

粒子法 ～つぶつぶが織りなす真の世界～

蟹江 慧¹・松岡 毅²

2011年3月11日の東北地方太平洋沖地震は甚大な被害をもたらしただけでなく、人々に恐怖を植え付けた。その被害の要因は主に津波であり、それ以来、津波災害のシミュレーションをメディアなどで見かける機会が多くなり、その必要性や将来性を感じるようになった。

流体力学のコンピュータシミュレーションでは、連続的な情報を扱うことが困難なため、対象を『離散化』する必要がある。離散化とは、連続的な現象を有限の点で表現することである。たとえば、動画も複数の画像情報から成り立っている。細かく離散化するほど滑らかな動画になるが、その分、情報量も多くなる。離散化の方法には、空間を格子状に細かく区切る格子法と、流体を複数の粒子に分解する粒子法がある(図1)。前者の格子法の利点は、煙のように渦巻くような動きの表現を比較的得意とする点で、今回紹介する粒子法の利点は、流体の飛沫などの自由表面の激しい動きを伴う現象や界面の複雑な動きを伴う混相流の解析を得意とする点である。これらの現象を格子法で扱うことは格子生成が煩雑になるため一般的に困難である。粒子法はもともと銀河系の衝突などの宇宙物理学の問題でみられる流れを扱う手法として開発されたが¹⁾、水や遅い空気のような流れを扱う手法としてMPS (moving particle simulation) 法が東京大学の越塚らにより考案され²⁾、さらに、商品化されている。本稿では、近年注目を集めている新しいシミュレーション手法であるMPS法に関して紹介する。

MPS法で用いる『粒子』は、計算のために導入した仮想的な考えであり、実際の水分子ではない。繰り返しになるが、大きな流体を解析するために分割した(離散化した)小さな粒子である。つまり、一般的にこの粒子数が少なければ低精度な解析になり、多ければ高精度な解析になる。粒子数が多ければそれだけ計算時間もかかる。さらに、この粒子一つひとつに粘性などの物性値や質量

保存則などの支配方程式が与えられる。MPS法では、ナビエ-ストークス方程式が適用されている。詳しい理論などは『粒子法入門(越塚誠一他)』を参照されたい。

MPS法は現在、津波以外にも幅広く利用され、防災分野、船舶分野、自動車分野、機械分野、化学工学分野などに適用されている。株式会社資生堂の横川らは、生産現場における乳液製造のシミュレーションを行い、攪拌現象のメカニズム解明を行っている³⁾。株式会社明治の神谷らは、武蔵野赤十字病院と共同開発した世界初の4次元嚙下(飲み込み)シミュレータを開発している⁴⁾。

さまざまな可能性を秘めているMPS法であるが、やみくもに計算をすればよいわけではないことを同時に強調したい。シミュレーションの品質を高めるための方法論として、V&V (verification and validation, 検証と妥当性確認)という考えが注目されている。『検証』とは、概念モデルと計算結果の差異を定量化する処理で、『妥当性確認』は現実世界と計算結果との差異を定量化する処理である。前者は、計算上の誤り(バグや入力データの誤り)がないかを検証し、後者は実験値との比較である。ただし、ここで気を付けたいのは、実験は手技者の実験誤差も含まれることから、必ずしも現実世界を正確に捉えているわけではないことである。つまり、『真の』現実世界の問題を解決するには、シミュレーションと実験の利点をうまく使って検証していく必要があると考える。

生物工学分野でも、大規模かつ莫大な費用が掛かるバイオリクター実験のコスト削減や、培養液中の微生物や細胞が流れる様子を分析する際に、MPS法はなくてはならない技術であると考えられる。微生物や動物細胞を用いた物質生産による食品・医薬品分野、新産業として期待される再生医療分野での細胞培養も例外ではない。特に、再生医療製品であるヒト由来細胞の大量培養は、まだまだ工業化が進んでいない。その課題に、細胞の播種・攪拌方法の最適化、コンタミネーション回避などがある。今後、MPS法によるシミュレーションが、課題解決の一助を担うと信じている。

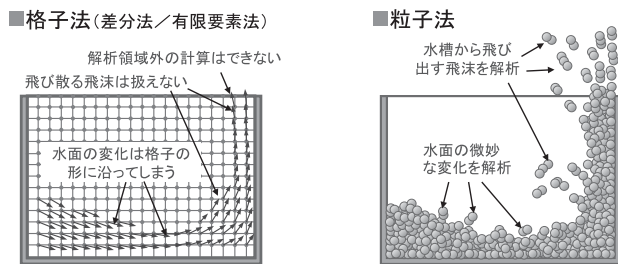


図1. 格子法と粒子法の違い

- 1) Gingold, R. A. et al.: *Mon. Not. R. astr. Soc.*, **181**, 375 (1977).
- 2) Koshizuka, S. et al.: *Nucl. Sci. Eng.*, **123**, 421 (1996).
- 3) 横川佳浩: 化学工学会第48回秋季大会, A304 (2016).
- 4) Kamiya, T. et al.: *Conf. Proc. IEEE Eng. Med. Biol. Soc.*, 2992 (2013).