

1 粒子法によるマルチ フィジクスシミュレータ

越塚 誠一¹ 鈴木 幸人¹

¹ 東京大学

粒子法は流体や固体といった連続体の力学に対する新しいコンピュータシミュレーションの方法である。従来の方法では難しかった界面の大変形を扱うことが容易であり、流体力学と固体力学を同時に解かなければならないマルチフィジクスの問題に適している。ここでは粒子法を用いたマイクロ生化学システムのためのマルチフィジクスシミュレータに関して紹介する。マイクロ生化学システムとは、半導体微細加工技術を用いてマイクロスケールの流路を基板上に作成し、連続的あるいはバッチによる化学分析などを行うシステムである。計算例として、混じらない2種類の流体を用いたマイクロ液滴の生成過程、細胞付着を伴うマイクロ流路内流れ、管の変形によるマイクロ液滴の射出を示す。さらに、今後の粒子法の発展の方向として、マルチスケール解析と物理ベースコンピュータグラフィクスについて展望する。

粒子法—新しいコンピュータシミュレーションの方法—

粒子法は流体や固体といった連続体の力学に対する新しいコンピュータシミュレーションの方法である。代表的な方法に、SPH (Smoothed Particle Hydrodynamics) 法と MPS (Moving Particle Semi-implicit) 法がある。このうち、MPS 法は越塚が開発したもので、水などの非圧縮性流れを扱うことができる¹⁾。

粒子法では連続体を複数の粒子の集まりとして表す。そして、連続体の力学を記述する偏微分方程式を粒子の運動方程式に離散化する。ただし、粒子間相互作用を近傍の粒子との間に限定することで計算時間を節約する(図-1)。SPH 法と MPS 法では微分方程式の離散化の方法が異なっている。MPS 法では、まず、勾配、発散、ラプラシアンといったベクトル解析における微分演算子に対して粒子間相互作用モデルを用意する。そして、偏微分方程式中の微分演算子にそれらの粒子間相互作用モデルを代入することで粒子の運動方程式を導出する。

有限体積法や有限要素法などの連続体力学に対する従来のコンピュータシミュレーションの方法では、連続体をメッシュで分割し、偏微分方程式の離散化をメッシュ上で行う。そのため、水面の複雑な挙動や、固体の大変形や破壊を計算しようとする、メッシュの変形によ

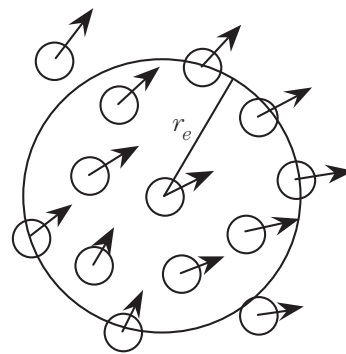


図-1 粒子間相互作用

て計算が破綻する場合がある。粒子法ではメッシュを一切用いないためこうした問題は生じない。図-2にMPS法による水面の複雑な挙動を伴う非圧縮性流れの計算例を示す。水面からしぶきが生じるような極端な場合でも粒子法では特別な処理をしなくても計算することができる。図-3は大変形と破壊を伴う固体解析の例で、破壊が底面より上に向かって進む様子が実験と同様に計算されている。

MPS法は原子力工学の分野で、原子炉の溶融を伴うような大事故のシミュレーションのために開発された方法である。一方、SPH法は宇宙物理学の分野で、星の生成や銀河の衝突といったシミュレーションに用いられてきた方法である。しかしながら、こうした粒子法は連続体力学に対して一般性があり、最近では土木工学、船

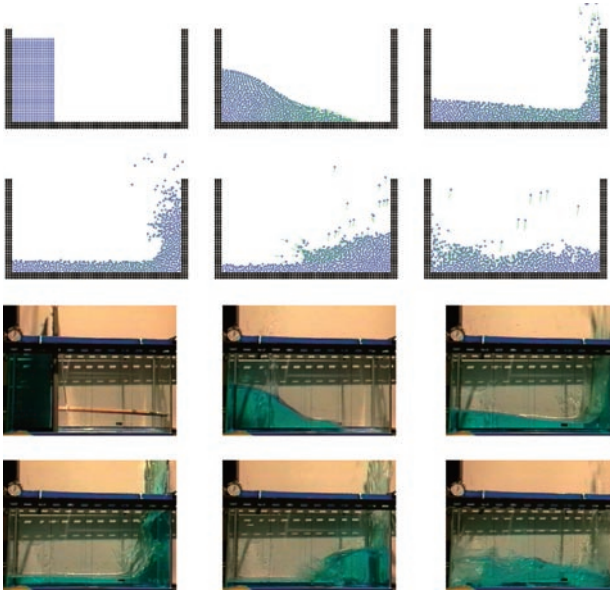


図-2 水柱の崩壊の計算と実験

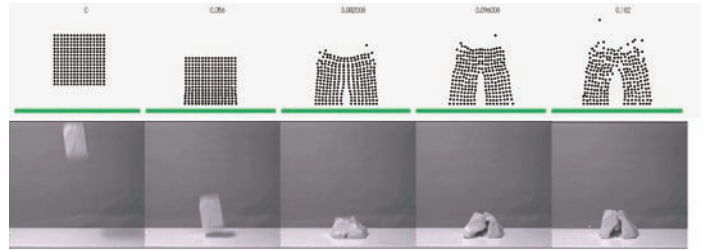


図-3 豆腐の落下の計算と実験

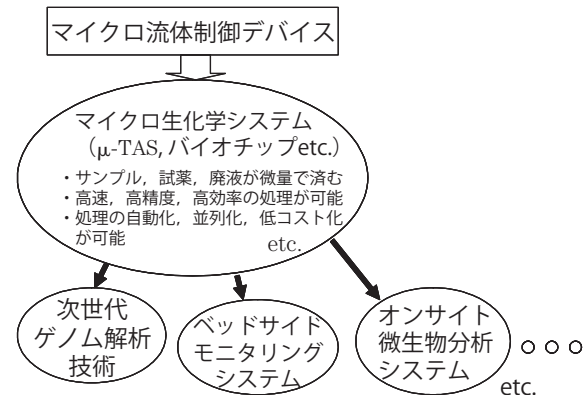


図-4 マイクロ生化学システム

舶海洋工学, 機械工学, 化学工学などの分野でも使われるようになってきた。手法開発に関する基礎研究や, 適用の対象を広げていくような応用研究がさまざまな分野で世界的に活発になってきている。

粒子法によるマイクロ生化学のためのマルチフィジクスシミュレータ

ところで, 半導体微細加工技術を用いたマイクロ生化学システムの研究開発が盛んに行われている。マイクロ流路, マイクロバルブ, マイクロポンプなどのマイクロ流体制御デバイスを基板上に配置し, 連続的あるいはバッチによる生化学反応のプロセスをマイクロスケールで実現するもので, (1) サンプル, 試薬, 廃液が微量で済む, (2) 高速, 高精度, 高効率の処理が可能, (3) 処理の自動化, 並列化, 低コスト化が可能, といった利点を持つ。その応用には, 次世代ゲノム解析, ベッドサイドモニタリングシステム, オンサイト微生物分析システム等, さまざまに考えられている(図-4)。

マイクロ流れでは通常のマクロな流れとは性質が異なる。たとえば, 2種類の流体が接している状態ではスケールが小さくなるにつれて界面における表面張力が相対的に大きくなる。また, マイクロバルブなどでは流路の変形を利用するものがある。そこで, マイクロ流れにおける界面の大変形や流れと流路の変形を同時に計算するために, MPS法を用いたマルチフィジクスシミュレータの開発を行っている。マルチフィジクスとは, 流体力

学と固体力学というような異なる物理現象を同時に扱うことを意味しており, マイクロ生化学システムのシミュレーションには不可欠の機能である。

計算例

混じらない2種類の流体を用いたマイクロ液滴の生成過程

マイクロスケールのY字型の単純な流路を作り, 一方から水相を, もう一方から有機相を流入させると, 合流部においてほぼ均一なマイクロ液滴を生成することができる。マイクロ液滴を生成すると2種類の流体の界面の表面積が相対的に大きくなるため, 溶媒抽出などの界面での化学反応を高速化することができる。しかしながら, 流路形状や流速などの流動条件を決める際に, マイクロ液滴の生成速度を速くしたい, あるいはマイクロ液滴の液滴径を制御したいなどの要求に応えるためには, マイクロ液滴の生成過程を精度良くシミュレーションでできることが必要である。

そこで, 図-5のY字型流路においてマイクロ液滴を生成するシミュレーションを行った²⁾。計算は3次元で流路は奥行き方向に100 μm の高さがある。水相を直線状に流し, 斜め上方から有機相を合流させる。図-6に計算結果の一例を示す。有機相が直線部に突き出てきて, やがて表面張力の作用によってちぎれ, マイクロ液滴が形成される。この過程は繰り返し生じ, ほぼ一定の大きさの液滴がほぼ一定の時間間隔で生成される。

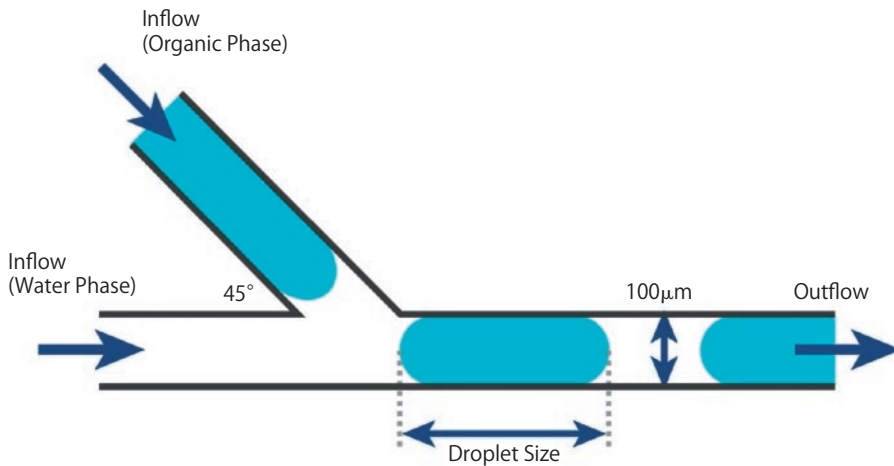


図-5 マイクロ液滴生成の計算体系

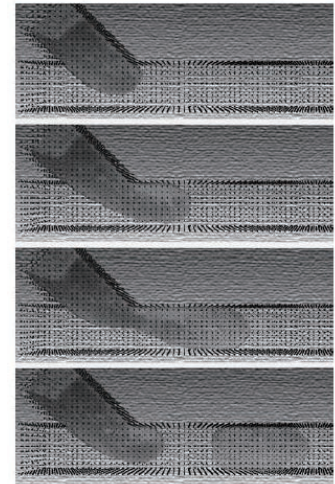


図-6 マイクロ液滴生成の計算結果

流入流量比 $R=Q_{org}/Q_{water}$ と液滴サイズ D の関係を図-7に示す。ここで、 Q_{org} は有機相の流量、 Q_{water} は水相の流量である。液滴サイズ D は液滴の先端と後端の距離である(図-5)。計算結果は水相の流量が $7\mu\text{l}/\text{min}$ の場合と $8\mu\text{l}/\text{min}$ の場合の2種類がある。図-7より、流入流量比 R の増加に伴い、液滴サイズ D は大きくなっている。これは実験データと定量的によく一致している。また、計算では水相の流量にあまり依存していないことが分かる。

細胞付着を伴うマイクロ流路内流れ

マイクロ流路による細胞培養の研究も行われている。毛細血管を模擬したマイクロ流路では、細胞に対する栄養分の供給や老廃物の排出およびマイクロ流路壁を介するガス交換を容易に行うことができる。そのため、再生医療のための細胞培養あるいは微生物の培養などへの利用が考えられている。シミュレーションとしては細胞の付着による流路閉塞を予測することが重要であり、その場合には細胞付着による流路形状の変化が計算でき、その流路形状の変化による流れの変化を計算し、さらにそれがもとの細胞付着に及ぼす影響を考慮できなければならない。粒子法においては、流体は移動する粒子として、壁は固定された粒子として計算するので、細胞付着は細胞に相当する粒子を付着によって壁粒子に変化させることで簡単にモデル化できる。逆に付着した細胞が離脱する場合には壁粒子から細胞粒子に戻せばよい。

生物の細胞を用いた実験およびこれに対応する計算も行ったが、ここではポリスチレンビーズを用いた模擬実験に対する計算例を紹介する³⁾。ポリスチレンビーズでは形状、大きさ、表面の状態を均一にすることができ、実験の再現性も高い。200 μm の幅の矩形流路に1辺が

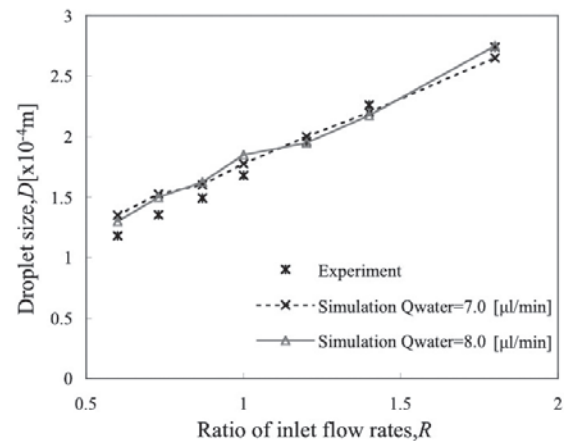


図-7 液滴サイズの比較

120 μm の角柱を障害物として配置し、上流から水とともに直径15 μm のビーズを流入させた。実験では奥行き方向の流路高さが200 μm だったが、計算は高さ方向を除いた2次元とした。ビーズの壁への付着のメカニズムは分からないため、ビーズ付着に対する計算モデルをいくつか仮定し、計算結果を実験と比較することで仮定した付着のモデルの妥当性を考察した。

図-8に仮定したモデルのうち典型的な2種類の計算結果および実験結果を示す。計算結果において、ピンク色の粒子が壁に付着したビーズを表している。2種類の付着モデルのどちらについても、まず、ビーズが壁に付着するにはビーズが壁に押し付けられる力が働く必要があるとした。次に、モデル1ではビーズの付着だけでなく、ある流体力の限界を超えたらビーズの離脱が生じるとした。一方モデル2では、ひとたび付着したビーズは離脱しないものとした。モデル1の計算結果では、障害物から少し離れた上流および下流の流路壁に付着ビーズ

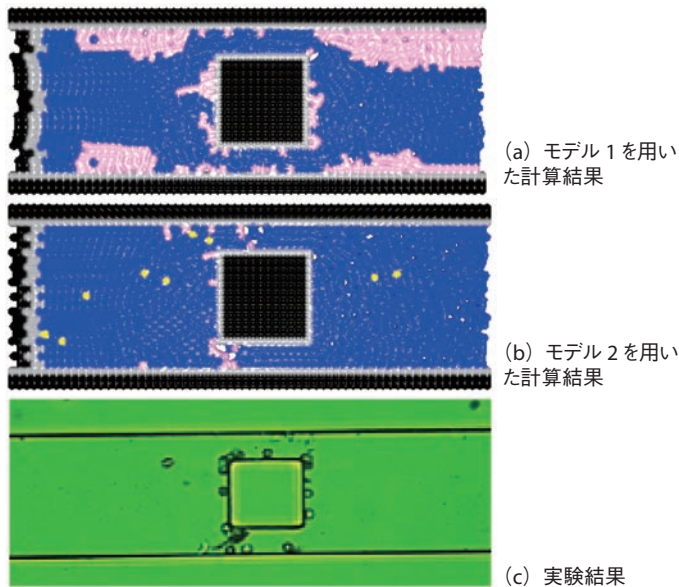


図-8 マイクロ流路におけるビーズの付着を伴う流れの計算と実験

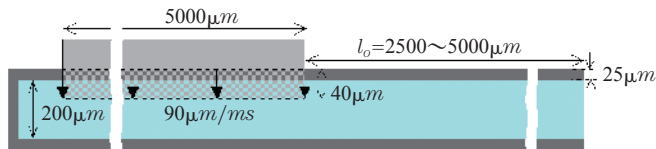
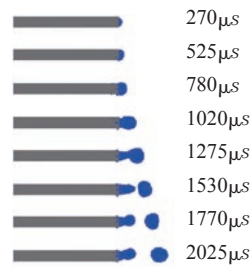


図-9 マイクロ液滴の射出の計算体系

の蓄積が見られる。一方、モデル2の計算結果では、障害物の上流側の流路が狭くなる場所に集中して付着が生じている。実験でも障害物にビーズが付着し、特に流路が狭くなる場所に集中している。したがって、モデル2が実験をよく再現する結果を与えており、ビーズの付着モデルとして妥当であるといえよう。

管の変形によるマイクロ液滴の射出

柔らかいマイクロチューブをピストンで押すことによりチューブの端からマイクロ液滴を射出することができる。この問題では固体であるマイクロチューブの変形と流体の流れの2種類の物理現象を同時に扱う必要がある。実験において、マイクロチューブの内径は $200\mu\text{m}$ 、肉厚は $25\mu\text{m}$ 、ピストンの幅は $5000\mu\text{m}$ 、押し下げのストロークは $40\mu\text{m}$ 、押し下げ速度は $90\mu\text{m}/\text{ms}$ である。したがって、ピストンの押し下げは $444\mu\text{s}$ で完了する。ただし、ピストンとチューブ端との距離に関してこの実験を報告している論文に記載がないため、計算ではパラメータとして $2500\sim 6500\mu\text{m}$ の範囲の値で計算した。もう一方のチューブの端については、十分な長さをとった先に水槽に接続したとあり、計算では閉じた流路とした(図-9)。マイクロチューブの物性も不明であり、ヤング率 1.5MPa および 3.0MPa の2種類で計算した。計算

図-10 マイクロ液滴の射出の計算結果(出口側管長 $6500\mu\text{m}$ 、ヤング率 3.0MPa)

は3次元である⁴⁾。

出口側管長 $6500\mu\text{m}$ およびヤング率 3.0MPa の場合の計算結果を図-10に示す。 $500\mu\text{s}$ でチューブの出口から液体が出始め、 $1000\mu\text{s}$ では球形になっている。約 $1500\mu\text{s}$ で液滴はチューブ内の液体から分裂し、射出される。こうした挙動は実験で得られた画像とよく一致している。ここでの特徴は、ピストンの押し下げが $444\mu\text{s}$ で完了しているにもかかわらず、液滴の射出はそれよりもはるかに遅れていることである。たとえば、 $500\mu\text{s}$ でもまだ液体はチューブからほとんど出ていない。これは実験でも同じである。この理由はチューブが大きく変形をするためである。ピストンを押し下げることによって、そこにあった液体は排出される。しかしながら、チューブのほかの部分膨らむことでこの排出された液体を保持し、チューブ出口には液体が出てこない。その後、膨らんだチューブが徐々に元に戻ることでゆっくりと液体が射出される。ちなみに、出口側管長を短くした計算では、変形で保持できる液体が少なくなるため、射出が早くなる。また、チューブの変形を考慮しない計算では、ピストンの押し下げを完了した時点でその分の液体はすべて排出され、本計算とはまったく異なる結果が得られる。

コードの公開

なお、本研究で開発された粒子法によるマルチフィジクスシミュレータは非商用の目的に限定して公開する。2007年7月の時点では、表面張力を考慮した多相流3次元解析コードが公開されており、今後、固体との連成計算が可能なコードも公開する予定である。以下のアドレスからダウンロードできる。<http://mps.q.t.u-tokyo.ac.jp/~jst/download.html>

今後の展望

本稿では粒子法の紹介と、これをマイクロ生化学システムのマルチフィジクスの問題に適用した例を紹介した。粒子法はこれ以外にも原子炉の過酷事故解析、津波・土砂崩れ・洪水といった災害のシミュレーション、船舶に

対する波浪衝撃解析，固体高分子形燃料電池のガス拡散層内の混相流解析などに使われている。その中で，今後の研究の方向として，(1) マルチスケールシミュレーション，および，(2) 物理ベースコンピュータグラフィックスの2点について以下に展望を述べたい。

マルチスケールシミュレーション

本稿で紹介した MPS 法などの粒子法は連続体力学の偏微分方程式を計算するための方法である。一方，分子の運動を計算する分子動力学も，多数の粒子の運動を計算するというところは共通している。分子動力学において運動エネルギーとポテンシャルエネルギーを加えた全エネルギーをハミルトニアンとして定式化し，これにシンプレクティックスキーム（ハミルトニアンのシンプレクティック性を保存する時間積分スキーム）を適用することでエネルギーの保存性に優れた計算を行う方法が開発されている。連続体力学を扱う粒子法においても，連続体力学のハミルトニアンから離散化された粒子のハミルトニアンを導き，これにシンプレクティックスキームを適用することで同様にエネルギーを精度よく保存することができる⁵⁾。また，分子動力学における分子間力は，連続体の物性として固体力学においてはヤング率に，流体力学では表面張力や濡れ性に現れるが，連続体力学の粒子法においてヤング率や表面張力の具体的な計算モデルを粒子間力として構築することができる。そのため，将来は分子動力学とマクロな連続体力学の粒子法を統一できるのではないかと。もちろん，空間スケールでナノメートルとメートルでは 10^9 の違いがあるので，マクロな現象まで分子動力学で解くことは非現実的である。そこで，スケールアップを適切にモデル化しながらすべてのスケールに対して解析可能な計算手法群を用意するのが現実的かもしれない。

物理ベースコンピュータグラフィックス

映像制作ではリアリスティックな映像を効率的に作り出すことのできる技術が求められている。物理ベースコンピュータグラフィックスとは，物理法則に従ったシミュレーションをすることによって効率的にリアリスティックな映像を作ろうとするものである。流体の複雑な運動を映像化するとして，もちろんデザイナーが手で描いていくことも可能であろうが，シミュレーション技術が発達している現状においては，物理現象に忠実なシミュレーションを用いる方が効率的である。米国では物理ベースコンピュータグラフィックスの研究が盛んであり，最新の研究成果が映画に取り入れられている。しかしながら，そこで用いられているのは格子を用いる従来の手法が



図-11 粒子法シミュレーションに基づいて描かれた画像

多く，ここで紹介した粒子法はまだほとんど使われていない。粒子法は水面の複雑な挙動，固体の大変形や破壊，およびマルチフィジクスが扱えるシミュレーション手法であり，物理ベースコンピュータグラフィックスに適している。

図-11 は粒子法による流体シミュレーションに基づいたコンピュータグラフィックスの例である。コップに水を注いでいる画像だが，コップ自体は描いていない。水の運動を粒子法で計算し，その結果に基づいてポリゴンを生成し，フォトリアリスティックな画像を作っている。液滴や気泡も特別なモデルを用いて計算している。また，粒子法シミュレーションに GPU を利用する研究がある⁶⁾。比較的安価な GPU によって CPU よりもはるかに高速なシミュレーションが可能になる。

謝辞 本研究は独立行政法人科学技術振興機構の戦略的創造研究推進事業として実施されている。

参考文献

- 1) 越塚誠一：粒子法，丸善（2005）。
- 2) 原田隆宏，鈴木幸人，越塚誠一，荒川貴博，庄子習一：MPS 法を用いたマイクロ混相流 3 次元解析，日本機械学会論文集 (B)，73，pp.437-444（2007）。
- 3) 鈴木幸人，小石川雅紀，越塚誠一，岡本拓士，金子直嗣，高松敦子，藤井輝夫：MPS 法によるマイクロ流路内細胞付着流れのシミュレーション，日本機械学会論文集 (B)，72，pp.2109-2116（2006）。
- 4) 鈴木幸人，大野浩誠，越塚誠一：MPS 法によるマイクロディスペンサーのシミュレーション，日本機械学会論文集 (B)，73，pp.981-988（2007）。
- 5) 鈴木幸人，越塚誠一：非線型弾性体に対する粒子法の開発，Trans. JSCES, Paper No.20070001（2007）。
- 6) 原田隆宏，越塚誠一：SPH における壁境界計算手法の改良，情報処理学会論文誌，Vol.48, No.4, pp.1838-1846（Apr. 2007）。

（平成 19 年 7 月 19 日受付）

越塚 誠一 koshizuka@q.t.u-tokyo.ac.jp

東京大学教授。1984 年東京大学工学部原子力工学科卒業，博士（工学）。原子炉の伝熱流動，数値流体力学，計算力学，物理ベース CG の研究に従事。http://mps.q.t.u-tokyo.ac.jp/~koshizuka/koshi_j.html

鈴木 幸人 y_suzuki@mps.q.t.u-tokyo.ac.jp

東京大学研究員。1988 年東京都立大学理学部数学科卒業。（株）芙蓉情報センター（現みずほ情報総研（株））に入社。科学技術計算の研究と業務に従事。