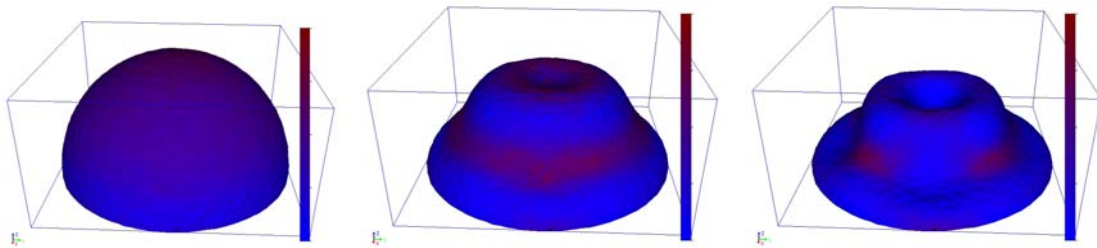


図 2: 弾塑性膜の負圧増加下でのバックリング過程の解析

(b) バイオ流体シミュレータ:

バイオへの応用が期待される流体解法の一つである MPS 法の応用を行った。本年度は粘弾性流体を計算できるようにプログラムを実装した。キャピラリー内流れに対して理論と良好な一致を得ることができた。また、狭窄流路中での粘弾性流体の振る舞いを定性的に再現することにも成功した(図3)。更に、既存の手法ではあるが、弾性体/流体/剛体の連成問題を扱えるようにプログラムを改良し、タンクトレッド運動と呼ばれる流動場中での弾性体の計算を実施した。

(c) 微粒子分散系シミュレータ:

バイオの特徴の一つとして、さまざまな形状が流体に分散しているという特徴がある。その特徴を評価できるシミュレータとして微粒子分散系シミュレータを開発した。本年度は、境界要素法で精度を上げるとともに生体内部での電氣的な相互作用を考えた電気泳動に関するシミュレータを開発した(図4)。

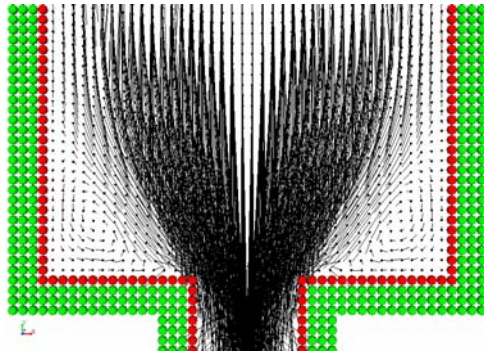


図 3: 狭窄流路中での contraction flow

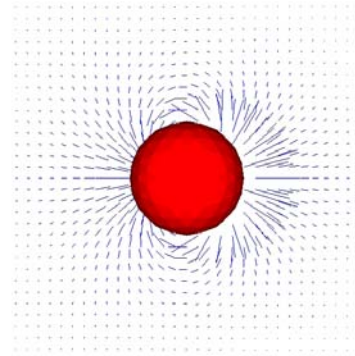


図 4: 帯電した球の周りの流れ場

(3)多階層的シミュレーション手法の構築として、以下のように行った。

(a)グラフト鎖表面間の粘着:

界面レオロジー現象の 1 つとしてミクロな視点からグラフト膜間の粘着に関してとりあげ、分子動力学法を用いてその剥離パターンと粘着力の関係を整理した(図5)。

(b)微小液滴からの溶媒蒸発:

高分子溶液と気相の自由界面における溶媒の蒸発に伴うゲル膜の形成過程のダイナミクスを記述するモデルを構築し、系が 1 次元の場合について解析を行った。

(c)バイオゲルの摩擦:

バイオゲル摩擦のモデルとして、潤滑剤を含む PDMS ゲルの摩擦実験を開始した。摩擦界面の潤滑現象はバルクのマクロな物性と相関があることが明らかになった。

(d)ソフトマター界面破壊ダイナミクスの解明:

ソフトマターにおける破壊現象は、粘着、接着、成型加工といった技術のみならず、生体組織の損傷、生体材料の耐久性など、医用工学の面からも重要な問題である。破壊面の立体形状をその場を観察する方法を開発し、破壊挙動やそのメカニズムを調べた(図6)。

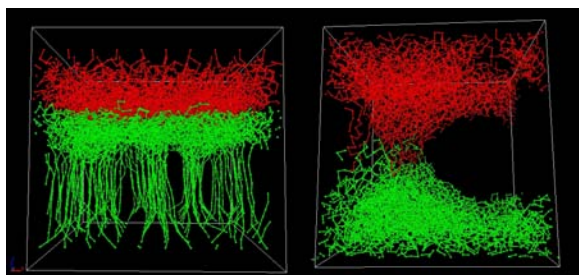


図5: 分子動力学によるグラフト鎖の剥離



図6: 粘着剤界面破壊

3. 研究実施体制

「土井」グループ

①研究分担グループ長：土井 正男（東京大学大学院工学系研究科、教授）

②研究項目：

a) シミュレータの開発

バイオゲル：山上、谷口

バイオ流体：西谷、奥菌

微粒子分散：牧野、土井

b) 統合プラットフォームの開発

土井、滝本、石井、山本、山上、森田

c) 多階層モデリングの実証

森田、金子、山口

4. 主な研究成果の発表（論文発表および特許出願）

(1) 論文（原著論文）発表

- 山上達也(東大院工, JST/CREST), 土井正男(東大院工, JST/CREST): “ソフトマテリアル統合シミュレータ OCTA”, 日本機械学会誌 108 28-31 (2005).
- 森田裕史(JST/CREST), 陣内浩司(京都工繊大), 西敏夫(東工大), 土井正男(東大院工, JST/CREST): “三次元仮想イメージング実験を用いたソフトマテリアルの構造解析”, 高分子論文集, 62 502-507, 2005 年 10 月 25 日.
- 森田裕史(JST/CREST), 土井正男(東大院工, JST/CREST): “粗視化分子動力学法を用いた薄膜のガラス転移温度と表面物性の解析”, 月刊『高分子加工』別冊 Vol. 55 (2), (77) 29-34 (82), 2006 年 2 月 25 日.
- 森田裕史(JST/CREST): “3次元顕微鏡像上に高分子の鎖構造をイメージングする”, 機能材料, 25(7), 5-11 (2005)
- 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, 122, 084703 (2005).
- 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, 38(4), 1349-1356 (2005).
- M. Doi (JST/CREST, Univ. of Tokyo) and M. Makino (JST/CREST): “Motion of micro-particles of complex shape”, Prog. Polym. Sci., 30, 876-884 (2005).
- M. Doi (Univ. of Tokyo, JST/CREST) and T. Yamaue (Univ. of Tokyo, JST/CREST): “Variational bounds for the relaxation times of swelling gels”, Phys. Rev. E 71, 041404 (2005).

- T. Uneyama (Kyoto Univ.) and M. Doi (Univ. of Tokyo, JST/CREST): “Calculation of the micellar structure of polymer surfactant based on the density functional theory”, *Macromolecules*, 38, 5817–5825(2005).
- T. Uneyama (Kyoto Univ.) and M. Doi (Univ. of Tokyo, JST/CREST): “Density functional theory for block copolymer melts and blends”, *Macromolecules*, 38 196–205 (2005).
- M. Doi (Univ. of Tokyo, JST/CREST) and M. Makino (JST/CREST) : “Sedimentaion of particles of general shape”, *Phys. Fluid*, 17 043601/1–7 (2005).
- K. Ozawa (Nagoya Univ.), E. Nishitani (JST/CREST) and M. Doi (Univ. of Tokyo, JST/CREST) : “Modeling the drying process of liquid droplet to form thin film”, *Jpn J. Appl. Phys.*44, 4229–4234 (2005).
- H. Morita (JST/CREST), M. Yamada (Nagoya Univ.), T. Yamaguchi and M. Doi (Univ. of Tokyo, JST/CREST): “Molecular dynamics study of the adhesion between end-grafted polymer films”, *Polymer Journal*, 37(10), 782–788 (2005).
- M. Makino (JST/CREST) and M. Doi (Univ. of Tokyo, JST/CREST): “Migration of twisted ribbon-like particles in simple shear flow”, *Physics of fluids* 17, 103605(2005)
- T. Kajiya (Univ. of Tokyo), E. Nishitani(JRI), T. Yamaue (Univ. of Tokyo, JST/CREST) and M. Doi (Univ. of Tokyo, JST/CREST): “Piling to buckling transition in the drying process of polymer solution drop on substrate having large contact angle”, *Phys. Rev. E* 73, 011601/1–5 (2006).

(2) 特許出願

H17 年度出願件数： 0 件 (CREST 研究期間累積件数： 4 件)