



徳島大学工学部研究報告

BULLETIN OF FACULTY OF ENGINEERING THE UNIVERSITY OF TOKUSHIMA

2003

No. 48

205560



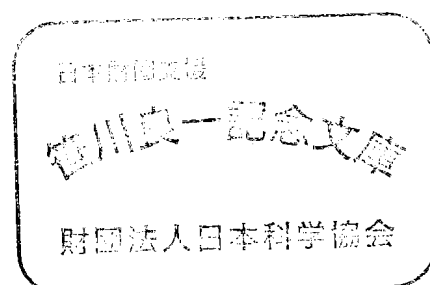
日文 701680942

徳島大学工学部研究報告



2003

No. 48



編集委員

野 地 澄 晴 (委員長)	生物工学科
滑 川 達	建設工学科
岩 田 哲 郎	機械工学科
金 崎 英 二	化学応用工学科
西 野 克 志	電気電子工学科
任 福 継	知能情報工学科
手 塚 美 彦	光応用工学科
岸 本 豊	共通講座
廣 瀬 義 伸	エコシステム工学専攻

Editorial Board

Sumihare NOJI (Chairperson)	Biological Science and Technology
Susumu NAMERIKAWA	Civil Engineering
Tetsuo IWATA	Mechanical Engineering
Eiji KANEZAKI	Chemical Science and Technology
Katsushi NISHINO	Electrical and Electronic Engineering
Fuji REN	Information Science and Technology
Yoshihiko TEZUKA	Optical Science and Technology
Yutaka KISHIMOTO	Applied Physics and Mathematics
Yoshinobu HIROSE	Ecosystem Engineering

平成15年 3 月20日 印刷

平成15年 3 月25日 発行

徳島大学工学部研究報告 第48号

編集者 徳島大学工学部
研究報告編集委員会

発行所 徳 島 大 学 工 学 部
〒770-8506 徳島市南常三島町 2 丁目 1 番地
Tel. 088-656-7304

印刷所 (有)八 木 印 刷
〒772-0001 鳴門市撫養町黒崎字松島

BULLETIN OF FACULTY OF ENGINEERING
THE UNIVERSITY OF TOKUSHIMA
No. 48, March, 2003

Faculty of Engineering, The University of Tokushima
2-1 Minami josanjima-cho, Tokushima 770-8506, JAPAN
Tel. +81-88-656-7304

目 次

研究トピックス

地形形成プロセスを考慮した水辺空間づくり

竹林洋史 (建設工学科) 1

自動車ボディ用アルミニウム合金の材料特性評価

堀川敬太郎, 吉田憲一, 坂巻清司 (機械工学科) 2

噴流による反応器内ガス混合の可視化解析

土屋活美 (化学応用工学科) 3

ヒト運動関連脳電位のウェーブレット変換による時間周波数可視化

川田昌武 (電気電子工学科) 4

ビジュアルイメージ指向設計に基づくプログラム自動生成方式

下村隆夫, 池田健司, 最上義夫 (知能情報工学科) 5

がんと低酸素の生体機能分子設計

永沢秀子, 宇都義浩, 堀 均 (生物工学科) 6

非線形光学特性を持つ微小球の光学特性シミュレーション

原口雅宣, 福井萬壽夫, 岡本敏弘 (光応用工学科) 7

バクテリアのコロニーパターン形成の数値モデルとその解析

坂口秀雄 (共通講座) 8

都市交通政策および環境政策の評価に関する研究

近藤光男, 廣瀬義伸 (エコシステム工学専攻) 9

総説・解説

フィルムシミュレーション実験による導電性ポリマーの電気化学的

ドーピング・脱ドーピング反応の解析

手塚美彦 (光応用工学科) 11

視覚障害者のための社会基盤整備について

末田 統, 井手将文 (エコシステム工学専攻) 19

公理論的場の量子論

長町重昭 (共通講座) 29

Finding Multiple Solutions of Nonlinear Equations Based on Newton Homotopy Method and Its Applications Akio Ushida (電気電子工学科)	43
平成 14 年度徳島大学工学部学部長裁量プロジェクト研究について 芳村敏夫 (工学部長)	57
平成 13 年度徳島大学工学部学部長裁量プロジェクト研究成果報告 高酸化活性を有する酸化鉄触媒の創製と複合化による高機能化 中林一朗, 森賀俊広, 村井啓一郎, 杉山 茂, 林 弘, 加藤雅裕, 富田太平, 寺尾博允*, 沼子千弥*, 小藤吉郎* (化学応用工学科, *総合科学部自然システム学科)	59
インプラント設計のためのユビキタスネットワーク型バーチャル マニファクチュアリングに関する研究 伊藤照明 (機械工学科)	69
高周波低電力バリア放電を用いた高性能ディーゼル排気ガス後処理装置の開発 木戸口善行, 三輪 恵, アリ モハンマディ, 中林一朗*, 森賀俊広*, 佐藤悌介** (エコシステム工学専攻, *化学応用工学科, **機械工学科)	75
遺伝子治療及び癌の免疫療法への応用に向けての細胞膜機能改変技術の開発 長宗秀明, 松木 均 (生物工学科)	83
平成 14 年度徳島大学工学部教職員研究報告一覧	1
平成 14 年度徳島大学大学院工学研究科修士論文一覧	26
平成 14 年度徳島大学大学院工学研究科博士論文一覧	33

BULLETIN OF FACULTY OF ENGINEERING
THE UNIVERSITY OF TOKUSHIMA

No. 48 (2003)

CONTENTS

Research Topics

Planning of Water Front on the Basis of Geomorphological Process

Hiroshi TAKEBAYASHI 1

Evaluation of Material Properties in Aluminum Alloys for Automotive Body Panels

Keitaro HORIKAWA, Kenichi YOSHIDA, Kiyoshi SAKAMAKI 2

Visual Analysis of Jet-Induced Gas Mixing in a Dual-Jet Reactor

Katsumi TSUCHIYA 3

Time-Frequency Visualization of Human Movement-Related Cortical Potential
using Wavelet Transform

Masatake KAWADA 4

Automatic Program Generation based on Visual Image-Oriented Design

Takao SHIMOMURA, kenji IKEDA, Yoshio MOGAMI 5

Molecular Design of Hypoxia-targeted Chemical Modifiers of Cancer Treatment

Hideko NAGASAWA, Yoshihiro UTO, Hitoshi HORI 6

Simulation of linear and nonlinear optical responses of microspheres with optical nonlinearity

Masanobu HARAGUCHI, Masuo FUKUI, Toshihiro OKAMOTO 7

Mathematical Model and Analysis of Bacterial Colony Pattern Formation

Hideo SAKAGUCHI 8

Evaluation of Urban Transport and Environment Policies

Akio KONDOU, Yoshinobu HIROSE 9

General Remarks

Analysis of Electrochemical Doping and Undoping Processes of Conducting Polymers
by Film-Simulated Experiment

Yoshihiko TEZUKA 11

Establishments of a social foundation for persons with visual impairment

Osamu Sueda and Masafumi Ide 19

Axiomatic Quantum Field Theory

Shigeaki NAGAMACHI 29

Finding Multiple Solutions of Nonlinear Equations Based on Newton Homotopy Method and Its Applications Akio USHIDA	43
 Project researches in Faculty of Engineering of the University of Tokushima in 2002	
Toshio YOSHIMURA	57
 Reports of Project researches in Faculty of Engineering of the University of Tokushima in 2001	
Fabrication of Iron Oxides with High Combustion Activity and Strategy for its Enhanced Performance by Hybridization Ichiro NAKABAYASHI, Toshihiro MORIGA, Kei-ichiro MURAI, Shigeru SUGIYAMA, Hiromu HAYASHI, Tahei TOMIDA, Hiromitsu TERAOKA, Chiya NUMAKO, and Kichiro KOTO	59
Studies on Ceramics Implant Design Using Virtual Manufacturing based on Ubiquitous Network Teruaki ITO	69
Development of a High Performance Aftertreatment System for Diesel Exhaust Using a High-frequency Dielectric Discharge Plasma Yoshiyuki KIDOGUCHI, Kei MIWA, Ali MOHAMMADI, Ichiro NAKABAYASHI, Toshihiro MORIGA, and Teisuke SATOH	75
Development of the Modification Techniques of Cell Membrane Function Aiming for the Application in Gene Therapy and Cancer Immunotherapy Hideaki NAGAMUNE and Hitoshi MATSUKI	83
 List of papers published by members of Faculty of Engineering, The University of Tokushima in 2002	
List of Master's theses of Engineering, The University of Tokushima in 2002	26
List of Doctor's theses of Engineering, The University of Tokushima in 2002	33

地形形成プロセスを考慮した水辺空間づくり Planning of Water Front on the Basis of Geomorphological Process

建設工学科 竹林洋史

1. はじめに

多様な生態系の保存・創生を目標とした河川の整備計画を作成する上で最も難しい問題が、目標とする河川像を描くことかと思われる。従来、多様な生態系を有する河川像として、過去の人為的インパクトの少ない時期の河川を設定し、河川整備計画を考えることが多い。しかし、土地利用形態が以前と異なる上に、ダム貯水池や砂防ダムなど水と土砂の流出特性をコントロールする河川構造物は既に建設され、市民の生活に不可欠なものとなっており、過去の人為的インパクトの少ない時期と同じような水と土砂の流出過程を復活させるのは困難である。さらに、過去の人為的インパクトの少ない時期の水辺空間は、非平衡系の地形形成プロセスのある一時期の水辺空間に過ぎず、それ以上に多様な物理環境を有する水辺空間が存在すると考えられる。では、どのような河川地形が生態系に対して多様な物理環境を提供できるのだろうか？非粘着性河床材料により形成された沖積河川については、網状流路がその一つの答えのように思われる。

2. 網状流路が創り出す多様性

図1は、川幅・水深比が異なり、無次元掃流力（河床材料の移動し易さを表す無次元量）が等しい二つの条件で、平面二次元の河床変動解析により再現された水深平均流速ベクトルの平面分布を示している。図において、ベクトル表示の無い部分は、砂州が水面から露出し、浮州となった領域（陸域）である。これによると、網状流路は、様々なスケールの流路と浮州から形成されていることがわかる。さらに、川幅・水深比が大きくなると、流路網がより複雑になることがわかる。図2は、浮州の面積と浮州の存在率（当該面積以上の面積を有する浮州の単位面積当たりの総数）との関係を示している。これによると、ある面積以下の浮州では、両者の関係がベキ乗則に従う領域が存在することがわかる。これは、網状流路を有する河道では、浮州の存在率と浮州の面積との関係が、自己相似フラクタルとなっており、ある面積以下の浮州が全て存在することを示している。

3. 水辺空間づくりへの応用

多様な生態系を保存・創生するには、様々な種類の動植物が一つの河道に生息する必要がある。様々な種類の動植物が一つの河道内に生息するには、様々な時空間スケールの物理環境が河道内に形成されていなければならない。網状流路は、このような要求を満たす水辺空間を提供できると考えられる。

一方、図1に示したように、網状流路の動態は、川幅・水深比を一つのパラメータとして変化する。これは、左右岸の堤防間距離、または低水路の護岸間距離を適切に設定するだけで、自然に河道内の物理環境が多様化し、多様な生態系が創生されることを示すと考えられる。

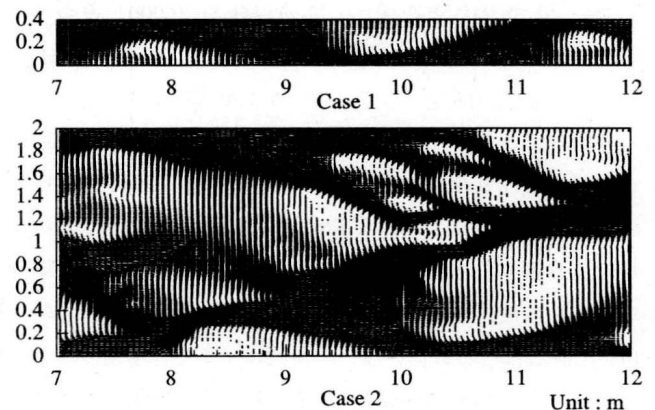


図1 水深平均流速ベクトルの平面分布

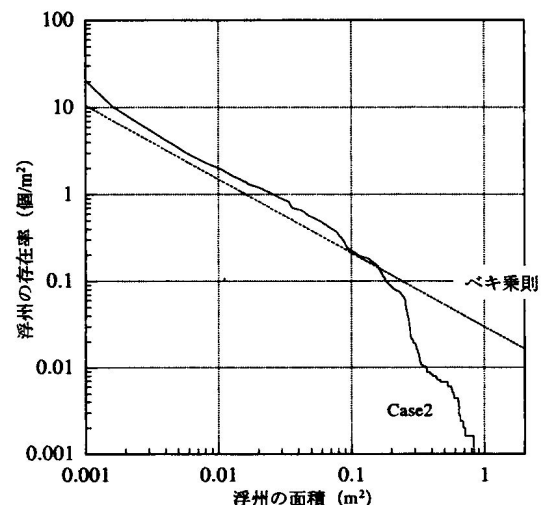


図2 浮州の面積と存在率との関係

自動車ボディ用アルミニウム合金の材料特性評価

Evaluation of Material Properties in Aluminum Alloys for Automotive Body Panels

機械工学科 堀川 敬太郎, 吉田 憲一, 坂巻 清司

1. はじめに

地球温暖化を防止するために二酸化炭素(CO₂)排出量の低減が全世界で急務の課題となっている。日本国内ではCO₂排出の約20%は自動車からとなっており、特にその削減要求が強い。自動車から排出されるCO₂量を低減する有効な方策の一つとして「車体の軽量化」が考えられるが、実際には、従来鋼材が使用されていた部位をアルミニウム合金に代替させる試みなどが行われている。自動車部材のアルミニウム合金化を図れば、軽量化とともに環境全体に与える負荷(LCA)も小さくなるとの試算もある。実用アルミニウム合金の中では、塗装焼付け時の熱履歴により強度が上昇する(ベークハード)、仕上げ後の表面に肌荒れ模様(ストレッチャーストレイン)が生じない、などの利点を活かしてAl-Mg-Si(6000)系合金が一部ボディ材に使用され始めている。しかしながらAl-Mg-Si合金は成形性(とくに曲げ性)が鋼材よりも低いという問題点を抱えており、ボディ用材料としては高級車などの限定的な使用に留まっている。したがって合金組成や熱処理の観点から自動車ボディ用として最適な材料特性を評価する必要があるといえるが、本合金の自動車ボディへの使用実績が少ないため、これまで系統的な材料特性評価は行われていないのが現状である。本稿では、自動車ボディ用のAl-Mg-Si合金に対して、成形性の一つの指標になるT4(溶体化処理後に自然時効)材の引張特性およびアコースティックエミッション(AE)を利用した変形・破壊のモニタリングなどを紹介する。

2. 引張性質に及ぼす合金組成および熱処理の影響

通常Al-Mg-Si合金の組成制御ではAl-1.2%Mg₂Si擬二元系合金をバランス組成として取り扱われる。バランス組成に対して、Si, Mgを過剰に添加される場合や時効硬化性の向上を目的としてCuが添加される場合などがある。これまで系統的にSi, Mg, Cu量を振り分けた9種類の合金を作製しT4引張特性を調査している。その結果、バランス組成からSi, Cu量が増加するに伴い延性が顕著に低下することが明らかになっている。破断面観察より、低延性の合金では破面の一部に必ず

れも粒界破壊がみられ、熱処理の過程で粒界に析出するSi系あるいはCu系析出相の存在が成形性を低下させる一因となると推定されている。一方、粒界析出相の形成については、溶体化処理後の冷却速度の違いによる影響も指摘されており、実現場でもその制御が重要となる。そこで溶体化処理後の冷却速度を水冷、空冷と変化させ同様なT4引張特性の評価を行った結果、水冷材と比較して空冷材の延性および強度が低くなることが明らかになった。空冷材の破面では、SiやCuを多く含む合金の場合、粒界破壊の割合が増加する傾向がみられた。溶体化処理後の冷却過程で粒界に形成されるSi系, Cu系化合物が延性低下に影響を及ぼしているものといえる。一連の結果より、高成形性を得るためには①バランス組成からSi, Cu量を過剰に添加しない、②冷却速度を遅くしない、などが結論づけられた。

3. AEを用いた変形・破壊の評価

AE法は材料内部を伝播する弾性波を利用した非破壊検査法の一つであり、変形中の材料内部の微視的な不均一割れの様子を捉えるのに長けている。前に述べた自動車ボディ用のAl-Mg-Si合金に対して引張試験中のAEをモニタリングしているが、破断の際に粒界破壊が観察される場合には、荷重-ひずみ曲線の最大荷重点付近において粒界亀裂の発生を表す100dB程度の高振幅AEが検知されることが判っている。破断時においても、粒界破壊を伴う場合には粒界亀裂の伝播を表す突発型AEが短時間に多く検知されることも明らかになっている。

4. おわりに

本研究は、社団法人軽金属学会の研究部会「粒界近傍の材料物性部会」において企業と大学との共同研究として行われているものである。H15年度からは、実用化に向けた「中強度アルミニウム合金の材料物性部会」として新たなステージに入る予定となっている。これまでに蓄積された機械的特性に関するデータ等をもとにして、耐環境性などの高い機能性も合わせ持つ自動車ボディ用材料の開発が次の課題として残されている。

噴流による反応器内ガス混合の可視化解析

Visual Analysis of Jet-Induced Gas Mixing in a Dual-Jet Reactor

化学応用工学科

土屋 活美

1. はじめに

環境に配慮した石炭・天然ガスの有効利用の観点から、最近、太陽熱を取り入れることで二酸化炭素を排出せずにメタノールを製造するプロセスの開発が提案されている¹⁾。メタノール変換プロセスにおいて重要なメタンの水蒸気改質反応は吸熱反応であり、その熱源に太陽熱を利用する場合、必要量の熱エネルギーを常に太陽熱によって賄えるとは限らない。そこで、改質器の途中に燃焼混合部を設け、部分燃焼用酸素を導入し未反応メタンの一部を燃焼させることにより、水成ガス生成に必要な温度を維持できる複合プロセスが考えられる。

本稿では、天然ガス改質用の燃焼混合器として妥当と思われる実装置形状と幾何学的に相似な小型実験装置を作製し、コールドモデル実験により得られたガス混合器内の流動に関する可視化解析結果を紹介する。

2. 実験装置および可視化法

ガス混合器として、主流（一次流）に対してジェット流（二次流）を一衝突噴流（impinging jets）および交差噴流（cross-flowing jets）を融合して一導入することで、混合促進および滞留時間増加を狙った。本研究では、二次流を2つのジェットに均等分割し、Fig. 1 に示すような装置形状で実験を行った。

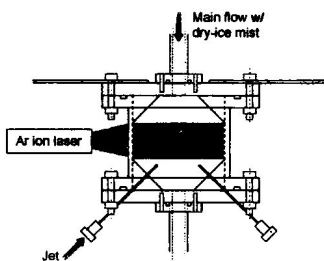


Fig. 1 Schematic of the gas-mixing section.

気流の可視化法として、今回は直接注入トレーサ法を適用し、ドライアイスもしくは水蒸気ミストをトレーサとして用いた。光源として用いた Ar⁺レーザ（SPECTRA-PHYSICS : Model 177G0-2 ; 488 nm）スリット光（二次元可視化面）の方向を変えて非同時計測を行い、混合器内全体としての流動状態を把握できるようにした。

3. 装置内流動の観察および定量化

ドライアイス・ミストと高速度カメラ（PHOTRON : FASTCAM-Net 500）を用いた可視化によって、装置内流動の骨子構造が明らかになった。特に重要な知見とし

て、Fig. 2 に与えられるような、主流に対するジェット流の体積流量比の最適条件 ($Q_j/Q_m = 0.25 \pm 0.03$) を見出した。最適値より上では、連続瞬時画像から判別可能な“強い渦対”が形成するか否かで、ガス混合部の流動状態が大きく変わり、この渦対形成への流動遷移がガス混合の度合を記述する上で大きな意味をもつと考えられる。

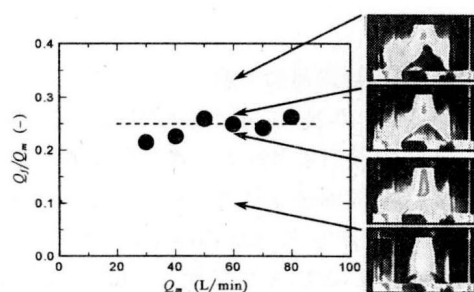


Fig. 2 Flow-rate ratio corresponding to flow-pattern transition.

水蒸気ミストと PIV システム（KANOMAX JAPAN : DPIV-K50-15 64000T）を用いた可視化によって、装置内流動の定量化が可能となった。Fig. 3 に瞬時速度ベクトルおよび平均速度場の一例を示す。今後は、混合器内での速度分布や滞留時間、あるいは混合指標となる濃度分布や温度分布等について検討し、これら定量的データも合せて総合的に流れ場を把握することが必要である。

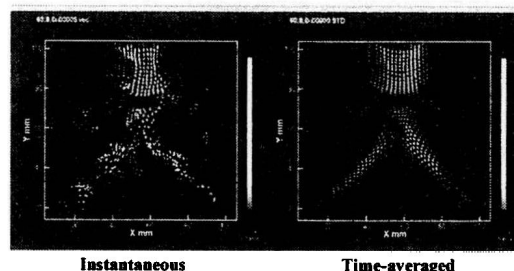


Fig. 3 Velocity fields constructed based on PIV analysis.

謝辞 本研究は、平成 13 年度 NEDO 委託プロジェクト「石炭・天然ガス活用型二酸化炭素回収・利用技術の開発」の一環として行われ、日本学術振興会科学研究費補助金（基盤研究 A (1) 課題番号 12355031）からの助成を受けて進展した。ここに記して謝意を表します。

参考文献

- 1) Institute of Applied Energy: Development of Carbon Dioxide Recovery and Conversion Technology based on Coal and Natural Gas Utilization, 2001 Fiscal Year Annual Progress Report to NEDO, 51101103 (2002).

ヒト運動関連脳電位のウェーブレット変換による時間周波数可視化

Time-Frequency Visualization of Human Movement-Related Cortical Potential using Wavelet Transform

電気電子工学科 川田 昌武

1. まえがき

ヒトの随意運動に伴い発生する運動関連脳電位(MRCP)に対してウェーブレット変換を用いた時間周波数可視化を行った結果について紹介する。被験者には実験内容を説明し同意書を得た上で実施した。

2. 脳波計測と随意運動実験

本実験では国際 10-20 電極配置法の Fz, Cz, C3, C4, Pz を活性電極とし、耳朶(右耳)を基準電極とする基準導出法による計測、時間周波数可視化を行った。なお、アンチエイリアシングフィルタ(250Hz)を通した上でサンプリング周波数 1kHz にて A/D 変換し、IIR デジタルフィルタリングによるハイパスフィルタ(1.6Hz)、ローパスフィルタ(30Hz)、60Hz 除去フィルタ処理を行った後に、サンプリング周波数 200Hz で間引き解析データを取得した。本実験被験者は50代女性1名、20代男女各1名の計3名(全被験者右利)である。被験者は覚醒、閉眼、安静状態とし、耳栓により極力雑音を避ける様にして椅子に座らせ、右一差指(片手)を自らのペースで約 3 s に 1 回の割合で屈曲運動を反復させた。筋電図は上記と同様の血電極を人差指掌側第 1 関節(MP 関節)に配置し計測した。眼球電図(EOG)も同様の血電極を右眼の 1cm 下に配置し計測した。

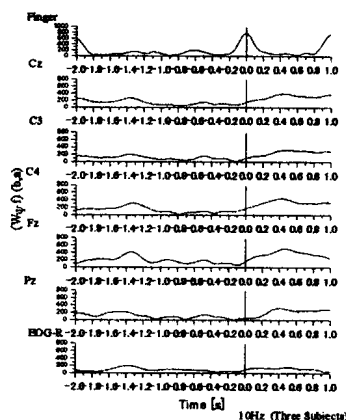
3. 運動関連脳電位の時間周波数可視化

筋電図による運動開始時点を基準に、脳波データの運動前 2s、後 1s の計 3s を切り出し、1 被験者あたり 20 波形(20 試行)の 3 名分(60 波形)を加算平均し、その波形に対してウェーブレット変換(Gabor 関数)を行った。その結果より、顕著な変化がある周波数成分として、5Hz と 10Hz 成分の時間変化を図 1 に示す。同図(a)より、全電極で 10Hz 成分が運動開始後の約 0.4s ~ 0.5s まで上昇し、その後、緩やかに減少している。このことは運動開始後の約 0.3s ~ 0.4s で MRCP が最大値を示すことと同じ結果である。なお、正常成人の覚醒、閉眼、安静状態の α 波帯域(8-13Hz)成分は、一般的に頭頂部、後頭部に優勢に出現し、特に、後頭部において振幅値も大きく出現頻度も高いと報告されており、本結果では随意運

動時に前頭部 Fz の 10Hz 成分が頭頂部、後頭部である Cz, Pz の成分と比較して大きく出現していることから、閉眼による α 波成分とは考えにくく、随意運動成分であると考えられる。同図(b)より 5Hz 成分は運動開始前約 -0.9s ~ -0.4s まで上昇し、運動開始後 0.3s 前後まで減少する傾向が分かる。これは、BP(Beritschaftspotential), IS (Intermediate Slope)成分に含まれ、運動準備電位として重要な役割を示すと考えられる。なお、精神作業時に前頭の正中部にみられる前頭正中部シータ律動(Fm θ : 4-7 Hz)が報告されており、運動開始前に前頭部 Fz で後頭部 Pz と比較し 5Hz 成分が大きく出現していることから、随意運動開始前に精神的活動があったと考えられる。

今後、本研究をさらに発展させるとともに、工学応用についても検討する予定である。

(a) 10Hz



(b) 5Hz

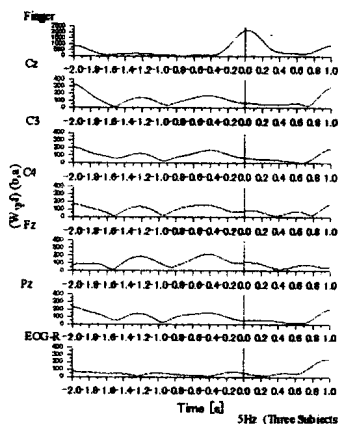


図 1 周波数 5Hz, 10Hz 成分の時間変化波形

ビジュアルイメージ指向設計に基づくプログラム自動生成方式

Automatic Program Generation based on Visual Image-Oriented Design

知能情報工学科

下村 隆夫, 池田 建司, 最上 義夫

1. はじめに

ソフトウェアはプログラミング言語を用いて記述される。作成されたプログラム・コードは直感的に理解できるものではなく、ソフトウェアの規模が大きくなると、保守することが困難となる。このため、図面を用いた設計書の作成や、プログラム・コードからの設計図の生成等が行われている。ここでは、人間が頭に描いたイメージを基に設計を進めていくだけで、プログラムが出来上がるイメージ指向設計方式 BioPro について解説し、Web アプリケーションについて適用した事例を紹介する。BioPro では、プログラムを構成するコンポーネントの完備性や、コンポーネント間の関係の一貫性を容易に検証でき、プログラムが完成していなくても、設計の途中で、設計した部分だけを実行して、テストしながら、開発を進めていくことができる。

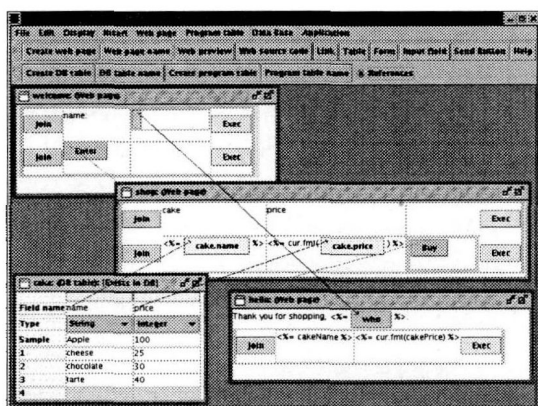


図1 商品選択プログラムの設計

2. イメージ指向設計

簡単な商品選択プログラムを例にとって説明する。このプログラムは welcome, shop, hello という3つの Web ページからなり、(1) 名前を入力後、(2) 商品を選択すると、(3) 購入した商品とその価格を表示する。ホームページ作成ツールのようにユーザが表示したい Web ページのイメージを Web ページウィンドウに書き写すことにより、Web アプリケーションを設計していく(図1)。welcome ページでは、テーブルの中に、"who"という名前をつけた入力フィールドと"Enter"というラベルをつけた送信ボタンを配置する。shop ページでは、商品の名前と価格を格納したデータベースの内容を参照する。hello ページでは、"Thank you for

shopping, ."と入力しておき、welcome ページの入力フィールド who をこのページにドラッグ&ドロップすると、この入力フィールドの値を参照するボタン who が挿入される。

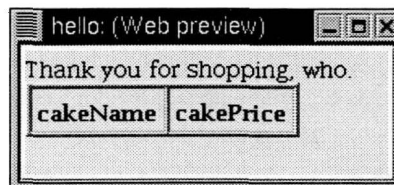


図2 hello ページのプレビュー



図3 商品選択プログラムの実行

3. 設計の検証とコード自動生成

設計の途中で、hello ページをプレビューすると、名前、商品、価格等の値は送信されていないため、各々、パラメータの名前 who, fruitName, fruitPrice が表示される(図2)。Web ページを表示する JSP コード、送信パラメータ値の格納、セッションオブジェクトの管理、DB テーブルの検索等のコードを自動生成すると、Web アプリケーションができて上がる(図3)。

4. おわりに

イメージ指向設計では、設計過程が分かり易いため、誤りの混入も少なく、プログラムの作成が容易になることが分かった。今後は、使われるごとにプログラムの作り方を自身で学習するプログラミング自動学習、誘導システムに発展させていく予定である。

がんと低酸素の生体機能分子設計

Molecular Design of Hypoxia-targeted Chemical Modifiers of Cancer Treatment

生物工学科 永沢秀子, 宇都義浩, 堀 均

1. はじめに

生物は、刻々と変化する自然環境を認識し、様々な環境に適応して生存し、進化してきた。この様な環境ストレス応答反応は生理的レベルのみならず、細胞レベルでも営まれており、今日では分子レベルのストレス応答機構が解明されつつある。中でも酸素の存在は、地球上で生存する生物にとって最も重要な環境因子のひとつである。細胞の低酸素ストレス応答反応として、解糖系の活性化や、血管新生の誘導が起こることなどが知られており、これらの変化は、腫瘍の微小環境にみられる特徴とよく一致している。実際、動物の体内でみられるハイポキシアは、腫瘍組織のほかには一過性 (acute) または慢性 (chronic) の血流障害や肺の疾患によるものに限られている。もちろん癌細胞といえども酸素や栄養分は必要であるが、異常な増殖により血管破壊され孤立した癌細胞は十分に酸素も栄養分も届かないにも関わらず生存している。この低酸素細胞は放射線感受性が低く、放射線癌治療における予後を悪くし再発の原因の一つとして問題にされている。

2. がん分子標的としての低酸素応答分子

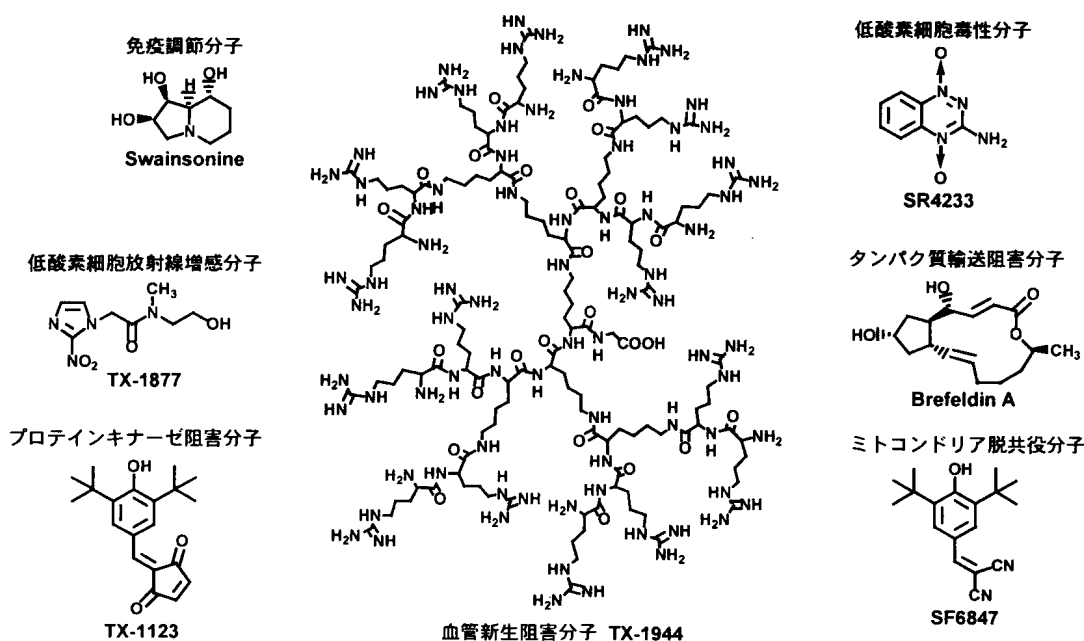
我々は、最近明らかになってきた低酸素微小環境下での HIF-1 転写因子を介した癌細胞のサバイバル戦略を

標的とした分子設計に取り組み、腫瘍選択性の高い癌治療法を確立しようという試みを行っている。この戦略として、低酸素細胞において酸素に類似 (oxygen mimic) した働きをすることにより、放射線感受性を高める低酸素細胞放射線増感剤、また、低酸素環境で特異的に還元代謝による活性化をうけて、細胞毒性をもたらす hypoxic cytotoxin または bioreductive-activated prodrug の分子設計を行う。さらに、このような低酸素標的化分子に、腫瘍ハイポキシアにおける生物応答修飾機能を付加することによって cytostatic な癌治療薬として、血管新生阻害、転移抑制、アポトーシス誘導、マクロファージ活性化作用などユニークながんの生物応答修飾作用を有する新規抗がん剤の開発研究を行っている。

3. ファルマコキネティック創薬

がん治療における新規分子標的探索のためのプローブ分子として、タンパク分解酵素及び糖鎖修飾酵素阻害分子、プロテインキナーゼ阻害分子、ミトコンドリア脱共役分子、マクロファージ活性化による免疫修飾分子などの分子設計、合成を行っている。これらを通して、がん細胞の未知なる分子特性を明らかにし、新たな腫瘍ターゲットに対する創薬をめざしている。最近、血管新生

阻害因子エンドスタチンの立体構造の特徴を模倣したアルギニンデンドリマーの開発を行い、注目されている (Drug Discov. Today, 7: 740, 2002)。今後、このような生体高分子ミミックを新たなファルマコキネティック創薬シードとして位置付けてさらに発展させていく予定である。



非線形光学特性を持つ微小球の光学特性シミュレーション

Simulation of linear and nonlinear optical responses of microspheres with optical nonlinearity

光応用工学科 原口雅宣, 福井萬壽夫, 岡本敏弘

1. はじめに

近年の光通信システム開発分野では, 大量の情報トラフィックに対応するため, (1)各種電子デバイス的高速化・高機能化と, (2)それぞれ波長が異なる多数の光通信を1本の光ファイバにて行う波長多重通信(WDM)の波長高密度化が行われている。しかしながら, 光信号を電気信号に変換し信号処理を行い再び光信号へ戻す現在の方法には, 電子デバイス処理速度向上や低コスト化の限界が見えはじめている。また, WDMにおいては, 波長の異なる光信号を1本のファイバへ導入する合波部分や特定の波長を選択的に取り出す分波部分が低コスト化への障害となっている。このため, (1)については純光学的な信号処理, (2)についてはフォトニック結晶や微小共振器の利用が提案されている。しかし, 前者は, 電子デバイスと比較して光デバイス集積度が遥かに低いこと, 動作に大きな光パワを必要とすること, 後者は, 作製方法等の問題を抱えている。

我々は, 高集積化・低動作パワを実現する可能性がある基本構造として, ウィスピングギャラリモード(WGM)と呼ばれる周回モードが存在するためモード体積が小さくQ値が高い微小共振器となる, 誘電体微小球(以下, 微小球)に着目した。非線形光学材料をQ値の高い共振器と組み合わせる事で, 低動作パワの光デバイスを実現できる可能性がある。また, Q値の高い共振器をうまく利用するためには, 効率の良い入出力が問題となる。非線形光学材料を用いた微小球の作製と基本特性に関する実験はすでに他グループにより報告があるが, 現在理論が存在しないので, 実験結果を解釈しデバイス応用への展開を計ることが困難である。そこで我々は, (1)効率良く微小球と光エネルギーのやり取りができると期待される全反射減衰法により単一微小球や配列微小球の光学特性の実験的解明と, (2)非線形光学材料と組み合わせた微小球構造の光学特性を予測するための計算機シミュレーションを行っている。ここでは, シミュレーションを紹介する。

2. 数値シミュレーション

シミュレーションを行うための解析的理論がないため, 数値計算的手法の一つである, 有限差分時間領域法(FDTD法)を用いた。FDTD法は, マクスウェル方程式を図1に示すYee'sメッシュを用いて中心差分により離散化し, 時間領域にて電磁界を求める計算手法である。FDTD法は, 原理的にどのような構造へも適用可能で, 過渡現象について取り扱うことができる利点を持つ。非線形光学特性としては, 屈折率は波長に依存する3次の非線形光学特性(光カー効果)を取り入れた。なお, 計算速度と計算可能なメモリ空間の限界に配慮し, 時間遅れを無視した数値モデルにて計算を行った。時間遅れを無視しても過渡現象を扱わない場合, 計算結果の妥当性は損なわれない。

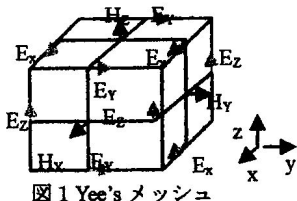


図1 Yee's メッシュ

3. 実験結果・計算結果

ガラス基板(屈折率1.51)に挟まれた直径 $1\mu\text{m}$, 屈折率2.52(TiO₂やCdS等の半導体を想定)の球に対して, ガラス基板上側から, 入射角55度にてTM偏光(紙面に対して平行な電気ベクトル)またはTE偏光(紙面に対して垂直な電気ベクトル)の光を直径 $1.5\mu\text{m}$ のスポット径にて入射した配置(図2)を想定する。図3は, この時の反射率Rと透過率Tの波長依存性を求めた計算例である。TM偏光, TE偏光の場合をそれぞれ破線, 実線とした。球内部にWGMが励起される波長条件が満たされると, 光エネルギーが球へと移り, 反対側の基板へ再放射されるため, 特定の波長でRが減衰しTは増加する。また, 偏光状態により励起条件が異なるため, Rに減衰が見られる波長が偏光により異なる。この現象は, ポリスチレンやシリカガラス球を用いた実験で観測されている。

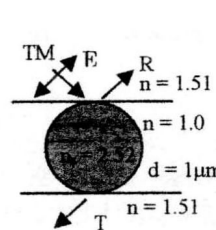


図2 計算構造

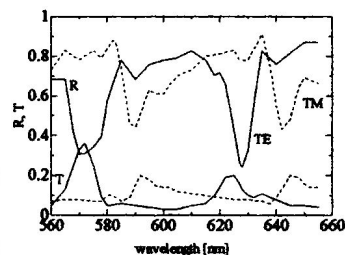


図3 微小球の線形光学特性

3次の非線形光学材料により作製された微小球にWGMを励起した場合, 光による屈折率変化に伴いWGM励起条件も変化しRやTに変化が現れる。図4は, 微小球の非線形性を $7 \times 10^{-14} [\text{m}^2/\text{V}^2]$ として, RとTの入射光強度依存性を計算した結果である。入射光強度が増大すると屈折率が変化し, WGM励起条件が壊れるためRは増加し, Tは減少する。また, 十分大きな光強度では, 自己収束効果にて球内部に光が入り込む現象が現れるためRは低下する。

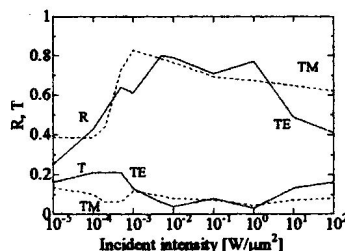


図4 反射率・透過率の入射光強度依存性

4. まとめ

数値計算により, 非線形光学特性を持つ微小球の光学特性を明らかにすることができた。微小球を含む構造の特性が計算機により検証可能となったので光デバイス応用が現実味を帯びている。現在, 計算結果を検証すべく, 非線形光学特性を持つ微小球の作製と光学特性の実験を行っており, 近い将来実験の報告ができると信じている。

バクテリアのコロニーパターン形成の数値モデルとその解析

Mathematical Model and Analysis of Bacterial Colony Pattern Formation

共通講座 坂口秀雄

1. はじめに

自然科学の分野において現われる時・空間パターンは、多種多様でパターン形成の問題として多くの研究者の興味の対象となっている。バクテリアの一種である枯草菌は単細胞生物の典型であるが、シャーレの中で培養すると環境条件である栄養基濃度、寒天の固さ等に依存して、ディスク状、密集分枝状、イーデン、樹枝状、振動等の様々な空間パターンを呈しながらコロニーを形成していくことが実験によって観察されている [2]。このパターン形成の問題の一つとして、バクテリアのコロニー形成の数値モデルに関する研究 [1] を行ってきた。この数値モデルを解析することで、コロニー形成のメカニズムの解明及びフラクタルパターンの解明が可能になることが期待される。

2. 数値モデル

バクテリアは栄養基を吸収して増殖（分裂）を行い、空間を移動するという基本的な活動をしているだけであると考えられるので、反応拡散系の偏微分方程式で数値モデルを記述することが可能である。また、この枯草菌は活発に空間を移動し増殖を行っているもの（active cell）と、空間移動も増殖も行っていない仮眠状態（inactive cell）の 2 つの状態があることが実験より観察されている。以上のことと、いくつかの仮定をおくことで次の 3 変数反応拡散方程式を導いた。

$$\begin{cases} u_t = d\Delta u + uv - \frac{a}{(\alpha + u)(\beta + v)}u \\ v_t = \Delta v - uv \\ w_t = \frac{a}{(\alpha + u)(\beta + v)}u \\ u(0, x, y) = u_0(x, y), v(0, x, y) = v_0, w(0, x, y) = 0 \\ (x, y) \in R^2 \end{cases} \quad t > 0, (x, y) \in R^2$$

ここで、 u は active 枯草菌の密度、 v は栄養分の濃度、 w は inactive 枯草菌の密度とし、 d は active 枯草菌と養分濃度との拡散率の比、 v_0 は初期の養分濃度で、 a, α, β は正定数とする。実験において環境条件を変化させるパラメータは、培地である寒天の硬さと初期の栄養濃度であるが、これに対する、数値モデルのパラメータは d, v_0 である。この方程式の解の特徴や性質を調べることでコロニーパターンの形成されるメカニズムを解明すること

ができると期待されるが、上記微分方程式は非線形のシステムであることから厳密解を求めることは極めて困難である。そこで、数値シミュレーションを行って数値解を求めることを考える。

3. 数値シミュレーション

上記微分方程式を数値計算によってパラメータ (d, v_0) の様々な値に対する解を求め、実験結果から得られているコロニーパターンと比較することで、数値モデルの確からしさを検証した。さらに、これらの数値解からパターンがどのようなメカニズムで形成されるのか、数学の立場から調べる。パラメータを変化させたときに、ディスク状のパターンから枝状のパターンに変化する基本的なメカニズムのキーポイントは空間 1 次元において、進行波解（解の形は変化せず、一定速度で進む解）と言われる解の存在である。この進行波解が存在するパラメータ領域では、パターンはディスク状であるが、存在しない場合 ($u \equiv 0$) 枝状になることが示唆される。しかしながら、この進行波解は空間領域が無限区間であること、ために、さらに、解の無限遠方での値が分かっていないために、数値解にかなりの誤差が含まれているので、数値計算からはその存在について厳密に述べることは難しい。そこで現在、無限精度数値シミュレーション手法 (IPNS) [3] を応用して、この進行波解を任意の精度で求める手法の開発を行っている。また、この IPNS 法は大規模の数値計算を行なわなければならないので、我々は、PC クラスタ (dualcpu の PC を 5 台、ギガビットのローカルネットワークに接続) を構築し並列化された Gauss の消去法のサブルーチンを利用することで最大 20GB のメモリ、10CPU の利用が可能になっている。

参考文献

- [1] M. Mimura, H. Sakaguchi and M. Matsushita, Reaction-diffusion modelling of bacterial colony patterns, Physica A, Vol 282, 283–303(2000).
- [2] 松下貢, 松山東平, 細菌集団によるパターン形成, 科学, 64(1994), 104–113.
- [3] H. Imai, T. Takeuchi and M. Kushida, On Numerical Simulation of Partial Differential Equations in Infinite Precision, Advances in Mathematical Sciences and Applications, 9(2)(1999), 1007–1016.

都市交通政策および環境政策の評価に関する研究

Evaluation of Urban Transport and Environment Policies

エコシステム工学専攻

近藤 光男, 廣瀬 義伸

1. はじめに

21世紀は環境の世紀といわれる。持続可能な社会を実現する方法の1つとして、社会経済政策は不可欠である。ここでは、「都市交通政策および環境政策の評価に関する研究」と題し、その個別課題である2つのテーマを研究トピックスとして紹介する。

2. 「土地利用－交通－環境モデル」を用いた都市交通政策の評価

本研究は、よりサステイナブルな都市形態を実現するための都市政策や交通政策の検討を行うことを目的としており、図1に示すような「土地利用－交通－環境モデル」を構築し、土地利用施策や交通施策が自動車交通に起因する環境負荷を低減させる効果を計量的に明らかにすることによって政策の評価を行ったものである。

徳島都市圏を対象とし、まず、地球温暖化に深い関わりのあるCO₂排出量の現状推移による将来推計を行ったところ、2010年にはCO₂の排出量が1990年と比較して、48%増加することがわかった。次に、土地利用施策として都市内居住の促進施策、交通施策として道路の新設とロードプライシング施策を設定し、両施策の効果を、CO₂やNO₂といった大気汚染物質濃度の他、騒音、振動の視点から計測した。さらに、気候変動枠組み条約第3回締約国会議(COP3)で義務付けられた目標値を対象都市圏に限定して達成するための政策を検討したところ、上で述べたすべての土地利用および交通施策に加え、自動車の燃費を18.9%改善する必要があることがわかった。

3. 一般世帯を対象とした二酸化炭素排出量取引施策の評価

一般世帯を対象として、日常生活において排出されるCO₂の基準値を設定し、それを目標(上限値)として削減努力を行い、基準値と実際の排出量の差を取引する制度を提案する。そして、この施策を導入した場合の住民の意識・意向を調査分析し、施策の評価と導入可能性を分析した。

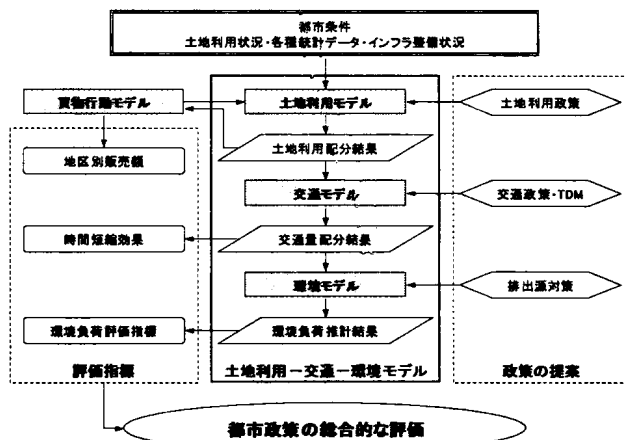


図1 土地利用－交通－環境モデル

市民に対するアンケート調査では、本施策の導入に対して、約60%の人が賛成と回答した。次に、調査によって得られたデータを用いて、排出量取引施策の受入率を算出した。CO₂排出量単位あたりの金額別に平均受入率を算出し、回帰分析を行ったところ、下のような結果を得た。

$$\text{上回る場合: } Y = 67.0 \exp(-0.0040X) \quad (R^2 = 0.899)$$

$$\text{下回る場合: } Y = 10.9X^{0.345} \exp(-0.000011X^2) \quad (R^2 = 0.667)$$

ただし、X: 単位あたりの設定金額(円/kg)

Y: 受入率(%)

これら両式より、排出量が基準を上回る場合と下回る場合の受入率が均衡する設定金額は、約100円/kgとなった。また、本施策を導入する際に受入率を高くするためには、排出量が基準を上回る場合には排出量単位あたりの金額を100円/kgより低く、下回る場合には100円/kgより高く設定することが望まれていることがわかった。このように、排出量取引施策を一般世帯に導入する場合の方法論に関して、貴重な知見が得られるとともに、本施策を導入した場合でも効果が期待できることが示唆された。

4. おわりに

本研究の成果は、政策決定の場において、資源循環型社会の実現のために有益な情報を提供しており、より効果的な都市交通および環境政策の立案に貢献することが期待される。

