

# バイオミメティクスにおけるシミュレーション活用事例

篠崎 明<sup>i</sup> 瀧見知久<sup>ii</sup>

## Numerical Simulation And Modeling In Biomimetic Subjects.

Akira SHINOZAKI Tomohisa TAKIMI

近年、生物の優れた機能を模倣して画期的な工業製品を開発するバイオミメティクスの手法が注目されている。生物を模倣するうえで原理を的確に把握することが重要であり、シミュレーションを活用した検討は有効と考えられる。バイオミメティクスにおけるシミュレーション活用促進の一助とするべく、モルフォ蝶の翅の青色の発色、蓮の葉の撥水性、といった生物の持つ機能に関してシミュレーションを実施した。本報ではこれらのシミュレーションの事例を紹介する。

(キーワード): バイオミメティクス, 構造発色, 撥水性材料, 自己組織化

### 1 はじめに

生物は生息環境に適合して生存競争を勝ち抜くため、進化の過程で非常に優れた生物機能を獲得してきた。それらをヒントにして工業製品の改良に取り組む動きが近年活発化してきており、バイオミメティクス（生物規範工学、生物模倣）と呼ばれている。

生物を「模倣」するうえで、生物機能を発現させている原理や物理法則を解明することが非常に重要である。特に、生きている生物と工業製品は前提条件に決定的な違いがある。生物は破損があったら代謝による自己修復が可能であり、この修復を前提とした仕組みで機能を発現している場合がある。一方、工業製品は一般に自己修復できないため、模倣元の生物に比べ頑丈に作らなければならない。材料の性質も異なってしまう。異なる物性、強度、加工性をもつ材料で同じ機能を発現するには、原理を理解した上で適切に応用しなくてはならない。

原理を正しく抽出するためのアプローチとして、実験による試行錯誤が挙げられる。しかし、多数の試作品を作成し、繰り返し実験することはコストが高くなりやすい。そこで、コスト削減のためのアプローチとしてシミュレーションの活用が期待される。

バイオミメティクス分野でのシミュレーション活用

促進を手助けしたいと考え、本報では当部で試行したバイオミメティクスに関連するシミュレーション事例として、第2章で構造発色、第3章で撥水性表面に関連するシミュレーションを紹介する。バイオミメティクス分野のシミュレーション活用の一助になれば幸いである。

### 2 構造発色シミュレーション

バイオミメティクスの一つの有名な事例として、モルフォ蝶の発色原理を応用した構造発色材料の開発が挙げられる。モルフォ蝶は南米生息の非常に綺麗な瑠璃色の翅を持つ大型蝶である。モルフォ蝶の瑠璃色の翅は色素を全く用いずに、太陽光の干渉だけで発色している。図1に示すように、モルフォ蝶の翅の表面には0.2 $\mu$ mほどの高さの本棚の棚が左右に飛び出たような構造（以下、本棚構造と記す）が並んでいる。この本棚構造からの反射光は400~550nmほどの波長の光が干渉によって強調される。これにより、青（青色の波長は450~495nm）系統の色を示す。このような構造による分光に由来する発色を構造色と呼ぶ。

<sup>i</sup> サイエンスソリューション部 デジタルエンジニアリングチーム チーフコンサルタント 博士（工学）

<sup>ii</sup> サイエンスソリューション部 デジタルエンジニアリングチーム コンサルタント 博士（理学）

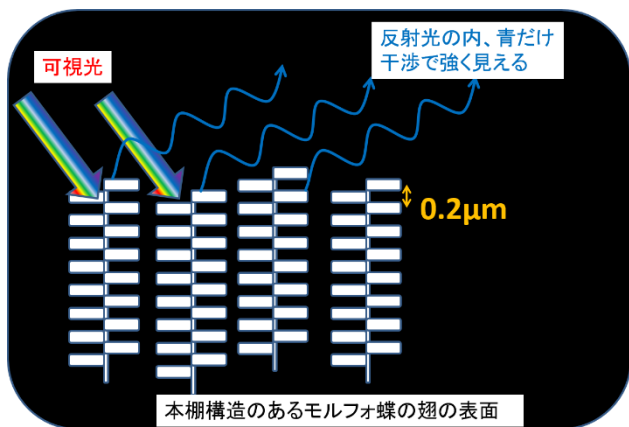


図1 モルフォ蝶翅表面の瑠璃色構造発色原理の簡単な模式図

さて、ここで「着色」という行為を考えてみる。着色において求められる重要な条件の一つが「どこから見ても同じ色に見える」という色のコントロールであろう。色素は吸収・放出する光の波長が固有に決まっており、光の放出方向に制限がない。よって色素は上記の条件を容易に満たすことが可能であり、広く活用されてきた。一方で構造色の場合は微細構造から反射した光同士の光路差に基づく干渉で色を出す原理であるため、多くの場合見る角度を変えると対応する光路差が変更され、干渉で強めあう波長が変わり、色が変化する。また、多くの場合一色ではなく虹色に見えたりする。例えばCDやDVDのレーベル面の反対側には微細な構造があり、この部分が構造色となっていて、見る角度に応じて様々な色彩を放つ。このように、構造色では上記の「どの角度から見ても同じ色に見える」という色のコントロールが難しく、色素に比べて、着色、という点で使用が難しかった。

しかし、前述したモルフォ蝶は、構造色であるにもかかわらず、「いろいろな角度から見ても瑠璃色」という驚くべき現象を見せている（真横など一部、瑠璃色にならない方向も存在する）。よって、モルフォ蝶の発色原理を応用すれば、構造色でも「どの角度から見ても同じ色に見える」ことが実現できると考えられる。もし、色素を用いない発色製品が開発できたとしたら、そのメリットとして、色褪せない、環境負荷が低い、省エネ性能が高いなどが期待され、複数の企業でモルフォ蝶を参考にした構造色に関連した工業製品の開発が進められている。近年では、実際に複数の日本企業で構造発色材料が開発され、製品化され

ている。（一方で近年ではコロイド粒子を用いた単色発色構造色の研究も進展している。付録1.）

モルフォ蝶がどのようにして「いろいろな角度から見ても瑠璃色」を再現しているかという点、「規則性」と「乱雑性」といった、相反する要素が、絶妙に調整され、以下のような機能が両立しているためと考えられている。

1. 特定の色の干渉を導く「規則性」
2. 広い角度で同じ色に見せる「乱雑性」

図2に4つの本棚構造を示した。一つの本棚においては棚が規則正しく並んでおり、この規則性により青系色の光を選択的に干渉させる。一方、本棚の並びには乱雑性があり、例えば、本棚の高さは均一ではなく、一つ一つ異なる。この乱雑性が、広い角度で同じ色を示すことに寄与している。

規則性と乱雑性を構成する各々のパラメータの影響を調べ、把握することは、構造色を設計するうえで重要であろう。しかし、多くの試作品を作り、試行錯誤的に実験のみでパラメータの影響を調べるのは高コストになりやすい。検討のコストを下げるために、シミュレーションを活用した検討が有用であろう。

本報ではモルフォ蝶の発色機構をCOMSOL Multiphysics®を用いて解析した。COMSOL Multiphysicsは主に有限要素法に基づいた幅広い物理現象に対応可能なマルチフィジックスソフトウェアであり、今回の光学のシミュレーションには、COMSOL Multiphysicsの波動光学モジュールの周波数領域モードを活用した。

COMSOL Multiphysicsに実装されている計算手法である周波数領域モードでは周波数固定の定常計算が可能である。また、有限要素法に基づいているため、四面体（三次元）や三角形（二次元）の非構造メッシュを適用することが可能であり、複雑な形状を正確に再現することができる。構造発色現象において解析対象となるのは多くの場合、可視光領域であり、過渡的な色の変化よりも定常的に見える色についてである。また、反射表面は複雑な形状になりうるため、COMSOL Multiphysicsの周波数領域モードで可視光領域に限定した定常計算、形状再現性の高い非構造メッシュによる空間分割が、計算負荷の低減や計算精度の担保に有効であると期待できる。以下では実

施した計算事例の詳細を紹介する。用いた COMSOL Multiphysics の version は 5.4 である。

## 2.1 計算の詳細

モルフォ蝶の翅の発色機構の確認を目的として本棚構造の対称性や棚の長さの組み合わせを変更した 4 種類の基本構造 (図 2) を用意する。左右の棚の長さが同じで中央に対して左右対称の配置となる構造を「対称等長棚」、左右の棚の長さが同じで中央に対して左右非対称の配置となる構造を「非対称等長棚」、上部の左右の棚の長さを変えて、中央に対して左右対称の配置となる構造を「対称樹木棚」、上部の左右の棚の長さを変えて、中央に対して左右非対称の配置となる構造を「非対称樹木棚」と命名する。これらの本棚形状 2 つを 1 つのユニットとして図 3 のように配置し周期境界条件を設けて計算領域を設定

する。本計算では 2 つの本棚形状の配置方法を 2 種類設定した。まず、1 種類目として図 3 (左) のように全く同じ 2 つの本棚形状を同じ高さにそろえて配置して計算領域を設定した。この種類の計算領域は 4 種類の本棚形状の各々に対応して 4 領域用意し、各計算領域名は構成する本棚形状と同じ名前とした。もう 1 種類として図 3 (右) のように同じ形状を高さをずらして配置して基本計算領域を設定した。これは「非対称樹木棚」に対してのみ設定し「オフセット」という計算領域名をつけた。「オフセット」の状態がこれらの中でもっとも不規則な状態であり、広い角度での青色再現性が期待される。計算領域は 2 種類の配置方法を合計して 5 領域用意した。翅の棚構造を構成する物質の屈折率は複素数で  $1.56+i0.06$  としている。ここで、 $i^2 = -1$  である。空気の屈折率を 1 とした。

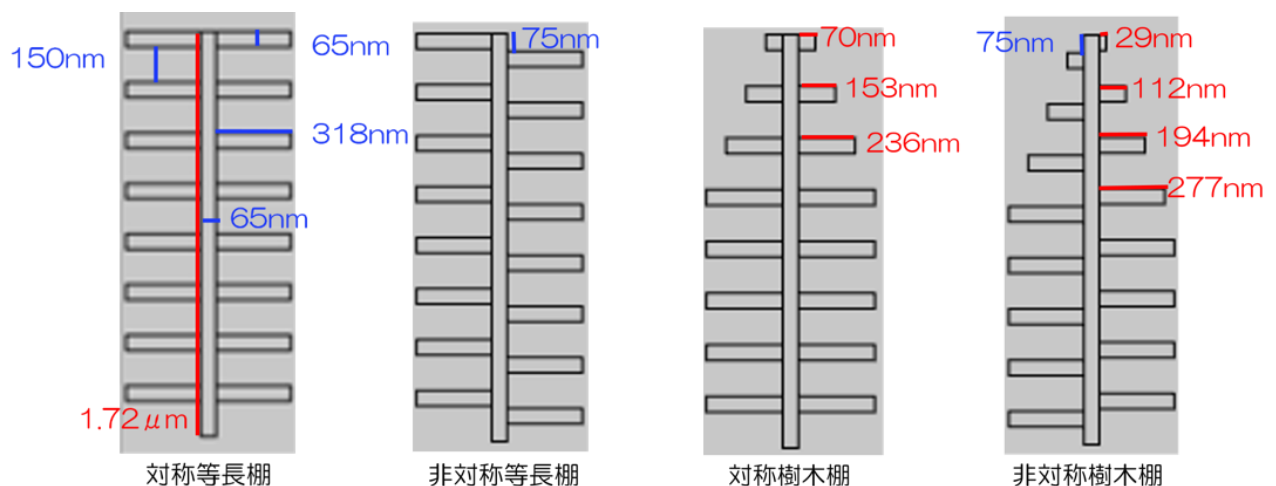


図 2 基本構造として用いるモルフォ蝶の 4 種類の翅の本棚構造

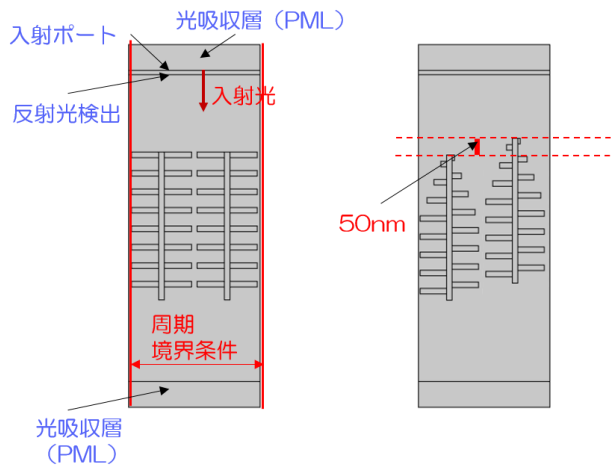


図3 基本となる本棚形状2つを配置して構成される計算領域。(左) 同じ本棚形状を高さを変えて配置するもの。(右)「オフセット」計算領域。「非対称樹木棚」2つを50nmだけ高さをずらして配置して設定した(右図においては、ずれた高さを誇張して描画している)。

これらの5つの計算領域において真上から光をあてて真上へ反射した光の強度の波長依存性を計算した。計算結果を図4に示す。最も規則性の高い「対称等長棚」が他の条件に比べて最もピーク波長における

光強度が高い。「対称等長棚」と「非対称等長棚」、「対称樹木棚」と非対称樹木棚を比較すると、左右非対称にすることで短波長の光に変移することが伺える。ある一つの特定方向にだけ着目すれば規則性の高い「対称等長棚」がもっとも青色を強くみせているようである。次に角度依存性を調べるため、真上からあてた光が散乱方向の変化に対してどのように強度を変化させるか計算した。ここでは波長は青色の490nmに固定し、遠方場計算で電場の強さを計算した。結果を図5に示す。最も乱雑な「オフセット」条件が角度変化に対し変化が緩やかであるように見える。他の計算領域では青色の強く見える角度、見えない角度が明確に分かれる結果となっており、角度による違いが大きい。これらのことから広い角度で同じ色に見せるためには「オフセット」形状のような不規則性が重要になることがわかる。しかし、角度変化が緩やかな一方で強度は弱くなる。いろいろな角度において同じ色を再現するには形状の規則性と不規則性が絶妙にバランスされる構造が重要であることがわかる。

現状では矩形の棚形状に基づいて計算を実施したが矩形以外にも、棚の角部を丸めた形状などの影響も興味深く、今後課題としてあげられる。

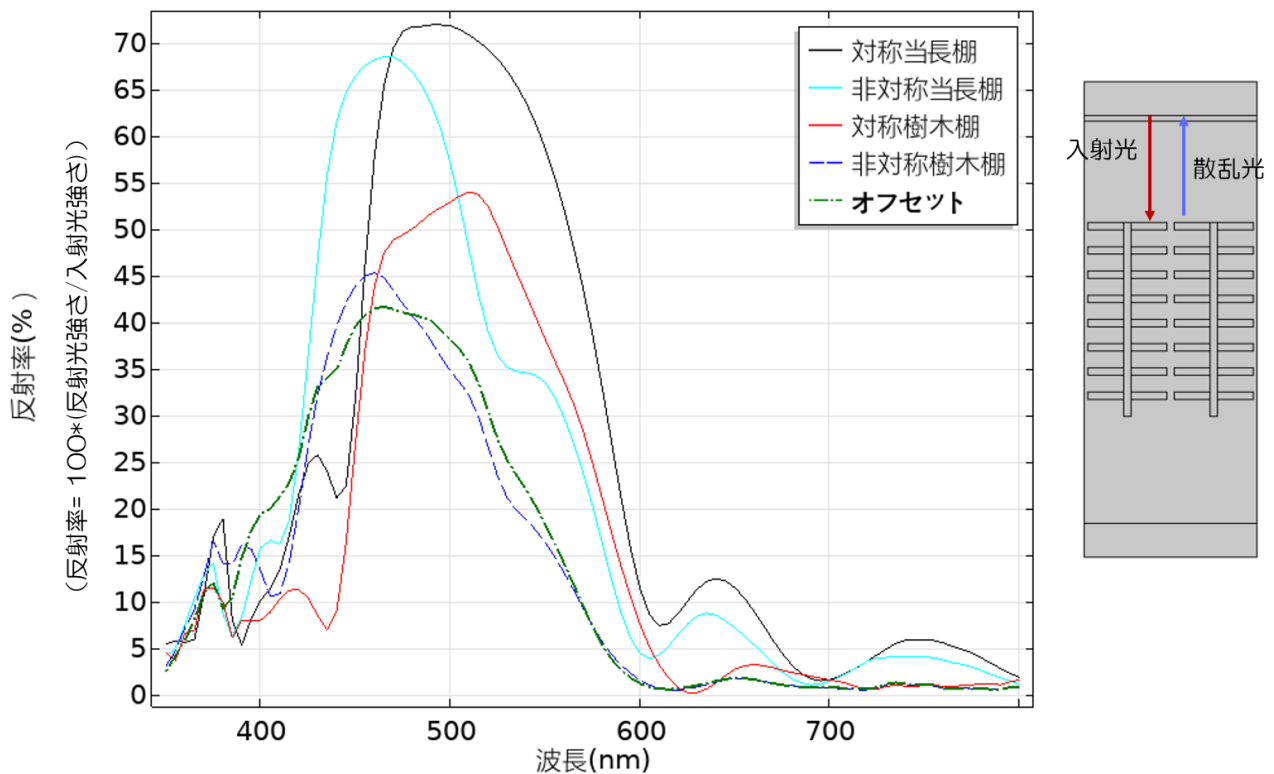


図4 各基本計算領域における真上へ散乱する光の強度(反射率)の波長依存性。

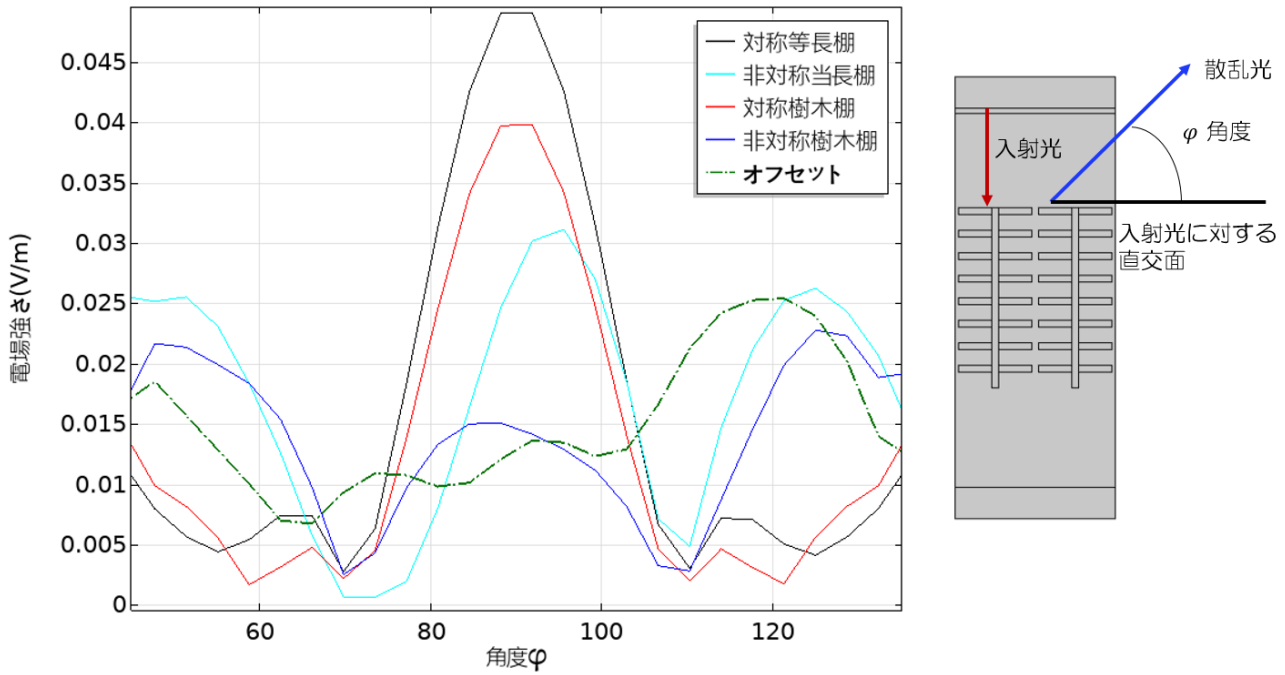


図5 真上から入射した波長 490nm の反射光強度の散乱角度依存性

### 3 撥水表面に関するシミュレーション

蓮の葉の表面には微細な凹凸構造がある。この微細構造により、平面状態であった場合に比べて強い撥水性が発現する。これはロータス効果と呼ばれる。蓮の葉の微細構造の模倣により撥水性を制御する手法がヨーグルトの蓋、信号機の点灯部の表面、傘の表面などに活用され、“液が濡れにくい表面”を実現している。

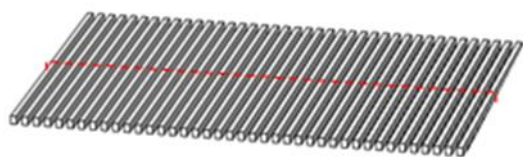
微細構造による撥水性の発現の原理の検証や微細構造の形状最適化に関する検討は実験によるものが多く、実験が先行しているように見受けられる。シミュレーションによる検討では第一原理や分子動力学が用いられることが多いように見受けられる。一方で、マクロな観点からの連続体としてのシミュレーションを用いた検討は、公開されている情報を著者が調べた限り、見当たらない。微細な凹凸構造がナノサイズになる場合があり、連続体近似が成り立たなくなる領域になることが連続体としてのシミュレーションが行われていない理由の一つと考えられる。しかし、マイクロサイズの凹凸構造で撥水性が発現する事例も報告されている<sup>1)</sup>。常温常圧環境下

ならばマイクロサイズは連続体近似が成り立つ領域である。このことから、連続体のシミュレーションが活用できる可能性もあると考え、以降では Navier-Stokes の式と連続の式を基礎式としたマクロな観点からの流体シミュレーションにより、微細構造による撥水性の発現が再現されるかを調べる。

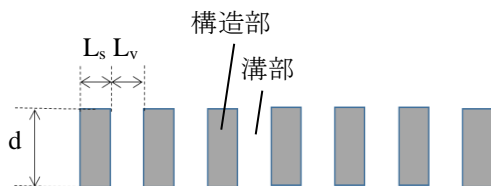
#### 3.1 解析条件

図6 (a) に示す平面及び規則的な溝（凹み）を持つ形状の断面（図中の赤点線）を切り出した、図6 (b) に示す2次元のモデルにより計算を行う。図6 (c) のように溝のある面上に矩形の液を配置したものを解析の初期状態とする。実際の解析モデルでは図6 (d) のように対称性を利用して液の中心を通る面に対称境界を設定する。また、図中の上面と右面及び図6 (e) に示す溝部底面の解析領域の境界は大気開放状態を想定し、圧力を1気圧で固定する。壁面はすべり無しとし、静的接触角を指定する。解析領域内の初期条件は常圧を想定し、1気圧とする。解析にはオープンソースソフトウェアの OpenFOAM®（バージョンは v1712）を用いた。ソルバーには非圧縮性の二相流（気液）を計算する InterFoam を用い

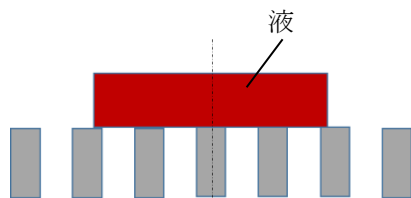
た. 気液界面の計算には VOF (Volume of Fluid) 法が用いられている. 非定常計算を行い, 初期形状から液が安定な形状になるまで計算を行った.



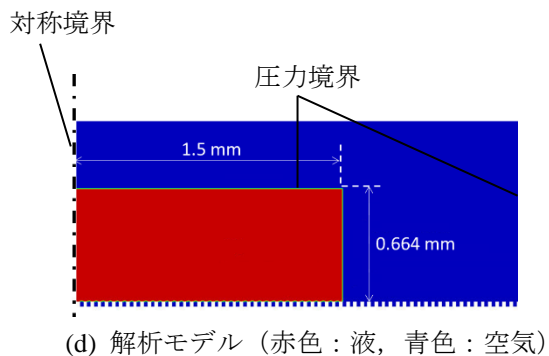
(a) 解析対象の凹凸構造



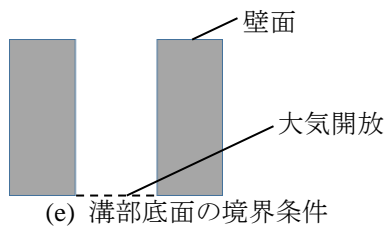
(b) 解析モデルの凹凸構造



(c) 解析の初期状態の想定



(d) 解析モデル (赤色: 液, 青色: 空気)



(e) 溝部底面の境界条件

図 6 解析モデル

### 3.2 撥水性発現の確認

図 6 (d) の解析モデルにおいて, 表 1 に示すように溝部の幅 ( $L_v$ ) を  $20\mu\text{m}$ , 構造部の幅 ( $L_s$ ) を  $20\mu\text{m}$ , 溝部の深さ ( $d$ ) を  $40\mu\text{m}$  とした形状を用いて, 微細構造による撥水性がシミュレーションで再現されるか確認する. 解析に用いる流体 (液と大気) の物性

値を表 2 に示す. ここで, 構造物の表面と液の接触角は  $100$  度とした.

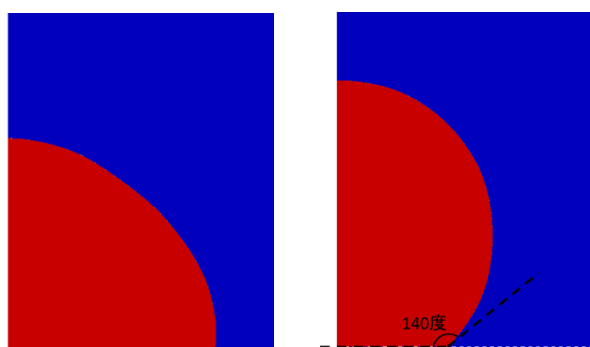
表 1 解析ケース 1 の溝形状

	溝部幅 ( $L_v$ ) [ $\mu\text{m}$ ]	構造部幅 ( $L_s$ ) [ $\mu\text{m}$ ]	溝部深さ ( $d$ ) [ $\mu\text{m}$ ]
ケース 1	20	20	40

表 2 流体の物性値

	密度 [ $\text{kg}/\text{m}^3$ ]	粘度 [ $\text{Pa} \cdot \text{s}$ ]	接触角 [度]
液	1000	$1 \times 10^{-3}$	100
大気	1	$1.48 \times 10^{-5}$	

解析結果として安定状態の液形状を図 7 に示す. なお, 比較のため溝部が無い平面状に配置した液の安定形状も示す. 解析結果より VOF 値が 0.5 の位置を指標にして液と構造物表面の接触線を作図して接触角を求めた. 溝がない平面の状態では設定した接触角  $100$  度となるように液面形状ができています. 溝がある場合, 設定した接触角よりも撥水に (接触角が大きくなる) なっており, 微細構造による効果, すなわちロータス効果, がシミュレーションでも再現されることが確認できる. 既報の実験結果<sup>2)</sup>では図 6 と同じ溝形状に水を置いたときに形作られる液面の接触角が  $140 \sim 150$  度になると報告されている. シミュレーションの結果は目分量による作図から求めており, おおよその値となるが実測に近い結果となっている. このことから本シミュレーションでロータス効果を再現できていると考えられる.



(a) 溝無し

(b) 溝あり

図 7 ケース 1 の液の安定形状

### 3.3 構造物の表面と液の接触角の影響

図 6 (d) の解析モデルにおいて、表 3 に示すように構造物の表面と液の接触角を変更した条件における撥水性の発現の様子を調べる。接触角が 90 度より小さい親水条件では溝部に液が入り込む。これを防ぐため図 6 (e) に示した溝部底面の境界条件を圧力固定から壁条件（流体の流入流出が無い条件）に変更する。この変更により初期状態で存在する空気が溝部に閉じ込められ、液の入り込みが抑制される。上記以外の境界条件、流体物性等は 3.2 節に行った解析に従う。なお、ケース 2 はケース 1 と同じ接触角であるが、溝部の空気の閉じ込めがある条件において再度計算を行う。

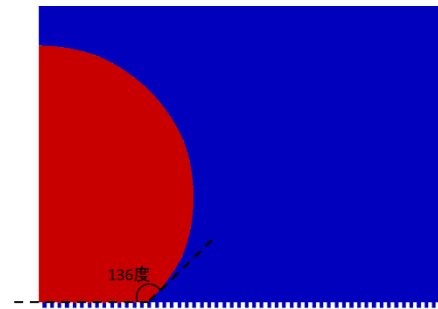
表 3 解析ケース 2~5 の構造物の表面と液の接触角

	接触角
ケース 2	100 度
ケース 3	80 度
ケース 4	60 度
ケース 5	40 度

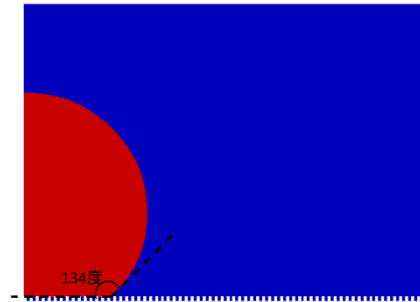
図 8 に液の安定形状を示す。撥水性発現の強さの評価として図 9 に、構造物と液の接触角と、解析結果の液面形状より求めた液の接触線の角度、すなわち微細な溝構造の影響を考慮したマクロな接触角の関係を示す。ケース 2 の結果はケース 1 と同等と思われる。このことから、溝部の底面を壁面条件に変更したことによる撥水性発現への影響は少ないと考える。

ケース 2~ケース 5 のすべての条件で溝構造の影響による撥水性が発現している。ケース 3 からケース 5 では構造物の表面と液の接触角が変化するのに対応して微細構造によって発現する撥水性も大きく変化する。一方、ケース 2 と 3 では構造物の表面と液の接触角の変化に対して微細構造によって発現する撥水性の変化が小さくなることが予測された。このことから、構造物の表面と液の接触角が異なると撥水性の発現の傾向が変わることが示唆される。

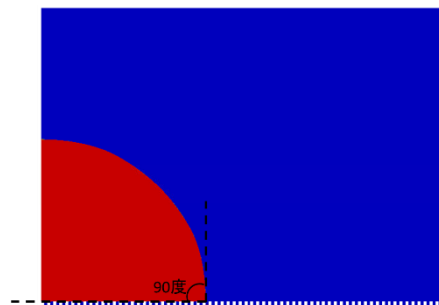
一般に接触角は構造物と液の種類によって変化する。所望の撥水性を得るためには構造物と液の組み合わせ毎に適切な微細構造を設計しなくてはならないと本結果からは考えられる。このような微細構造の設計において、今回行ったシミュレーションが活用できるものと考えている。



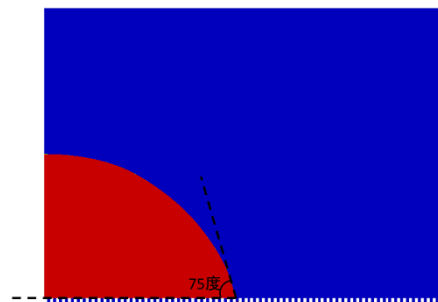
(a) ケース 2



(b) ケース 3



(c) ケース 4



(d) ケース 5

図 8 ケース 2~5 の解析結果

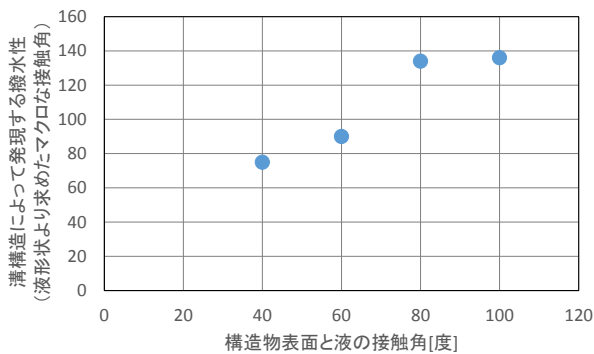


図9 構造物表面と液の接触角と撥水性発現の関係

#### 4 結び

バイオミメティクスを特徴づける最も大きな因子の一つは、自己組織化であろう。生物は常に外部から栄養を取り入れ、自分の体を構築しつづけている。一方で、工業製品は構造の自己生産は実施されない。身体構造の自己生産が生物の定義の一部であるように、「生きる」とは身体が常に変化することといえる。身体を自己生産可能な状態にするには、すぐに分解・生成が可能なように常温である程度不安定な物質で身体が構成されている必要があり、それは同時に外界の変化によって生産条件が大きな影響を受けることも意味する。そのため、生物の身体は全く同じ状態での再現は難しく、ある程度不規則な形状・状態にならざるを得ない。一方で生産メカニズムはある程度の規則性をもって実施される。よって規則性と不規則性がある程度の割合で混在しているのが生物の身体の特徴であり、その混在性が生物機能発現の鍵の1つとなっていると思われる。2章で紹介したモルフォ蝶のシミュレーションはその例ではないであろうか。そのような規則性と不規則性が混在しているような形状・状態に分析のアプローチをかけるには、泥臭いシミュレーションが非常に重要になる。また、不安定な物質を用いて実験をするにも実験条件に厳しい制約が要求される場合もあろうかと思われる。

本報はまだ簡単な初期的なシミュレーションを実施したに過ぎないが、読者諸氏の参考になれば幸甚である。

謝辞：ここで、千歳科学技術大学下村政嗣教授を始め、NBCI バイオミメティクス分科会会員の皆様方には平素からの議論、当分野における我々の活動へのご協力に深く感謝を申し上げる。

#### 付録1：球形コロイド粒子を用いた構造発色技術

近年では可視光の波長と同程度のコロイド粒子を生成してそこでの光の反射を利用した構造色の研究が進展している。コロイド粒子の形状を対称性のある球形にすれば、角度依存性を低くすることが可能である。また、発色したい色もコロイド粒子の半径を調整することで調整が可能である。ただ、多数必要とするコロイド粒子をどのように配置するかは重要なテーマであり、規則正しく配置すると複数のコロイド粒子からの反射光の干渉により虹色になり、一方でアモルファス状に乱雑に配置すると複数粒子による干渉効果は弱まり単色に近くなる。よってこの場合においてもコロイド粒子の配置の規則性と乱雑性の調整は重要なテーマとなり、シミュレーションを通じた試行錯誤が重要な役割を果たすことになる。

#### 引用文献

- 1) Anish Tuteja, Wonfae Choi et.al. : Robust omniphobic surfaces, Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America, 105 (2008) 18200-18205
- 2) 小室卓也, 永井香ほか: 表面構造と水接触角の関係に関する研究, 日本大学生産工学部第48回学術講演会講演概要, (2015) 511-514

COMSOL Multiphysics は COMSOL 社 (米国) の登録商標です。

OpenFOAM は ESI グループ OpenCFD 社 (英国) の登録商標です。