氏 名 鈴木 幸人

本論文は、粒子法を用いて3次元多相流体-構造連成解析機能を有するマルチフィジックスシミュレータを開発し、そのマイクロ生化学システムに対する適用性を検討するとともに、Hamiltonianに基づく粒子法の定式化と計算アルゴリズムの開発について論じたものである。本論文は6章で構成されている。

第1章は序論である。マイクロ生化学システムの開発が盛んに行われているが、そこでの現象は流体と構造が連成するようなマルチフィジックスの問題が多く、有限要素法や有限体積法など従来の格子を用いる方法ではシミュレーションが困難であり、粒子法が有効であることが述べられている。また、粒子法の研究においては、Hamiltonianに基づく定式化を行えば流体と構造の両者に対して統一的な解析が可能になると考えられ、粒子法におけるマルチフィジックスシミュレーションを高精度に行うことができるとの展望が示されている。

第2章では MPS(Moving Particle Semi-implicit)法を用いたマルチフィジックスシミュレータ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が述べられている。現象論的な細胞移動・付着・離脱モデルを考案し、東京大学生産技術研究所の藤井輝夫研究室において実施された模擬細胞としてビーズを用いた実験と比較をおこない、モデルの妥当性を議論している。実験結果の付着パターンを再現するモデルを抽出することができ、後に行われた実験とも整合している。

第3章では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について述べられている。MPS法の表面現象を含む多相流体解析手法を3次元に拡張し、それに MPS法による3次元弾性体解析手法を弱連成で連成させることにより、多相流体構造連成解析手法を整備した。これを用いてマイクロディスペンサーの解析を行い、Lindemannらの実験で観測された液滴射出挙動を良く再現する結果が得られた。特に、弾性チューブの変形の効果によって液滴の射出時間は大幅に遅れることが実験で示されており、これを定量的によく再現できている。ただし、本解析ではディスペンサー出口に残留する流体が見られること、液滴先端位置が各時刻で実験よりも手前にあることおよび射出量に1割程度の差が見られることなどが問題点として残されている。

第4章では Hamiltonian に基づく非圧縮性流れに対する高精度粒子法の開発について述べられている。その定式化は、連続体の運動を支配する Lagrangian を直接離散化することにより粒子群の運動方程式を導出するもので、結果として得られる粒子法は有限次元の Hamilton 系として記述される。その時間積分法に symplectic スキームを適用することが可能であり、これによって各種保存量を精度よく保存する計算手法を構築することができ

る。ここでは自由表面を含む非圧縮流れに対して Hamiltonian に基づく粒子法を開発した。 非圧縮条件が拘束条件になり、拘束条件付の Hamiltonian に対する symplectic スキームで ある RATTLE 法を適用する。本手法を用いて、正方領域内の流れ、水面上の進行波、およ び矩形容器内の定在波について計算を行い、線型運動量、角運動量および力学的エネルギ ーが精度良く保存することを確認している。その一方で、進行波および定在波の計算にお いて力学的エネルギーは精度良く保存しているのにもかかわらず、波の振幅が徐々に減衰 していく結果が得られた。この運動が徐々にランダム化する現象は粒子法による流体解析 において共通した問題点であり、今後、解決しなければならないとされている。

第5章では非線型弾性運動に対する Hamiltonian に基づく高精度粒子法の開発について述べられている。非圧縮性流体と同じ手順で手法が構築されている。開発された手法を用いて弾性角柱の曲げ・ねじり運動および弾性円柱の回転運動について計算を行い、線型運動量、角運動量および力学的エネルギーが良い精度で保存することを確認している。さらに、弾性円柱の定常回転運動の計算において、計算で得られる変形に対する定量的な評価を行い妥当な結果が得られている。

第6章は結論であり、本研究のまとめが述べられている。

以上を要するに、本論文では、粒子法を用いて流体-構造連成解析を行なうことができるマルチフィジックスシミュレータを開発し、これをマイクロ生化学システムの連成問題に適用して有用性を実証するとともに、さらに Hamiltonian に基づく粒子法を非圧縮性流体および非圧縮性弾性体に対して開発しており、今後の計算科学技術の進展に寄与するところが少なくない。

よって本論文は博士(工学)の学位請求論文として合格と認められる。