Microhydrodynamics of colloidal suspensions [*1]

— Stokesian Dynamics: The Next Generation —

Faculty of Applied Physics, University of Twente　市來 健吾 [*2]

(2001 年 4 月 19 日受理)

水の中を重力で落ちる粒子の挙動を 21 世紀の科学は完全に予言できるか、あるいはこんな古典的な現象でも現代の科学は完全に解明できていないのか? この現象を重力だけで水を無視して考えると、粒子は加速運動することが分かる。しかし実際には粒子はある程度の速度でほとんど一定に落下する。速度に比例するような水の抵抗力を考えればこの振舞は定性的に記述できる。しかし更に現実には、この抵抗力がまわりの粒子全ての影響を持つため、多粒子系ではその挙動は複雑である。「流体を直接数値計算してしまえ」という立場もあるが、ここでは流体の粘性が支配的な状況である Stokes 近似に徹底的にこだわり、それ以上の人工的な、あるいは仮想的な近似を排し出来るだけ妥協せずにその性質を実感したい。その正確な数理的な情報を得るために数値計算を使おう、というのが本論文の立場だ。物理のカリキュラムの中で「流体力学」は大きく取り上げられないし、microhydrodynamics と呼ばれる粘性流体中の多体問題は通常触れられない。専門の異なる研究者にこの microhydrodynamics の面白さと難しさも併せて紹介したい。この論文は半分は (独断や偏見に満ちた) レビューで、半分は最近の私の仕事の紹介である。ここで紹介する計算手法は流体力学に限らず一般の多体問題に応用可能であると期待し、「多体問題の数値解析」という広い framework を示唆する。Stokes 流れの多粒子問題に興味の無い方もこの手法の応用を少し考えて、もし使えそうなら是非チャレンジして欲しい。ここではもっとも単純な、つまり高級な技巧を使っていない計算道具を議論しているだけで、Stokes 流れの多粒子問題に対してすら面白い物理現象への応用は示していない。本来私自身がこの道具を使って物理を取り出し尽くした後に「どうだ、まいったか」という論文を書くべきなのだが、逆に読者にチャレンジする space が残っている、と挑発しておく。

[*1] この原稿は、... である。

[*2] E-mail: ichiki@mailaps.org

目次

1 microhydrodynamics 3

1.1 位置付け 4

1.2 これまでの研究 6

2 microhydrodynamics の計算手法 17

2.1 数値計算の意義 17

2.2 有限要素法 18

2.3 境界要素法 19

2.4 多重極展開 20

2.5 粒子法 21

2.6 Stokesian Dynamics: The Original Series 22

3 Stokesian Dynamics: The Next Generation 25

3.1 SDTNG のはじめに 25

3.2 多重極展開再考 27

3.3 高速化 36

3.4 計算結果 43

3.5 SDTNG の結論 46

4 残された問題 47

4.1 物理としての未来 48

4.2 計算手法としての未来 49

5 まとめ 53

ことわり

これは「物性研究者のための計算手法入門」というシリーズの一編である。シリーズ開始に当たる「物性研究」**74**–1 (2000–4) p.1 「はじめに」という文章に、「モデルを作る段階だけでなく、これまで軽視されてきた実装時の know-how を供することが (少くとも) 一つの目的である」(意訳) とある。この論文では一歩踏み込んで、モデル作成 (物理的思考) とモデル実装[*3] (数値的試行) の結合によって見えて来る何かを、ここで議論する Stokes 流れの多粒子系の流体力学 (microhydrodynamics) に対して示したい。その意味から、「microhydrodynamics の物理」と「microhydrodynamics 計算手法」を同程度にまとめようと思う。つまり「計算手法入門」シリーズであるが、問題の物理的側面を意識的に議論することを最初に断っておく。さらに最後では特定の問題によらない一般的な framework としての「計算手法」を展望したい。

それから言い訳に近い「ことわり」を一言述べる。以下で私は随分と偉そうに書いているが、実はそれらは偉い先生による正しい事柄の系統的な教育によって獲得されたものではなく、私が勝手に自分の必要に応じて独学で寄せ集めた知識であり、的はずれな点や素人的な詰めの甘い部分が多くあると思う[*4]。こういう視野の狭い認識や間違っているかもしれない事柄も、しかし敢えてあからさまに書こうと思う。識者の方々 (に限らず、読者のみなさま) のコメントを切に期待します。

この論文の構成は以下の通りである。まず 1 節で背景とこれまでの研究を、主に理論に重点をおいて概観する。2 節ではこれまでの数値計算の研究を概観する。3 節で私の最近の数値計算に関する研究を紹介する。4 節で未解決の問題と今後の課題を述べ、5 節でまとめる。

1 microhydrodynamics

最初にこの論文で議論する「microhydrodynamics」という用語を定義する。ここでは多粒子系を議論する。その粒子は分散媒質を連続体、つまり流体として扱える程に大きく、その粒子を取り囲む流体の影響が効かないほど大きくはない、つまり流体抵抗が重要である程度に小さいとする。粘性が支配的な状況での流体に分散した suspension と呼ばれる多粒子系の流体力学を microhydrodynamics と呼ぶ。これは応用数学や Chemical Engineering の分野で活発に研究されている。この分野の研究には既に幾つかの成書も存在する。私の知っている範囲では "*Colloidal Dispersions*" [80] や、そのものずばり "*Microhydrodynamics*" [50] がある。前者は理論と実験に詳しく、後者は数値解析に詳しい。

私の個人的な microhydrodynamics への入口は、流動層 (fluidized beds) であった。流動層は、粉体とよばれる砂粒くらいの粒子を容器に入れ、容器の底から空気や水などの流体を上向きに流し込むことで流動化した層のことである。大学院に上がった時に、この流動層の粒子スケールでの振舞を研究することになった。普通の意味で流動層は suspension と言うには粒子のサイズが大きく、

[*3] 「実装 (implementation)」という日本語は jargon ではないか、との指摘があった。programming や algorithm の日本語の書籍には広く使われている。本論文では、「概念 (algorithm) を具体的な形 (program) にする」という程度の意味に用いる。「机上の空論」という言葉があるが、「実装」は大事だ。

[*4] 物理屋は基本的に素人であるという言い訳を、あくまで言い訳として準備している。こういうと大変語弊があるが、言いたいのは「何でもいいから分からない問題を持って来て見ろ、解いてやるから」という気分が物理屋さんには少からずあるような気がする。その尻馬に乗ってしまえ、ということ。

流れを特徴付ける Reynolds 数も一般的に小さくない。そこでまず粘性が支配的な状況で理解出来ると思われる流動化が始まる辺りの挙動を考えはじめた。粒子は詰まっているがすき間は空いていて、その間を流体が流れる。流速がある値に達すると、詰まった粒子が流体で吹き上げられて流動化することは誰でも分かる。定量的にこの振舞を理解するには、詰まった粒子の間を流れる流体の動きと、それが粒子に及ぼす影響を特定すれば終りだと思った。球のまわりの流体の流れという基本的な問題は流体力学の教科書をみれば絶対載っていると当時は思った。しかしこの考え方は当然甘かった。おかげで今になってもまだドロドロと研究している訳だ。

以下では一般の物性物理研究者には馴染みが薄いであろう microhydrodynamics について、その位置付けとこれまで行われた研究を概観する。

1.1 位置付け

1.1.1 流体力学

流体は圧縮性の有無で「圧縮流体」と「非圧縮流体」に分けられる。非圧縮流体は Navier–Stokes 方程式で記述できる[*5]。Navier–Stokes 方程式は非線形なため、一般に解析には様々な困難がある。しかしそれゆえ Navier–Stokes 方程式は多くの面白い現象をはらみ、数多くの研究を生んでいる。別の分類として粘性の有無で「粘性流体」と「完全流体 (perfect fluid) =非粘性流体 (inviscid fluid) = 理想流体 (ideal fluid)」が分けられる。完全流体は渦度が保存されるため、更に渦の有無により「渦運動」と「渦無し運動」に分けられる。完全流体に関しては「流体力学」と名の付く教科書にはもれなく記述がある。しかし完全流体にはいわゆる d'Alembert のパラドクスがある。つまり、完全流体の中を等速運動する物体には抵抗が働かないのである。したがって流体抵抗が重要な我々の目的には使いものにならない。流れを特徴付ける無次元量 Reynolds 数が無限大の状況がこの完全流体に対応する。逆の極限、つまり Reynolds 数がゼロの状況がこれから議論する microhydrodynamics の舞台である Stokes 近似である。そこでは粘性が支配的であり、また Navier–Stokes 方程式は線形化される。完全流体とは対照的に、Stokes 流れの教科書レベルの記述は非常に限られている。

以下で議論するのは Stokes 近似、つまり microhydrodynamics であるが、最後の 4.2 節では一般的な文脈で議論を行う。そこでは具体的な系として vortex dynamics と bubbly liquids を簡単に紹介する。前者は「完全流体の渦運動」、後者は「完全流体の渦無し運動」に近い領域である。

1.1.2 流体力学と統計力学

今から約 100 年前の 20 世紀初頭 Einstein が行った流体力学と統計力学の境界領域での研究 (というより、統計力学誕生前後の流体力学からのアプローチ) は microhydrodynamics の先駆的な研究と言える。ブラウン粒子、つまり媒質である水などの流体分子よりも大きな粒子の運動に対し

[*5] この言説は私が流体力学の非専門家だから言える。細心の注意を払うならば「非圧縮 Newton 流体の支配方程式は (非圧縮)Navier–Stokes 方程式である」とすべきとの助言を頂いた。

て、その拡散係数 D と抵抗係数 γ に関するいわゆる Einstein の関係と呼ばれるものを示した。

$$D = \frac{kT}{\gamma} \tag{1}$$

ここで k は Boltzmann 定数、T は流体の温度である。この式は揺動散逸定理の最初に示された一番簡単な表式である。つまり温度 T の分散媒質である流体が Brown 粒子に及ぼす乱雑な寄与である熱揺ぎと、同じ流体の系統的な寄与である抵抗力を結ぶ関係である。後者、つまり流体の抵抗力がここで議論する物理量そのものであり、microhydrodynamics は統計力学と流体力学の間にある学問と言える。

実は Einstein の microhydrodynamics への寄与はこれだけにとどまらず、suspension の rheology に関する先駆的な仕事も同時に行われていたことは注目に値する。これに関しては 1.2.6 節で議論する。

1.1.3 流体力学の中の microhydrodynamics

先に microhydrodynamics を統計力学との関連を見た。そこでは媒質である流体は媒体である粒子にランダムな力と系統的な力を及ぼすことをみた。以下で我々が議論していくのは、このうち流体の系統的な寄与である抵抗である。

現在 microhydrodynamics を勉強しようとした時、その主な内容は残念ながら教科書の類には無く、直接論文にあたる必要がある[*6]。粘性流体、特に Stokes 近似についても伝統的な教科書では Stokes 抵抗に簡単に触れてある程度である。しかし世界的に見ると状況は一変する。Oseen の本[*7]は見た事がないが、Lamb の辞典のような本 [61] には詳しい記述があり、特に球面調和関数による Stokes 流れの一般解は最近まで広く使われている。Ladyzhenskaya の数学的な本 [60] も Stokes 流れに大部を割いており、その積分方程式の定式化は重要だ。ある意味で microhydrodynamics の生みの親とも言える Batchelor の本 [4] は粘性流を大きく取り上げており、流体力学の教科書として斬新であった。Stokes 流れの当時の集大成的な Happel & Brenner の本 [34] もある。最近でも Ladyzhenskaya の Stokes 流れの部分の現代版と言える Pozrikidis の本 [78] や、Happel & Brenner の現代版というべき Kim & Karrila の本 [50] も出ている。

振り返って日本では近年この分野の研究者が少い事もあってか、完全に取り残されているように感じる。まるで「Stokes 流れは古い」という標語でもあるかのような状況だ。しかし昔は日本の研究者はこの分野で頑張っていたようである。実際に以下で紹介する Hasimoto (1959) [35] や Jeffrey & Onishi (1984) [46] は現在でも頻繁に引用されている重要な仕事である[*8]。また Hasimoto & Sano (1980) [36] のレビューにはこの分野の日本の研究者の活躍を読みとることが出来る。教科書においても今井功「流体力学 (前編)」[102] は、そのはしがきに「粘性流体力学の基礎的な部分」

[*6] このことは非常に大事だ。「教科書」という format はその記述に対する懐疑を薄めてしまい、そこに存在する本当の問題を認識できないという弊害を持つ。本論文は出来るだけ読者が疑問をはさむ余地を意識的に残したつもりだ。

[*7] C.W.Oseen (1927) 、*Hydrodynamik*. Leipzig: Akad. Verlag.

[*8] 「引用される仕事がよい仕事である」という statement が真かどうかは自明ではないが。

を書く事が念願であったとある通り、その最後の第 9 章「おそい流れ」はユニークである。そこでは本論文で扱う Stokes 近似にとどまらず Oseen 近似も含めた粘性流体の統一的な記述 (また完全流体の理論とも統一的な記述) が展開され、私の視野の狭さを痛感させられる。当初二冊構成の前編であったためか、かえってこの第 9 章が際だって見える。日本物理学会 50 周年を記念して書かれた「ある流体物理屋の軌跡」[103] にも、非乱流の流体力学における活発な研究が読める。現在の状況を想像すると、今の偉い人はその昔の若い人であって、昔の偉い人とは違う仕事をしようとした、その結果なのかもしれない[*9]。ならば今手薄になっている Stokes 流れやその周辺に、今の若い人は踏み出してもよいのではないか (いや、踏み出すべきだ)。

1.2 これまでの研究

Stokes らが流体力学を作った後に、先に見たように Einstein が 20 世紀初頭に microhydrodynamics の先駆的な仕事を行ったことを見た。当然その後多くの研究が行われ、結果は蓄積されていった。例えば Happel & Brenner [34] を見るとその蓄積された多くの結果が伺える。以下の概観で分かるように、70 年代に Batchelor がこの状況を一旦まとめあげ、現在の microhydrodynamics の基礎を作ったと言える[*10]。その後も更に知識は蓄積されている。言ってみれば今は post-Batchelor の時代と言える。

ここでは microhydrodynamics の理論的な研究を、私の知っている仕事に限って簡単に概論しておく。これは全く不十分だが無いよりはましだろう。ただしこの論文は外国語で書かれた教科書の翻訳ではないので人の論文に書いてあることを翻訳したりせず、基本的に私なりの文献の紹介にとどめる。不用意に孫引きせず、興味ある文献には是非直接あたって頂きたい[*11]。私が実際に copy を持っていて少くとも目を通した文献は最後の参考文献に挙げ、持っていないため直接内容は確認できないが重要かも知れない文献は脚注に reference を記した。また出来る限り論文のタイトルも付した。

1.2.1 問題の特定

非圧縮流体の支配方程式は Navier–Stokes 方程式である。

$$\rho\left\{\partial_t \boldsymbol{u} + (\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{\nabla})\,\boldsymbol{u}\right\} = -\boldsymbol{\nabla} p + \mu\nabla^2\boldsymbol{u}, \qquad \boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{u} = 0 \tag{2}$$

ここで $\boldsymbol{u}$ は流体の速度、ρ は密度、p は圧力である。無次元化すると以下のようになる。

$$Re\left\{\partial_{\hat{t}}\hat{\boldsymbol{u}} + \left(\hat{\boldsymbol{u}}\cdot\hat{\boldsymbol{\nabla}}\right)\hat{\boldsymbol{u}}\right\} = -\hat{\boldsymbol{\nabla}}\hat{p} + \hat{\nabla}^2\hat{\boldsymbol{u}} \tag{3}$$

[*9] この点に関して識者の方から「日本の研究者は 1980 年前後の computer による数値解析の波に乗ることを潔しとしなかった (粘性流の研究は解析計算にこだわった) という背景もある」と伺った。

[*10] G. K. Batchelor 氏は 2000 年春に亡くなられた。彼に関しては、例えば H. E. Huppert [38] を参照。

[*11] 私自身もあまり人に言えた義理ではない。特に流体の研究は過去をたどると切りが無いという側面はある。

ここで Re は Reynolds 数と呼ばれる無次元量で、特徴的長さ L、特徴的速さ U、流体の動粘性率 $\nu = \mu/\rho$ を用いて次のように定義される。

$$Re = \frac{LU}{\nu} \tag{4}$$

Navier–Stokes 方程式の厄介だが面白い部分は左辺の慣性項に含まれる移流項の非線形性である。乱流の研究はこの非線形項による複雑さの研究と言ってよい。

遅く ($U \to 0$)、小さく ($L \to 0$)、高粘性 ($\nu \to \infty$) の極限では $Re \to 0$ となる。microhydrodynamics の micro とはこの「小さい」ことに由来する。この時 Navier–Stokes 方程式 (2) は次のようになる。

$$\mathbf{0} = -\boldsymbol{\nabla} p + \mu \nabla^2 \boldsymbol{u}, \qquad \boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{u} = 0 \tag{5}$$

この極限が満たされる近似を Stokes 近似と呼ぶ[*12]。この近似では Navier–Stokes 方程式の面白さが根こそぎ無いので、乱流に興味を持つ研究者は興味がないだろう。見ると分かるように方程式は線形であり、ほとんど Laplace 問題である。ここで再び先程の問いをあえて繰り返す; 本当に Stokes 流れは古くて面白くないのか? この問いへの答え、つまり microhydrodynamics が自明ではない一つの例としてカオスとの関連を紹介する。Stokes 流れの多粒子問題がカオスを示すことはこれまで暗黙のうちに認識されてはいたが、最近 Jánosi *et al.* (1997) [42] により明確に示されている。

私が流体力学の非専門家である長所を活かして、以下ではこの Stokes 近似を出発点にして議論を行うことにする。つまり (5) 式で表される問題の数理を研究するという立場にたち、Navier–Stokes 方程式の近似としての Stokes 流れという立場はこの論文では棚上げする。この私の手に負えない棚上げした問題は「議論の余地」としてここに列挙するにとどめる。Reynolds 数が小さいという Stokes 近似の条件は見ている現象の空間スケール L が相対的に小さいことに対応する。しかしこの近似で大きな、例えば以下で議論するような無限空間の流れを議論していいのか、という疑問は存在する。実際 2 次元では point force の寄与が $1/r$ ではなく $\log r$ となり、広い空間にそのまま適用できない (Stokes のパラドクス)。Reynolds 数を small parameter として Navier–Stokes 方程式を展開する試みは、比較的低次で破綻することが知られている[*13]。Navier–Stokes 方程式の慣性項のうち時間微分項を残す場合は、線形性から時間を Fourier 変換して形式上は Laplace 問題から Helmholtz 問題に移るように対応できる。残る移流項を遠方の流れで線形化する Oseen 近似も昔から議論されている。この Stokes 近似の Navier–Stokes 方程式との関係の ill-posedness が Stokes 近似の解析の様々な困難に関係するかもしれないという疑問は、少くとも以下での議論では杞憂である。例えば沈降速度や Brownian dynamics の発散の問題は、この ill-posedness とは無関係であった。

線形の問題では point force が作る解は Green 関数とよばれ、解析上極めて重要である [105, 106]。つまり線形性から point force の重ね合わせで任意の解が構成できる。今の場合速度場の Green 関数は Oseen テンソル J、あるいは Stokeslet と呼ばれる。

$$J_{ij}(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{r}\left(\delta_{ij} + \frac{r_i r_j}{r^2}\right) \tag{6}$$

[*12] Stokes 近似を、(5) 式第一式左辺に $\rho \partial_t \boldsymbol{u}$ を残したものに、つまり非定常に対して使う慣習もある (例えば今井功「流体力学 (前編)」[102] の §68)。しかしここでは本文の意味で用いる。

[*13] 例えば佐野理「連続体の力学」[104] の p.151 を参照。

ここで δ_{ij} は Kronecker の delta である。本論文ではスカラーは roman 体 (p) 、ベクトルは bold 体 ($\boldsymbol{u}$) 、テンソルは sans serif 体 (J) で、ベクトルやテンソルの Cartesian 表示の要素は roman 体に下付き添字で指数を付けて (J_{ij}) 表す[*14]。そこで繰り返された指数に対しては Einstein の規約を適用する。つまり繰り返された指数に対して和を取る。原点にある強さ $\boldsymbol{f}$ の point force が場所 $\boldsymbol{r}$ に作る速度場はこの Oseen テンソルを使って以下のように書ける。

$$u_i(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{8\pi\mu} J_{ij}(\boldsymbol{r})\, f_j \tag{7}$$

注目して欲しいのは $1/r$ の依存性を持つこと、つまりある場所の point force が作る速度への影響は長距離に及ぶ。この $1/r$ の依存性は Laplace 問題との類似性による。また重力多体系や電子系との類似性を示唆する。有名な、そして Stokes 近似の非専門家にも知られている Stokes 抵抗 $\boldsymbol{F} = 6\pi\mu a\boldsymbol{U}$ は、無限に広がった粘性率 μ の流体の中に孤立した半径 a の剛体球形粒子が速度 $\boldsymbol{U}$ で動く時に流体に及ぼす抵抗力である。この抵抗力は粒子表面での力密度を積分したものに他ならず、それらの力はそれぞれ $1/r$ の強さで周りの流体を乱している。他の粒子が周りにある状況で Stokes 抵抗を何の抵抗も無く使ってはいけない[*15]。

1.2.2 粒子間相互作用

■ 1 体問題　以上から流体の中にある物体は強く相互作用していることが分かった。次はこの相互作用を具体的に特定したくなる。こんなに明確な問題設定はない。1 体問題である Stokes 抵抗が分かったのははるか昔であり、誰もが前々世紀 (とは 19 世紀) にどんどん解かれたのではないかと想像するだろう。しかし状況はそのように甘くはなかった。

解の一意性から、一旦見付かればその解の出自は問われない。1 体問題が厳密に解けたのは、実は問題が高い対称性を持っていたため極めて簡単な表式で解が書けたおかげである。実際 1 つの粒子が作る速度場は (6) 式の Oseen テンソルの粒子中心での多重極展開の 0 次と 2 次のトレースの線形結合で尽きている。

$$\boldsymbol{u}(\boldsymbol{r}) = \frac{3a}{4}\left[\left(1 + \frac{a^2}{6}\nabla^2\right)\mathsf{J}\right](\boldsymbol{r}) \cdot \boldsymbol{U} \tag{8}$$

ここで表記に関して注意しておく。Green 関数は一般に (相対) 空間に依存し、多重極展開ではその Green 関数の空間微分の微分係数が瀕出する。微分する変数 (例えば $\boldsymbol{r}$) とその微分係数を見積もる場所 (例えば $\boldsymbol{s}$) の間の混同を避けるため、本論文では以下のような表記を一貫して用いる。

$$[\nabla_i \mathsf{J}]\,(\boldsymbol{s}) := \left.\frac{\partial}{\partial r_i}\mathsf{J}(\boldsymbol{r})\right|_{\boldsymbol{r}=\boldsymbol{s}} \tag{9}$$

(8) 式は実際に $|\boldsymbol{r}| = a$ で $\boldsymbol{u} = \boldsymbol{U}$ を与える。残念ながら 2 体問題やそれ以上の多体問題にはこのような偶然はなく、多重極展開で頑張っても無限級数になる。これはその相互作用が本来粒子の表面全

[*14] 3 節ではベクトルをモーメントテンソルに一般化するが、その際モーメントは $\mathscr{U}$ のような筆記体、モーメントとモーメントを関係付ける行列は $\mathcal{M}$ のような筆記体を用いる。

[*15] 第ゼロ近似として当たりをつけるには悪くない。しかしそこに多体効果として有効粘性みたいな fitting parameter を安易に導入することは、正当化が議論できない限りは行うべきではない。

体に対する境界値問題の解であることに由来する。したがって支配方程式は線形であるが、2 体問題は単純な 1 体問題の重ね合わせではない。

■ 2 体問題　2 粒子問題の歴史を簡単に振り返る。2 粒子の問題を解析的に解く方法は各粒子の中心での極座標 (bi-polar coordinates 、双極座標) を使う方法と、2 粒子が接触する極限での漸近形を議論する lubrication theory (例えば、 O'Neill (1969) [74]) がある[*16]。剛体粒子の運動の自由度には、並進運動と回転運動がある。並進運動に関して、2 粒子の中心間ベクトル (以下単に「軸」と呼ぶ) 方向に平行な、2 粒子の同じ方向の運動は Stimson & Jeffery (1926) [89] が双極座標により解析し、Cooley & O'Neill (1969) [26] [*17] が接触時も含め対応する scalar 関数の値を計算した。2 粒子の反対方向の運動は Brenner (1961) [*18]が公式を示し、Cooley & O'Neill (1969) [25] が対応する scalar 関数の値を計算した。軸に垂直方向の運動に関しては、同方向の運動に対して Goldman, Cox & Brenner (1966) [*19] が、反対方向も含めて O'Neill & Majumdar (1970) [75, 76] が計算した。以上の結果は Batchelor (1976) [7] の表 1 と表 2 にまとめられている。この結果は粒子の並進速度と力の一般的な関係を与える。この記述のレベルを本論文では「 F バージョン」と呼ぶ。粒子の回転については、軸対称の問題を Jeffery (1915) [43] が双極座標で、Majumdar (1967) [66] が接触時について解いた。O'Neill & Majumdar (1970) [75, 76] は軸に反対称運動の並進と回転に関して、双極座標での解析と接触極限を示した。

これらの結果を統一的な形にまとめ上げたのが Jeffrey & Onishi (1984) [46] である。そこでは粒子の並進速度と角速度と、粒子が流体に及ぼす力とトルクの間の線形方程式 (以下この記述レベルを「 FT バージョン」と呼ぶ) として mobility 問題と resistance 問題を定義し、対称性から少数の scalar 関数でそれぞれを特徴づける mobility 行列と resistance 行列を書いた。この scalar 関数の粒子間距離 r に関する巾展開を求めるために、2 つの粒子の中心で Lamb の一般解 [34, 61] を用い、この極座標の間の変換を使って係数に対する漸化式を導出した。例えば resistance 問題の scalar 関数 X^A_{11} と X^A_{12} については以下の $V_{n,p,q}$ と $P_{n,p,q}$ に対する漸化式

$$V_{n,p,q} = P_{n,p,q} - \frac{2n}{(n+1)(2n+3)} \sum_{s=1}^{q} \left(\begin{array}{c} n+s \\ n \end{array} \right) P_{s,(q-s),(p-n-1)} \tag{10}$$

$$\begin{aligned} P_{n,p,q} = \sum_{s=1}^{q} \left(\begin{array}{c} n+s \\ n \end{array} \right) \Bigg[& \frac{n(2n+1)(2ns-n-s+2)}{2(n+1)(2s-1)(n+s)} P_{s,(q-s),(p-n+1)} \\ & - \frac{n(2n-1)}{2(n+1)} P_{s,(q-s),(p-n-1)} - \frac{n(4n^2-1)}{2(n+1)(2s+1)} V_{s,(q-s-2),(p-n+1)} \Bigg] \end{aligned} \tag{11}$$

[*16] そもそも lubrication theory のはじまりは Reynolds である、とのコメントを頂いた。O. Reynolds (1886), On the theory of lubrication and its application to Mr. Beauchamp Tower's experiments including an experimental determination of the viscosity of olive oil, *Phil. Trans. Roy. Soc.* **A177**, 157. (reference は Leal の本 [62] による。)

[*17] Faxén の法則で有名な Faxén の直接の仕事を私はあまり知らないが、この Cooley & O'Neill (1969) [26] には Faxén が同じ大きさの 2 粒子の接触時の場合を反射法 (1.2.3 節を参照) で解いた、とある: H. Faxén (1927), *Z. Angew. Math. Mech.* **7**, 79.

[*18] H.Brenner (1961), *Chem. Eng. Sci.* **16**, 242.

[*19] A.J.Goldman, R.G.Cox, and H.Brenner (1966), *Chem. Eng. Sci.* **21**, 1151.

を、初期条件 $P_{n,0,0} = V_{n,0,0} = \delta_{1n}$ で解いた解を使って、

$$X^A_{11}(r) = \sum_{p=0}\sum_{q=0} \{1 + (-1)^{p+q}\} P_{1,p,q} \left(\frac{a_1}{r}\right)^q \left(\frac{a_2}{r}\right)^q \tag{12}$$

$$X^A_{12}(r) = \frac{-2}{1+\lambda} \sum_{p=0}\sum_{q=0} \{1 - (-1)^{p+q}\} P_{1,p,q} \left(\frac{a_1}{r}\right)^q \left(\frac{a_2}{r}\right)^q \tag{13}$$

となる。ここで $\lambda = a_2/a_1$、a_α は粒子 α の半径である。この巾展開と lubrication theory の結果を結合させて、粒子間隔 r の接触極限から無限大まで統一的に表した。

流体に流れがある問題の中でも特に shear flow は応用上重要である。この shear と stresslet を含めた記述のレベルを以下「 FTS バージョン」と呼ぶ。simple shear flow のもとでの解は、同じ大きさの 2 粒子に対して Wakiya (1967,1971) [92, 93] が、一般の線形流での解は、任意の大きさの 2 粒子に対して双極座標を用いて Lin *et al.* (1970) [63] が、接触した場合は Nir & Acrivos (1973) [70] が計算した。Stokesian Dynamics 法 [16] (2.6 節を参照) が開発された当時、Jeffrey & Onishi (1984) [46] の厳密解に shear の影響が入っていない事が問題となった。当時は Arp & Mason (1977) [2, 3] に $1/r$ の展開と接触極限について限られた展開次数で解が与えられていただけであった。FTS バーションの 2 粒子問題は Kim & Mifflin (1985) [48] により boundary collocation 法を用いて数値的に求められた (ただし 2 つの粒子が同じ大きさの場合)。その後厳密な FTS バージョンの表式は Jeffrey (1992) [44] によって完結した。ちなみに Jeffrey, Morris & Brady (1993) [45] には pressure モーメントを含む表式 ($FTSP$ バージョン) に拡張され定式化がある。ここで Jeffrey と Kim & Mifflin では、FTS バージョンの mobility 問題の定義が違う点に注意に必要だ。また Jeffrey らの無次元化と Stokesian Dynamics 法での無次元化の違いにも注意しておく。陽にこの無次元化の違いが問題になる部分は無いと思うが、本論文では Stokesian Dynamics 法の習慣に従う。

■ 3 体問題　3 粒子以上では問題の対称性から、行列や scalar 関数の一般形、境界を特定する粒子配置の指定の方法も複雑になり、気合いの問題になってくる。しかし当然研究は存在する。私の知っている研究を挙げておくと、Kim (1987) [49] と Clercx & Schram (1992) [24] がある。このように 2 体問題のような一般的な状況に対する厳密な扱いは 3 体以上では事実上不可能である。これら多体問題を含む数値的なアプローチは、2 節で改めて概観する。

1.2.3　反射法

今ほど計算機の性能が高くなかった時代、多体相互作用の計算は人間が行っていた。反射法 (method of reflections) は、手間をかければ必要な精度の解を計算できることから広く用いられていた (例えば Happel & Brenner [34] を参照)。Kynch (1959) [52] によるとこの反射法は、はじめ Smoluchowski (1911)[*20] が用い、Burgers (1942)[*21] がその精度の改良を行ったとある。また同じ大

[*20] M.A.Smoluchowski (1911), *Bull. Acad. Sci., Cracow,* **1A**, 28.
[*21] J.M.Burgars (1942), *Proc. K. Ned. Akad. Wet.* **43**, 307, 425, 625.

きさの 2 球の軸に垂直方向の lubrication theory を示した O'Neill (1969) [74] によると、反射法は上記に加え Faxén (1927) [*22] と Burgars (1941) [*23] の仕事が挙げられている。

反射法は逐次法の一種である。mobility 形式、つまり粒子に働く力が分かっている状況で粒子の速度を求める問題に対する反射法の収束性は Luke (1989) [65] によって証明されている。しかし resistance 形式、つまり逆に速度から力を求める問題についてはその収束性が分かっていなかった。以下では、この resistance 形式の反射法の収束性の破綻に関する我々の仕事 [41] を紹介する。

■ resistance 問題の反射法再考　場所 $\boldsymbol{x}^\alpha$ にあり力 $\boldsymbol{F}_\alpha$ を流体に及ぼす粒子 α が場所 $\boldsymbol{x}$ に作る速度乱れは次のように書ける。(厳密な議論は 3 節で行い、ここでは天下りにこの式から始める。)

$$\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{8\pi\mu}\left[\left(1+\frac{a^2}{6}\nabla^2\right)\mathsf{J}\right](\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^\alpha)\cdot\boldsymbol{F}_\alpha \tag{14}$$

ここで $\mathsf{J}(\boldsymbol{r})$ は Oseen テンソル (6) である。この式は力から速度を与える。一方粒子の速度 $\boldsymbol{U}_\alpha$ から力を与える関係として Faxén の法則がある[*24]。(明らかには書いていないが、これも 3 節の議論で導出は尽きているので、ここでは天下りに書く。)

$$\boldsymbol{F}_\alpha = 6\pi\mu a\left\{\boldsymbol{U}_\alpha - \left[\left(1+\frac{a^2}{6}\nabla^2\right)\boldsymbol{u}'\right](\boldsymbol{x}^\alpha)\right\}, \tag{15}$$

ここで $\boldsymbol{u}'(\boldsymbol{x})$ は $\boldsymbol{x}$ での流体の速度である。ここでは粒子の内部も流体が連続的に存在していて、粒子表面で「現実」の粒子の境界条件を満たすような、そういう問題を解いていると考える。粒子 α が存在する正しい境界条件を満たす厳密な速度場 $\boldsymbol{u}'$ が分かれば、(15) は厳密な力を与える。しかし一般にはこの解は求まらない。逆に今の目的はその解を求めることだ。反射法では、この解を以下のように逐次的に構成する: 最初に何か速度場を仮定する (例えば相互作用を無視して $\boldsymbol{u}'=\boldsymbol{0}$ とおく)。次に (15) 式によって力を修正する。その力の作る修正された速度場を (14) 式で計算する。次に再び (15) 式によって、というように繰り返す。

簡単のためまず 2 体問題 (粒子 α と β) を考える。最初すべての相互作用を無視すると、並進速度 $\boldsymbol{U}_\alpha$ を持つ粒子 α は (15) 式より Stokes 抵抗そのものを得る。

$$\boldsymbol{F}_\alpha^{(0)} = 6\pi\mu a\boldsymbol{U}_\alpha \tag{16}$$

[*22] H. Faxén (1927), *Z. Angew. Math. Mech.* **7**, 79.

[*23] J.M.Burgars (1941), *Nederl. Acad. Wetensch. Proc. (Amsterdam)* **44**, 1045, 1051.

[*24] これは「法則」と名が付いていることで混乱を招く。数学的には、Stokes 問題が positive-definite な線形問題なので速度場が完全に分かっていればそれを作るべき力も分かる、というだけの関係である。「$\boldsymbol{u}'$ が粒子の無い時の速度場で云々」という物理的な言説が混乱を増している、というのが論文 [41] を書いた時の John F. Brady の意見であり、現在の私自身の気持ちである。つまり Batchelor (1972) [6] の付録にある導出は、式だけ見ればよくて文章は読むな、ということ。混乱の原因の一つは相反定理を使った導出にある。相反定理は支配方程式の対称性から別々の二つの問題を関係付けるもので、直観的に分かりにくい (二つの別の問題が同時に起こる事は現実にはない)。また結果の精度についても曖昧である (実際 *boldsymbolu′* が粒子 α が無い時の速度場でも (15) 式が厳密な場合がいくつかある。)。3 節の取扱はその解 (例えば次の (22) 式) の精度に対する系統的な考察を与える。Faxén の法則は相反定理を用いて elegant に証明できるが、相反定理を用いなくても証明できる (第 3 節を参照)。更に言えば、その証明に相反定理は本質的ではないと私は思う。

添字の (0) は 0 次の反射 (つまり反射無し) を意味する。この粒子 α の力は速度に乱れを作る。その速度場は (14) 式から次のように書ける。

$$\boldsymbol{u}^{(0)}(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{8\pi\mu}\left[\left(1+\frac{a^2}{6}\nabla^2\right)\mathsf{J}\right](\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^\alpha)\cdot\boldsymbol{F}_\alpha^{(0)} \tag{17}$$

この粒子 α が作った速度場を (15) 式に代入すると、粒子 α から粒子 β への 1 次の反射 (と便宜的に呼ぶが、最初の補正) を含んだ力が求まる。

$$\boldsymbol{F}_\beta^{(1)} = 6\pi\mu a\left\{\boldsymbol{U}_\beta - \frac{1}{8\pi\mu}\left[\left(1+\frac{a^2}{6}\nabla^2\right)^2\mathsf{J}\right](\boldsymbol{x}^\beta-\boldsymbol{x}^\alpha)\cdot\boldsymbol{F}_\alpha^{(0)}\right\} \tag{18}$$

この操作を繰り返すと、i 次の反射を持つ力を次のように漸化式の形で書ける。

$$\boldsymbol{F}_\beta^{(i)} = 6\pi\mu a\left\{\boldsymbol{U}_\beta - \frac{1}{8\pi\mu}\left[\left(1+\frac{a^2}{6}\nabla^2\right)^2\mathsf{J}\right](\boldsymbol{x}^\beta-\boldsymbol{x}^\alpha)\cdot\boldsymbol{F}_\alpha^{(i-1)}\right\} \tag{19}$$

N 粒子以上に拡張するには、各粒子が作る速度乱れを重ね合わせればよい。結果として resistance 問題の反射法は次のような行列の関係式にまとめられる。

$$\begin{aligned}\boldsymbol{F}^{(i)} &= \mathcal{I}\cdot\left[\boldsymbol{U}-\tilde{\mathcal{M}}\cdot\boldsymbol{F}^{(i-1)}\right]\\ &= \mathcal{I}\cdot\left(\mathsf{I}+\sum_{k=1}^{i}\left[-\tilde{\mathcal{M}}\cdot\mathcal{I}\right]^k\right)\cdot\boldsymbol{U}\end{aligned} \tag{20}$$

ここで行列 $\mathcal{I}$ と $\tilde{\mathcal{M}}$ はそれぞれ以下のように定義する。

$$\mathcal{I} = 6\pi\mu a\,\mathsf{I}, \qquad \tilde{\mathcal{M}} = \begin{bmatrix} 0 & \mathsf{M}_{12}^F & \cdots & \mathsf{M}_{1N}^F \\ \mathsf{M}_{21}^F & 0 & \cdots & \mathsf{M}_{2N}^F \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathsf{M}_{N1}^F & \mathsf{M}_{N2}^F & \cdots & 0 \end{bmatrix} \tag{21}$$

I は単位テンソル、$\mathsf{M}_{\alpha\beta}^F$ 次のように与えられる。

$$\mathsf{M}_{\alpha\beta}^F = \frac{1}{8\pi\mu a}\left[\left(1+\frac{a^2}{6}\nabla^2\right)^2\mathsf{J}\right](\boldsymbol{x}^\alpha-\boldsymbol{x}^\beta) = \frac{1}{8\pi\mu a}\left[\left(1+\frac{a^2}{3}\nabla^2\right)\mathsf{J}\right](\boldsymbol{x}^\alpha-\boldsymbol{x}^\beta) \tag{22}$$

ここで $\nabla^2\nabla^2\mathsf{J}=0$ に注意する[*25]。また (20) 式のベクトルは以下のように要素に各粒子のベクトルを含むように拡張した。

$$\boldsymbol{F}^{(i)} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{F}_1^{(i)} \\ \vdots \\ \boldsymbol{F}_N^{(i)} \end{bmatrix}, \qquad \boldsymbol{U} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{U}_1 \\ \vdots \\ \boldsymbol{U}_N \end{bmatrix} \tag{23}$$

[*25] 多くの文献で $\mathsf{M}_{\alpha\beta}^F$ は「 Rotne–Prager テンソル」と呼ばれているが、同時期の Yamakawa の仕事は忘れてはならない、とのコメントを頂いた。J. Rotne and S. Prager (1969), Variational treatment of hydrodynamic interaction in polymers, *J. Chem. Phys.* **50**, 4831; H. Yamakawa (1970), Transport properties of polymer chains in dilute solution: Hydrodynamic interaction, *J. Chem. Phys.* **53**, 436.

この再定式化から、resistance 問題の反射法が実は次の線形方程式

$$\boldsymbol{U} = \left(\mathcal{I}^{-1} + \tilde{\mathcal{M}}\right) \cdot \boldsymbol{F} \tag{24}$$

を $\boldsymbol{F}$ について解く Jacobi の逐次法 (行列の分離による逐次法、あるいはクーラン–ヒルベルト [99] の 1 章の Neuman 級数) に相当することが分かる。注意するべきは、この行列 $(\mathcal{I}^{-1} + \tilde{\mathcal{M}})$ が (14) 式の打ち切りでの mobility 行列 $\mathcal{M}^{\infty}$ そのものであることだ。これは今の状況からはそうあるべきものであるが[*26]、resistance 問題の反射法の帰結としてその極限が行列 $\mathcal{M}^{\infty}$ の反転であることを示した意義はある。

証明した命題はその時点で自明になる。すると自明なものの証明の意義が分からなくなったりして混乱する。実際この論文 [41] のそもそもの動機である「行列の反転と多体効果の関係」についても、色々なレベルの納得がある: a) 逆行列の各要素はもとの行列の全部の要素に依存するので、この意味で多体効果が入るのは当り前。b) 逆行列を求めることは連立方程式を解いている事なので、「連立」という意味で多体効果が入っているのは当り前。しかしここでの議論の結果はもう一歩踏み込んでいて、c) 行列の反転により考慮される多体効果は多粒子間の相互作用の反射を全部 (無限に) 取り込んでいるものだ、ということを示している。しかし再び、「実は $a) = b) = c)$ ではないか！」と思う訳で、結局自明な事を言っているだけなのかも知れない。

■ resistance 問題の反射法の破綻　resistance 問題の反射法の極限が行列 $\mathcal{M}^{\infty}$ の反転の逐次解法であったことが分かった。その逐次法は以下の分離

$$\mathcal{M}^{\infty} = \mathcal{I}^{-1} + \tilde{\mathcal{M}} \tag{25}$$

に基づいて構成され、右辺第一項の逆 (1 体問題の解) を first guess として、右辺第二項 (相互作用部分) を逐次的に補正していくものだ。容易に想像できるように、その収束性は first guess の良さ、あるいは同じ事だが補正項の小ささによる。この逐次法の計算には分離の一方である $\mathcal{I}^{-1}$ の逆 (つまり $\mathcal{I}$) が必要である。first guess の精度を最高にすることは補正項をゼロにすることで、$\mathcal{M}^{\infty}$ 自身の逆 (つまり解そのもの) を first guess に用いることに他ならない。(25) 式の分離による逐次法である反射法は一体効果の逆 $\mathcal{I}$ が自明であることにより、簡単な計算で構成できている。この反射法の収束性は「一体近似」が許される状況、例えば希薄な場合によくなる。逆にそれが悪くなる状況では収束しない。論文 [41] では $N \geq 3$ で粒子間隔がせまい時に実際に反射法が発散することを示した。

Kim & Karrila [50] は 8 章で反射法を議論しており、p.197 の図 8.3 に 3 粒子の resistance 問題の結果が示されている。これは Kim (1987) [49] の図 1 に対応する。興味深いのは Kim & Karrila の図に「numerical instability」とコメントされている発散挙動だ。論文では「$r = 2.16$ で発散する」とある。我々の解析からこの発散は反射法の破綻であることが分かる。実際 $N = 3$ では $r = 2.1567$ で逐次行列 $\tilde{\mathcal{M}} \cdot \mathcal{I}$ の spectrum radius が 1 を越える、つまり反射法自身が破綻することを示した。

ここでの反射法 (20) は通常のそれとは異なり、(14) 式で考慮するモーメントをはじめから固定している。つまり高次の反射はより高い精度を表すが、通常それと同時に導入される同じ精度の高

[*26] つまり、力を未知数として速度を求める問題は、ある精度での mobility 問題であるべき、と言う意味。

次のモーメントはここでは考慮していない。しかし高次のモーメントを導入してもこの破綻が救われないことは、3 節で示す高次の Stokesian Dynamics 法の計算により確認した [41] 。

1.2.4 沈降速度とその分散

以上では 1 体から 2 体、あるいは 1 次、2 次と相互作用を積み上げていく話を見た。ここでは、はじめから粒子が沢山存在する分散系の物性に対して希薄極限での体積分率 ϕ の展開による解析を見ていく。最初に相互作用の長距離性が沈澱速度に及ぼした話を概観する。沈澱速度はある意味 rheology よりも基本的な suspension の問題であるが、未だ完全には解決されていない (例えば Davis & Acrivos (1985) の沈澱に関するレビュー [28] を参照)。Batchelor (1972) [6] のイントロには、Smoluchowski (1912) [*27] にはじまる沈澱速度の問題の、その当時の混乱した状況が読める。

■ Batchelor の繰り込み　混乱の 1 つは $1/r$ の依存性をもつ相互作用を一様系に素朴に適用すると発散してしまうことである。Batchelor [6] は数学的な性質を巧妙に用い、最初に現実的な挙動に一致した (つまり発散しない) 結果を示した:

$$\frac{U(\phi)}{U_0} = 1 - 6.55\phi + O(\phi^2) \tag{26}$$

そこでは二体相互作用を full order で取り込んでいる。三体効果は $O(\phi^2)$ 以上で表れる。この Batchelor の処方は、後に Saffman (1973) [82] のスマートな議論から、数学的には相互作用の波数空間での波数 0 の寄与を落す事が分かった。この Saffman の議論では、ランダムな配置と規則的な配置での沈降速度の ϕ に関する巾の違いも説明されている。前者は ϕ の一次に対して、後者は $\phi^{1/3}$ が leading term となる。ちなみに規則格子の沈降速度は Hasimoto (1959) [35] により Ewald 和を使って議論されており、そこでは実際に $\boldsymbol{k} = \boldsymbol{0}$ の寄与を除いて収束する結果を得ている。Batchelor の処方が物理的には考慮する領域での平均速度のフレームにのって見る、つまり速度の基準を領域の平均速度にとることに相当することは、O'Brien (1979) [73] により遠方の境界条件を積分方程式で陽に考慮することで示された。

■ 分散の発散　沈澱速度は $1/r$ の依存性をもつ相互作用の平均に関するものだ。一方速度の分散に関しても類似の発散挙動が、Batchelor の処方を課した後も (つまり平均の発散を繰り込んだ後も) 存在する事が Caflisch & Luke (1985) [20] によって指摘された。この理論的な帰結 (発散) と実験事実 (非発散) の間の矛盾は多くの研究を生んだ。ここでは最近の仕事を実験と理論から 2 つに限って挙げておく。Segrè *et al.* (1997) [87] は実験で沈澱する粒子の速度を観測した。その結果、速度の分散に容器サイズに対する線形の依存性はなく、また速度場には Batchelor が仮定したような一様性はなく空間的な相関があり、その相関長が $\phi^{-1/3}$ でスケールされることを示した。発散が生じない起源を空間構造に求める理論は Koch & Schaqfeh (1991) [51] にあったが、そこでは ϕ^{-1} と予測した。Brenner (1999) [19] は系を実際に束縛している容器の影響を考慮し、壁による相互作用の

[*27] M. Smoluchowski (1912), On the practical applicability of Stokes' law. *Proc. 5th Intern. Cong. Math.* vol.2, 192.

反射などにより $1/r$ の相互作用が有効的に問題を生じない形になっていることを、数値計算と理論解析から指摘した。

■ 沈降速度再考　沈降速度については、小さいが本質的かも知れない疑問がある。この疑問とは、Batchelor が示した ϕ の一次の係数 −6.55 は、実験で観測される値や、経験則である Richardson-Zaki 相関

$$\frac{U}{U_0} = (1-\phi)^{\alpha} \tag{27}$$

の指数 α が 5 前後で実験とよく一致するという事実と有意に違う点である。この問題については色々議論されている。例えば Brady & Durlofsky (1988) [17] は二体相互作用の 1 次以上の高次の力モーメントは効かないとして ϕ の一時の係数を −5 と主張している。この仕事の当時のポイントは、むしろ二体分布関数に hard core 系の Percus–Yevick 分布関数を使った点にある。(Bathelor は一様分布、つまり step 関数を用いている。) 更に hard core の場合 Percus–Yevick 分布関数の厳密解が分かっているので、これを用いて沈降速度の ϕ に関する解析的な関数形

$$\frac{U}{U_0} = \frac{(1-\phi)^3}{(1+2\phi)} \tag{28}$$

を書き下した。Brenner (1999) [19] は分散による寄与は Batchelor の寄与 -6.55 とは逆となり、定性的に実験事実に近くなると述べている。理由は簡単で、濃度が平均値から均等に分散していれば高濃度の寄与の方が (粒子数が多いので) 大きくなるからだ。こうくると我々の仕事 [37] に関してコメントしなければならない。結論だけ言うと、そこでの結果は誤解を招きやすい。行った計算は、Brady & Durlofsky (1988) の計算に高次のモーメントの効果を追加するというもので、その方法に Stokesian Dynamics 法で用いられた lubrication correction のアプローチを応用した。この場合、希薄極限で $1 - 6.492\phi$、解析表現として $(1-\phi)^3/(1+2\phi+1.492\phi(1-\phi)^3)$ を示した。

この問題に対しては大きく二つの立場がある。一つは Batchelor の解析が正しい、あるいは高次の力モーメントの寄与は効くと言う立場で、もう一つは Batchelor の解析が正しくない、あるいは高次の力モーメントの寄与が実際には効いていない言う立場である。我々 [37] (及び Batchelor 1972) は前者、Brenner (1999) [19] や Brady & Durlofsky (1988) [17] は後者に立っている。個人的には最近は後者が有利な気がしている。

数値解析については、ランダム配置の沈澱速度の濃度依存性についての Stokesian Dynamics 法による数値解析は Phillips *et al.* (1988) [77] に、規則格子構造に対しては Zick & Homsy (1982) [98] にある。

1.2.5　拡散係数

suspension が熱平衡状態にあると考えると、いわゆる Einstein の関係 (1) により拡散係数が抵抗係数と関連することが分かる。(例えば岩波講座現代物理学の基礎「統計物理学」[101] の 5 章を参照。) 直観的には、熱揺ぎ、つまり熱による平均からのずれの緩和も、熱以外で外的に加えられた作用による応答も同じはずで、熱揺ぎと外力による応答は相互に関係を持ち、抵抗係数がわかると

拡散係数が分かる。多体問題の場合は、抵抗係数の自己部分 R の逆行列の対角成分が短時間自己拡散係数 D_0^s になる。

$$D_0^s = kT\langle \mathrm{tr}\left(\mathsf{R}^{-1}\right)\rangle \tag{29}$$

上付き添字 s は自己 (self)、下付き添字 0 は短時間 ($t \to 0$) を表す。ここで tr は対角成分の抜きだし、$\langle\rangle$ は粒子配置に関する平均を意味する。

D_0^s の体積分率 ϕ による展開も昔から研究されている。Batchelor (1976) [7] は沈降速度と同様に 2 体相互作用を full order で計算して以下の結果を示した。

$$D_0^s = \frac{kT}{6\pi\mu a}\left(1 - 1.83\phi\right) \tag{30}$$

Beenakker & Mazur (1983) [12] は 2 体効果より高次の効果を Mazur & van Saarloos (1982) [67] の方法を用いて計算した。3 体効果まで考慮した virial 展開により

$$D_0^s = \frac{kT}{6\pi\mu a}\left(1 - 1.73\phi + 0.88\phi^2\right) \tag{31}$$

濃度分布の揺らぎの 2 次まで考慮した数値計算により

$$D_0^s = \frac{kT}{6\pi\mu a}\left(1 - 1.96\phi\right) \tag{32}$$

を示している。ϕ の一次の係数が Batchelor の結果と違うのは、Batchelor が 2 体相互作用を full order で計算しているのに対して、Beenakker & Mazur はそれぞれの展開に必要な次数までしか考慮していないことによる。Beenakker & Mazur (1984) [13] は波数依存する拡散係数も求めている。$k \to \infty$ の極限で自己拡散係数 D_0^s に収束するはずだが、前の論文 [12] の結果からずれている。それは波数依存により考慮される ring correlation の影響である。この論文では逆の $k \to 0$ の極限での collective 拡散係数の結果も示している。

数値解析は Phillips *et al*. (1988) [77] の Stokesian Dynamics 法による結果がある。

1.2.6 rheology

suspension の rheology である shear の応答としての粘性率を見る。この問題の最初の研究は Einstein (1906, 1911)[*28]である。これは先に紹介した 2 体問題の研究 (例えば Stimson & Jeffery (1926) [89]) に先行している。それは粘性率の体積分率 ϕ での展開は、0 次が流体の粘性そのものであり、1 次が 1 体問題の寄与であることによる。Einstein の結果は次のように得られる。

$$\frac{\mu_e}{\mu} = 1 + \frac{5}{2}\phi \tag{33}$$

ここで μ_e は有効粘性率、μ は流体の粘性率である。

[*28] A. Einstein (1906), *Ann. Phys.* **19**, 289, *ibid* (1911), **34**, 591. その導出は、例えばランダウ-リフシッツ「流体力学」[100] §22 に簡潔に、また Batchelor [4] §4.11 に液滴の分散系を含む一般形で示されている。

当然 2 体効果を使った 2 次の寄与も計算されている。その係数を A としよう。

$$\frac{\mu_e}{\mu} = 1 + \frac{5}{2}\phi + A\phi^2 \tag{34}$$

Batchelor らはこの計算のために線形流の中での 2 体問題の解を Batchelor & Green (1972) [9] にまとめ、これらを用いて Batchelor & Green (1972) [8] で二つの流れ、つまり pure straining motion と simple shearing motion に対してそれぞれ $A = 7.6$ と 5.2 を得た。Beenakker (1984) [10] は拡散係数と同様に波数依存する有効粘性率 $\mu(k)$ を計算している。ここで $\mu(k \to 0) = \mu_0$ で、$\mu(k \to \infty) = \mu_e$ である。一様分布 (動径分布に step 関数を使う) に対して $A = 4.84$ の結果を得た。Batchelor の結果との違いは拡散係数の場合と同様である。

shear に対する応答の数値解析は、ランダム配置に対して Stokesian Dynamics 法により Phillips *et al*. (1988) [77] に、規則格子構造に対しては Nunan & Keller (1984) [72] にある。

2　microhydrodynamics の計算手法

2.1　数値計算の意義

物理には伝統的に「多体問題」という一筋縄ではうまく記述できない問題、つまり「解けない問題」のある種の言い替えであるカテゴリーがある[*29]。本屋で見掛ける「多体問題」は主に電子系である。それらは基本的に相互作用の長距離性や多体性から一般に解析が困難な問題と言える。ここで「解析が出来る」という意味は、平均場近似 (1 体近似) が出来る、くらいの意味だろう。逆に言うと、系統的に物事を理解しようと思う時人は大概まわりを塗りつぶして主体だけで記述 (1 体近似) しようと考える。現象の本質を捉えていれば、現象論とか平均場近似とかは自然と分かる。この本質が見える人はやはり非凡なのだろうが、見えていない時に見えた気になって適当な理論を作り、その正否を通して本質を掴もうとするアプローチもあるだろう。しかし正功法は現象そのものを虚心に正確に眺めて本質を感じとろうとするアプローチだ。そのための手段に実験があるという見方もある。数値解析を行っていると実験はつくづく偉いと感じ、また羨ましく思う。全てがそこに存在しているからだ。しかし実験では見たくない雑多な要素も同時に必然的に含まれてしまう。この時、正確な数値シミュレーションは実験に代る重要な地位を占める。世の中に存在する「数値シミュレーション」は、「多体問題」などの良く分からない現象が一体どうなっているのかを見るために行われていると思う[*30]。長距離相互作用する多体系として microhydrodynamics は重力多体系ともよく似ている。重力多体系に関しては本シリーズの論文に「重力多体系の数値解析」[108] がある事を紹介しておく。そこに見られるように重力多体系は数値解析が大変進んでいる。重力多体系に関しては 4.2 節で、またより一般的な数値手法の文脈においては 5 節で再び議論したい。

[*29] したがって、「非線形」とか「非平衡」、「複雑流体」、「複雑系」などの non-... という命名と同様、このレッテル貼りに生産的意味はない。せいぜい研究対象をひとまとめにする程度の意味だ。

[*30] こう思うと、安易なシミュレーションにはほとんど価値がない。理論解析や実験を補うのではなく、一歩進んで理論解析や実験を置き換え得るシミュレーションが、「(物性) 研究者のための計算手法」の目指すべきものだろう。

話を microhydrodynamics に戻す。ここでは支配方程式は線形だが問題が境界値問題であるという事実から、2 粒子問題の解は 1 粒子問題の解の単純な重ね合わせではない。この意味では問題は線形ではない。実際剛体球形粒子の問題でさえ厳密解が得られているのは 2 粒子 [46] までであり、3 粒子以上になると一般解は陽には求まっていない。したがって分散系の巨視的な物理を表す現象論やモデルの正当性を決める手段として、数値手法は極めて重要である。

以下では再び私の知っている限りにおいて、mircohydrodynamics の数値シミュレーションを概観する。連続体の数値解析には、大きく分けて二通りのアプローチがある。この有限要素法 (FEM) と境界要素法 (BEM) を最初に見る。前者は素朴な連続場の差分化を基礎においた手法で、後者は微分方程式で書かれた支配方程式を境界積分に書き直した積分方程式を出発点においた手法である。後者の具体的な計算法には境界面の差分化によるアプローチに加え、展開によるアプローチがある。これが 3 節で議論する手法に継るものである。FEM から BEM に移った段階で見掛け上流体の存在がなくなり、問題は境界、つまり今の場合は粒子の問題に帰着される。連続体の数値解析を離れてこの粒子系の数値解析というカテゴリーを最後に概観する。ここで紹介するうち boundary collocation 法と多重極展開に関しては Weinbaum & Ganatos (1990) のレビュー [94] がある。

2.2 有限要素法

有限要素法のアプローチは、記述しようとする連続体の支配方程式である微分方程式を直接差分化し数値的に解くものだ。これは「計算流体力学」の筆頭に挙げられるアプローチである。原理的には差分を細かくとることで精度を上げられ、計算コストは差分の細かさによる。この時の参照点は 3 次元の場合は考える空間の体積に比例するため、狭い空間に束縛された問題や周期境界条件での問題に有効なアプローチだ。逆に自由境界条件のような広い空間の問題に対しては何らかの工夫が必要であろう。このカテゴリーの方法では「粒子数が増えても計算 cost は増加しない」という言説が散見されるが、今述べた通り「体積に比例して増加する」と読むべきでる。ある要求精度に対して一定の空間で粒子数が増えると、考慮すべき点も当然増える。このアプローチの一番の長所はその素朴さにあり、単純流体に限らず支配方程式が既知な場合は基本的に計算可能である。また microhydrodynamics に関して言うと、Navier–Stokes 方程式を基礎に置く場合 Stokes 近似の制限を受けないという長所がある。

■ big projects　近年の計算機の性能の飛躍的な進歩から、現在の technique を大規模に応用して something new の発見を目指す project がいくつか存在する。FEM を徹底的に押し進める路線として、D. D. Joseph らが行っている固液系の直接計算を行おうとするプロジェクトがある[*31]。machine power があればこの程度まで出来るのか、と感じさせるデモがその web 上で見られる。そこでのボトルネックは、ダイナミクスを見る場合にメッシュを切る過程にあるようだ。

日本でも土井正男氏を中心に名古屋大学高機能材料設計プラットフォーム研究体の進めるプロ

[*31] http://www.aem.umn.edu/Solid-Liquid_Flows/

ジェクトがある[*32]。その目的は soft materials の色々なスケールでの現象を統一的に扱える数値解析のプラットフォームの創造である。その中の microhydrodynamics のスケールでの記述には、その柔軟性から FEM 的なアプローチをとっている。このことにより、例えば相転移や反応が入った状況など様々なモデルを統一的に扱える。このプロジェクトは、microhydrodynamics という近視眼的な見方を超えた「様々なスケールの統一的な記述」に重きがある。

■ lattice Boltzmann　lattic Boltzmann によるアプローチは、流体を格子上で近似的に記述しようとする試みから生まれたものである。この手法はもともと computer 上で簡単な規則により流体の本質を表現しようとするものであり、計算効率で見ると他の数値解析に比べて圧倒的な performance を持つ。また Navier–Stokes 方程式との接続も理論的に確立している。単純さによる柔軟性もあり、最近は多成分流体などの分野でも人気があるようだ。

分散系である microhydrodynamics への応用は Ladd (1988,1994) [57–59] により行われている。Ladd はもともと Stokesian Dynamics 法に近いアプローチでの microhydrodynamics の数値解析を行っていた [53–56]。しかしその計算コストの高さを克服するために lattice Boltzmann にシフトしたようだ。

2.3　境界要素法

有限要素法は支配方程式である微分方程式を生に差分化して問題を計算機にのせるアプローチであった。一方境界要素法はもともとの微分方程式を境界値問題に適した境界積分方程式に変形し (例えば Ladyzhanskaya [60] を参照)、その積分方程式を計算機にのせるアプローチである。この方法の特徴は、解くべき空間の次元を 3 次元から 2 次元に落したことにある。このことから差分方程式を解くコストは小さくなることが期待される。特に広い空間や無限に広がった非拘束系など、有限要素法では扱えない問題が扱える。この文脈で多重極展開を用いるアプローチは 2.4 節で独立に扱う。

■ 自由境界条件　Yungren & Acrivos (1975) [96] は剛体表面に対して、Rallison & Acrivos (1978) [79] は液-液系のような変形する表面に対して、定式化を行った。当時の計算機の能力から、具体的に扱われた系は 1 体問題であった。

■ 周期境界条件　自由境界条件での積分方程式の定式化を周期境界条件に応用したのは Zick & Homsy (1982) [98] と Nunan & Keller (1984) [72] である。そこでは Hasimoto (1959) [35] の Ewald 和をとった Oseen テンソルが使われる。

■ boundary collocation 法　境界要素法と同様に境界値問題を直接扱うが、より直接的なアプローチが boundary collocation 法である。そこでは境界条件を表面上の有限個の点で課す。Gluckman *et al.* (1971) [32] や Ganatos *et al.* (1978) [31] がその具体的な実装である。そこでは粒子が作る流

[*32] `http://www.zoom.cse.nagoya-u.ac.jp/`

れを Lamb の一般解 [34, 61] で書き、その係数を境界条件から粒子表面上の点で決定する。そこでは 3 体問題など具体的な問題を計算してある。Kim & Mifflin (1985) [48] はこの方法で 2 体問題を解いた。直接的なアプローチからこの手法は一世を風靡した。しかし最大の問題は collocation point の選択によりパラメータを決定する線形方程式が singular になり得ることにある。このため動的な問題に用いることは困難となる。

2.4 多重極展開

ここでは、3 節で再定式化を試みる多重極展開について、過去の解法をまとめて概観する。

■ Lamb の一般解　これまで頻繁に出て来た Lamb の一般解 [34, 61] は Stokes 流れの一般解を極座標で球面調和関数を使って表したもので、計算機が使われる以前に粒子の問題を解析する上で重要なものであった。Jeffrey & Onishi (1984) [46] が 2 体の厳密解をまとめた際にも使われた。

■ Laplace 方程式の解を使うアプローチ　Stokes 方程式 (5) が Laplace equation $+\alpha$ であることから、調和関数を修正して Stokes 方程式の解を作るアプローチである。今井功「流体力学 (前編)」[102] 第 9 章で示される展開はこのカテゴリに入る。この方法では電子系の定式化で得られた結果を直接応用できる。特に周期系ではその長距離性から Ewald 和が必須となるが、電子系に対しては古くからその定式化が行われていた。Hasimoto (1959) [35] の古典的な解析はこの文脈で行われ、規則格子の抵抗係数の濃度依存性が計算されてる。

私見であるが、調和関数を用いる先の Lamb の一般解やこのアプローチは本来 Stokes 方程式の基本解が調和関数そのものではないため計算に余分なコストが必要であり、その処理の煩雑さが見通しを悪くしていると思われる。この点が、3 節で試みた多重極展開の再定式化の一つの動機である。

■ Fourier 空間での多重極展開　Mazur & van Saarloos (1982) [67] は Fourier 空間で irreducible モーメントを使って多粒子問題を定式化した。1.2 節で見た通り多体効果の系統的な計算などの理論解析で用いられ、拡散係数 [12, 13] や有効粘性率 [10] の解析を与えた。

数値手法への実装は、Ladd (1988) [53] が行った。そこではもともとの Fourier 積分を Fourier 級数に置き換えることで直に周期境界の問題として定式化される。

■ 実空間での多重極展開　Stokes 方程式の Green 関数は Oseen テンソルである。一般解は原理的にこの Oseen テンソルの微分展開で構成できる。Hasimoto & Sano (1980) [36] のレビューによると Batchelor (1970) [5] 、Imai (1972)[*33]、Chwang & Wu (1975) [22] により Oseen テンソルの微分展開の 1 次までが陽に求められた、とある。その Chwang & Wu によると、この微分展開を実空間

[*33] I. Imai (1972), "Some applications of fuction theory to fluid dynamics." *2nd Int. JSME Symp., Fluid Machinery and Fluidics, (Tokyo)* pp.15–23. 多重極展開の議論は今井功「流体力学 (前編)」[102] 第 9 章の調和関数の微分展開として示されているものと同じであると思われる。

で行う定式化 (singularity method) は Lorentz (1897)[*34]、Oseen (1927)[*35]、Burgers (1938)[*36] にはじまる、とある。ここでは、物理的に意味を持つ力、トルク、stresslet が必然として出て来る。つまり物理的に見通しのよい定式化である。しかし一方で、物理量にあまりにも密着した定式化であるため、系統的な高次への一般化が明らかな形では行われていない。

周期境界での取扱も、原理的には Oseen テンソルに Ewald 和を施した周期境界での Green 関数を使えばよい。この定式化は Beenakker の簡潔な 2 ページの論文 [11] で行われる。数値手法への実装は Brady らにより Stokesian Dynamics 法 [16] としてまとめられた。

線形性から、解は正規直交系など任意の関数系で表すことができる。一般にどの関数系を使うかは問題によって最適なものを選べば良い。関数系の間の関係は、例えば Oseen テンソルの微分展開と Lamb の一般解、つまり球面調和関数による展開の間の関係は、低次に限られるが Weinbaum & Ganatos (1990) [94] のレビューに与えられている。

3.2 節では、この実空間での多重極展開の再定式化を示す。

2.5 粒子法

ここでは連続体の数値解析を離れて、粒子系の数値解析について本論に関係する部分に限って概観する。Brady & Bossis (1988) のレビュー [16] は Stokesian Dynamics 法の紹介にとどまらず、そのイントロダクションで粒子系の数値解析に対して興味深いまとめをしている。微視的なスケールから巨視的なスケールに移るにしたがって、molecular dynamics, macromolecular dynamics, Stokesian dynamics(Brownian dynamics を含む), granular dynamics, stellar dynamics を挙げ、それらの間に入れ子状の類似性があると指摘した。つまり molecular dynamics と stellar dynamics はともに真空中を中心力で運動する質点であり、macromolecular dynamics と granular dynamics は相互作用は複雑になるが本質的に真空中の運動であり、Stokesian dynamics (流体中の粉体を含む) はもっとも複雑な階層で、そこでは連続体と粒子相互作用の両者が重要となる。本論文では 4.2 節で、この類似性とは異なった Stokesian dynamics と stellar dynamics (重力多体系) の類似性とそこから見えて来る「多体系の数値解析」という統一的な framework について議論する。

2.5.1 molecular dynamics

多粒子系の挙動を考えるために、粒子の運動方程式を直接解くのが molecular dynamics (MD) の精神である。そこで考えている粒子とは文字通り分子である。分子は真空中をある速度をもって飛んでいる。分子は衝突するだけで相互作用を持たないとして、いわゆる event-driven な数値スキームが Alder & Wainwright (1959) [1] によって定式化された。つまり粒子の軌跡は衝突を除き弾道的

[*34] H.A.Lorentz (1897), A general theorem concerning the motion of a viscous fluid and a few consequences derived from it. *Versl. Kon. Akad. Wet. Amst.* **5**, 168–175.

[*35] C.W.Oseen (1927), *Hydrodynamik.* Leipzig: Akad. Verlag.

[*36] J.M.Burgars (1938), On the motion of small particles of elongated form suspended in a viscous liquid. Chap. III of *Second Report on Viscosity and Plasticity. Kon, Ned. Akad. Wet., Verhand.* **16**, 113–184.

で、軌跡から粒子間距離が計算できるので、衝突時刻、衝突場所が特定され、一番先に衝突する対を探して衝突、つまり速度を反転させることを繰り返す。

個人的には「MD = event-driven」と思っているが、運動方程式 $m(d\boldsymbol{U}/dt) = \boldsymbol{F}$ を時間に関する微分方程式と見て、時間を差分化して積分するスキームも一般に MD と呼ぶらしい。複雑な相互作用がある場合はしばしば衝突点を厳密に、あるいは解析的に決定できない。その場合にもこのスキームなら適用できる。(これは BEM と FEM の関係に似ている。)

2.5.2 Brownian dynamics

分子を扱う MD の精神で suspension を考えるのが Brownian dynamics である。suspension の分散媒質である水などの分子と着目している粒子のすべての運動を解くことは非効率的である。したがって媒質は連続体であるとする。粒子はその媒質から乱雑力と抵抗力を受ける。Langevin 方程式はこの粒子の運動方程式そのものである。

乱雑力は乱数で表せばよいとして、問題は抵抗力である。「そんなものは $6\pi\mu a\boldsymbol{U}$ とすれば十分」ではこの論文の意味が無くなってしまう。Ermak & McCammon (1978) [30] は流体の及ぼす乱雑ではない寄与である抵抗力を point force (Oseen テンソル) の重ね合わせで近似して Brownian dynamics を開発した。しかしこの手法は高い粒子濃度で数値的に不安定になるという問題を抱えていた。

2.6 Stokesian Dynamics: The Original Series

2.6.1 SDTOS の成立

1980 年代、高濃度 suspension の振舞を数値的に計算しようという機運が高まっていた。しかし Brownian dynamics は、その多体的な抵抗力が特に粒子濃度が高い場合に singular な振舞を引き起こしてしまうことが知られていた。この状況で Brady & Bossis (1984,1985) [14, 15] はどうすればこの粘性抵抗を 2 体相互作用の重ね合わせでうまく表現できるかを模索した。Stokes 問題の線形性から選択肢は必然的に mobility 形式、つまり速度を重ね合わせで表現するか、あるいは resistance 形式、つまり力を重ね合わせで表現するかのいずれかであった。経験的に、mobility 形式は希薄な極限でよい近似であり、resistance 形式は高濃度でよい結果を与えることは知られていた。こうした混乱した状況は Stokesian Dynamics 法 [16] の出現により解決された。Stokesian Dynamics 法ははじめ自由境界に対して Durlofsky & Brady (1987) [29] により定式化され、Brady *et al.* (1988) [18] で周期境界に拡張された。Stokesian Dynamics 法に関するレビュー [16] もすぐ書かれ、当時注目されたことが伺える。

Stokesian Dynamics 法は、本来多体問題である相互作用を巧妙に 2 体相互作用の重ね合わせで近似した。そこでは低次で打ち切った多重極展開 (つまり、力、トルク、stresslet だけで、高次の力モーメントは無視する) を用いて希薄な状況で正しい mobility 行列 $\mathcal{M}^{\infty}$ をまず構成する。(1.2.3 節

の (25) 式の行列は力で打ち切った mobility 行列である。) これは粒子濃度が上がると精度は悪くなる。この誤差を補正するために、既に分かっている 2 体問題の厳密解 [46] を使う。つまり高濃度で精度のよい resistance 形式の 2 体の厳密解 R_{2B} から、そこに含まれる mobility 行列 M^{∞}_{2B} の寄与を差し引いたものを lubrication correction $\mathsf{L}_{2B} := \mathsf{R}_{2B} - \left(\mathsf{M}^{\infty}_{2B}\right)^{-1}$ とする。この補正を多粒子に対して pair 毎に重ね合わせて全粒子に対する $\mathcal{L}$ を構成し、最終的な resistance 行列を以下のように近似する。

$$\mathcal{R} \approx (\mathcal{M}^{\infty})^{-1} + \mathcal{L} \tag{35}$$

これは先にみた mobility 形式と resistance 形式の良いとこ取りで、しかも 2 粒子の場合に厳密解を回復する自己無矛盾な形式となっている。この巧妙な lubrication correction の導入により、それまで全く不可能であった高濃度の系に対して高精度の数値計算が可能となった[*37]。

Stokesian Dynamics 法は、境界要素法と同じく境界積分方程式を基礎に持つ。つまり流体の速度場を直接扱わないで境界条件を扱う。粒子系は境界の形状が同じという特徴がある。この性質をうまく使うことが多粒子系の数値手法の善し悪しを左右する。Stokesian Dynamics 法は当時存在した他の積分方程式由来の方法に比べ、より粒子に最適化された数値手法と言える。それは逆に変形する物体に対する柔軟性を捨てた結果でもある。実際に同じ (経験的) 精度に対して、境界条件として課される条件数が boundary collocation 法や境界要素法などに比べて少ない。

このように Stokesian Dynamics 法は、Brownian dynamics の抱えた困難を克服し、またその結果は定量的にも信頼できるものであったと言う意味で、その分野の計算手法の中で当時最も進んだ方法であった。残念ながら、いわゆる素人が簡単に使える程の簡潔性が無かったためか、その普及は専門家、つまり suspension の研究者に限られていた。この手法は極めて直観的な、言い替えると厳密な証明がなされていない多くの本質的な物理を含んでいる。

2.6.2 SDTOS 三不思議

先に述べたように、結果として Stokesian Dynamics 法は定量的にも妥当な結果を与える計算手法であったが、理論的な証明抜きに構成された現象論であるとも言える。これは 2.1 節で述べた「数値計算の意義」に反する。ここでは私が勝手に「Stokesian Dynamics 三不思議」と名前を付けた謎を見ていく。それらは Stokesian Dynamics 法に直観的に、したがって証明抜きで用いられたアイデアであり、最近数年間私が行ってきた研究の目標でもある。それらは、1) 行列の反転と多体効果の等価性、2) FTS バージョンを越えるスキームはなぜ出来ないのか、3) lubrication correction は正しいか、の 3 つだ。本論文の目的の一つはこの「Stokesian Dynamics 三不思議」に答えていく事で Stokesian Dynamics 法を現象論からある種の厳密な手法に格上げする事にある。両者を区別するために、現象論としての Stokesian Dynamics 法を Stokesian Dynamics: The Original Series (SDTOS)、厳密な手法としての Stokesian Dynamics 法を Stokesian Dynamics: The Next Generation

[*37] ここで注意しておくが、この resistance 行列の近似、あるいは lubrication correction の定義は必然ではなく、一つの可能性に過ぎない。確かに無矛盾であるが、その正当性は明確に議論されてはいない。4.1.1 節で議論する。

(SDTNG) と呼ぶ。

■ 行列の反転と多体効果　Durlofsky & Brady (1987) [29] の付録 B に「mobility 行列の反転と反射された相互作用の和の等価性」と題した一節がある。そこでは 2 つの point force の中心間方向の運動に対して具体的に表題の等価性を示している。これは (35) 式が正しい結果を示す一つの理由として、「mobility 行列 $\mathcal{M}^{\infty}$ が反転されたために、そこに多体効果が入って来るからだ」という主張を正当化するためである。

私はこの特殊な状況の計算だけでこの statement が証明されたとは思わなかった。1.2.3 節で紹介した論文 [41] は、当初この付録 B の完全な証明を目的に行われたものだ。既に 1.2.3 節に示したように、実際にこの等価性は多体に対しても、一般的な運動に対しても、point force に限らず、証明された。

■ FTS を越えて　SDTOS の精度については lubrication correction という飛び道具はあるが、基礎となる粒子中心での多重極展開は不思議なことに 1 次の力モーメントで止まっていた。これには歴史的な状況と現実的な状況と、複雑性という困難があった為であろう。歴史的には、力のモーメントとして物理的に重要なものは、0 次の力そのもの、1 次の反対称成分のトルク、対称成分の stresslet に限られる。最後の stresslet は rheology の問題、つまり shear に対する解析ではじめて必要となるもので、本来剛体粒子の運動の自由度は力とトルクで尽きている。

私が John F. Brady 氏の研究室に滞在した時に聞くと「当然挑戦したがうまく収束する定式化は得られなかった」と言っていた。私はこの困難に何か必然があると思い、素朴に挑戦してその必然を特定しようと解析を試みた。結果は 3 節に示す通り「困難は存在しなかった」というオチであった。

■ lubrication correction の真偽　SDTOS のハイライトの一つは lubrication correction である。これにより SDTOS は最密充填の粒子濃度まで安定に計算できる堅牢なスキームとなっている。単に粒子中心での多重極展開で精度を上げる事は、特に粒子濃度の高い領域では困難である。SDTOS はその発端である「精度のよい 2 体の重ね合わせ法」の模索から、lubrication correction と呼ばれる一種の飛び道具的アプローチを粒子展開の枠組に導入した。その結果全粒子濃度で高精度の結果を出す事に成功した。

しかし先にも述べた通り lubrication correction の導入は確かに自己無矛盾であるが、そうでなければならないという必然性は示されていない。例えば、$\mathcal{M}^{\infty}$ として評価するべきモーメントの次数が 1 次 (つまり FTS バージョン) であるべきかどうか、については何も答えていない。この課題に関しては 3 節で定式化する多重極展開のアイデアを使った定式化と、その高精度スキームを使った数値的な検証を現在試みている [40]。

2.6.3 SDTOS の問題点

先に述べたように '80 年代後半、SDTOS は計算精度においても計算速度においても飛び抜けていた。SDTOS は発表と同時に既に完成していた。その後今日まで本質的な発展は無かったことがその完成度の高さを物語っている。しかし 10 年以上経過した今日、学問は進歩して定量的な知識は増え、技術も進歩して高性能な computer は溢れている。こうした時代性から、SDTOS は今日その長所もすでに長所ではなくなって来た。

現在ユーザーサイドに立つと SDTOS は大きく二つの問題点を持つ。一つは精度に対する不満、つまり三不思議のうちの一つで述べた $\mathcal{M}^{\infty}$ の展開が力、トルク、stresslet で止まっている点である。もう一点は高い計算負荷である。(35) 式に含まれる行列の反転や、実際の計算では連立線形方程式の形で与えられた境界値問題を解く必要がある。この線形方程式の解法、言い替えれば行列を反転させることがボトルネックとなり、SDTOS で計算できる粒子数は数 100 個であった。これではどんなに正確な計算が出来ても少なすぎる。次節では、この二つの問題を一挙に解決しようとする試みを紹介する。

3 Stokesian Dynamics: The Next Generation

"*Suspension*, the final frontier. These are the *researches by the Stokesian Dynamics*. It's continuing mission, to explore strange, new worlds, to seek out new *facts* and new *physics*, to boldly go where no one has gone before... "

この節は最近の私の論文 [39] の自分自身による翻訳である[*38]。

3.1 SDTNG のはじめに

suspension の微視的構造は、Stokes 近似での流体に浮ぶ粒子間の流体力学的相互作用によって決まる。Stokesian Dynamics 法 [16] は、この文脈で開発された。Stokes 近似での多体問題には、大きく分けて二つの状況がある。それは自由境界条件と周期境界条件である。この違いは粒子の振舞に定性的な変化をもたらす; 一定の力が働く場合、自由境界では粒子間隔が小さい程粒子は速く落下するが、周期境界では粒子濃度が高い程粒子はゆっくり落下する。これらの振舞は全体の境界条件を陽に考慮することで基本的に理解できる。相互作用の長距離性から、周期境界条件では Ewald 和と呼ばれる特別な方法が必要となる。したがって自由境界条件に比べ周期境界条件の問題の方がより複雑で、計算時間も多くかかる。どちらの問題でも支配方程式は同じであるため、適切な Green 関数を用いることでこれらの問題を同じ枠組で研究することが出来る。Stokesian Dynamics 法はこのような枠組の一つと言える; Durlofsky & Brady (1987) [29] は自由境界条件に対する、Brady

[*38] といっても、日本語で論文を書いてそれを英訳した訳ではなくて、英語で必死に書いた論文を文句を言いながら日本語に翻訳した。多分、より論理的に書けていると期待する。

et al. (1988) [18] は周期境界条件に対するものである。オリジナルの Stokesian Dynamics 法 (以下 SDTOS とする) は成功を収めた。しかし開発されて既に 10 年以上経過し、最近二つの大きな問題が認識されてきた; 一つはその近似が FTS バージョンと呼ばれる力とトルク、 stresslet しか考慮されず、高次の力モーメントが無視された近似に制限される点であり、もう一つは計算時間が非常に大きく実際に計算できる系の粒子数が数 100 に限られる点である。

ここでの目的は、人為的な仮定を導入することなく必要な精度で少い計算コストで問題を研究できる Stokes 流れに対する枠組として一般的な定式化を確立することである。このような数値スキームを可能な限り単純に定式化する; この単純さは、物理に対するよい見通しや多くの問題への簡単な応用を与える。単純さの別の長所として、手法の効率的な実装がある; 計算機は一般に調和関数や三角関数よりも代数演算の方を好むものだ。

ここでは最も単純な状況を考える。つまり自由境界条件の剛体球形粒子からなる系で、Brownian 運動と流体の慣性が無視できる (Peclet 数が無限大で、粒子 Reynolds 数が 0) とする。自由境界条件の問題は最近あまり研究されていない。しかしこれはこの問題が既に解決している事を意味しない; 実際、流体中の粒子集団の重力落下中の崩壊 [71] や shear flow による崩壊 [47] など興味ある現象は存在する。ここでの主な目的は定式化の確立と数値スキームの実装にあり、これらの興味ある現象への応用は議論しない。

lubrication correction は SDTOS の一つのハイライトであるが、ここでは詳細な議論はしない。しかし、もし lubrication correction を使いたければここでの定式化に組み込むことは可能である (詳しくは 3.3.1 節を参照)。

ここでの現実的なゴールは、Durlofsky & Brady (1987) [29] の手法の精度と計算スピードを改良することである。精度の改良は実空間での単純な多重極展開と適切な縮約によって行う; そこで、力モーメントと速度モーメントを結びつける一般化された mobility 問題を任意の次数に対して導出する。速度モーメントは速度の微係数を使って計算する; このことが定式化を単純にし、拡張を直接的にする。計算スピードの改良は疎な行列の問題で広く使われている逐次法を使うことで行う。高速多重極法 (FMM) [33] を用いる事で計算速度の更なる改良を行う。ここでの FMM の定式化はオリジナルの FMM とは異なり、精度の改良で用いた多重極展開の単純な拡張になっていることが分かるだろう。ここでは単純な逐次法と FMM の non-adaptive バージョンだけを使う; 逐次法に対する前処理や、FMM の adaptive スキームは議論しない。これはそれらの手法がここで行う定式化に使えないからではない。むしろそれらの技法をこの定式化に応用することで、ここで示した結果の更なる向上が期待される。

ここで示す定式化は一般的で単純であるため、拡張は直接的である。周期境界条件への拡張は Green 関数を Oseen テンソルから Ewald 和をとられたテンソル [11, 18] に置き換えることでできる。球形ではない物体に対して適切なモーメントの縮約を使うことで、非剛体的な物体に対しては二重層ポテンシャルを加えることで応用できる。ここでの定式化は流体力学の特別な性質は使っていないので、Laplace 問題や線形弾性論、重力多体系、渦ダイナミクスなどの問題に対する応用も直接的である。

最後に、ここでの定式化と他の研究との違いを見ておく。精度の拡張については、Mazur & van

Saarloos (1982) [67] が Fourier 空間での多重極展開を行った。その Fourier 積分を Fourier 級数に置き換えることで、Ladd (1988) [53] は周期境界条件での数値的な実装を行った。ここで示す定式化は彼らの実空間での表現であると理解することも出来るが、それだけではない; Mazur & van Saarloos (1982) [67] はモーメントの間の関係を形式的に書き下し、Ladd (1988) [53] はその定式化を実装している。つまり彼らはモーメントを直接扱っている。しかし我々は、速度モーメントを速度の微係数を用いて計算している。その結果、式の上に調和関数や三角関数は表れない。

計算スピードの改良については、Sangani & Mo (1996) [86] が周期境界条件での Stokes 流れの彼らの定式化 [69] を元にして FMM を初めて応用した。彼らの定式化は調和関数展開に基づいていて、Laplace 問題に対するオリジナルの FMM を Stokes 問題に応用するのに適していた。ここで示す FMM の定式化は調和関数によるものではなく、むしろ精度の向上で用いる多重極展開の単純な拡張であり、同様に調和関数や三角関数はは表れない。球の対称性をもつ系に対しては球調和関数は有効であるが、逆にそのような対称性を持たない系に対しては制限になる。ここでの定式化は単純 (で、ある意味冗長) であるが、より柔軟である; これはここで示す定式化の持つ長所である。

3.2 多重極展開再考

まず Stokes flow の中の剛体球粒子の流体力学的相互作用に対する多重極展開を再定式化し、一般化された mobility 問題を導出する。それは SDTOS の grand mobility 問題の素直な拡張になっている。

3.2.1 速度場の展開

剛体粒子による速度の乱れ $\boldsymbol{v}(\boldsymbol{x})$ は、一重層ポテンシャルによって次のように書ける [60] 。

$$v_i(\boldsymbol{x}) = u_i(\boldsymbol{x}) - u_i^{\infty}(\boldsymbol{x}) = -\frac{1}{8\pi\mu}\sum_{\alpha=1}^{N}\int_{S_\alpha} dS(\boldsymbol{y})\, J_{ij}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})\, f_j(\boldsymbol{y}) \tag{36}$$

ここで $\boldsymbol{u}$ は流体の速度、$\boldsymbol{u}^{\infty}$ は粒子がない時の流体速度、μ は流体の粘性率、N は粒子数、S_α は粒子 α の表面、$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{y})$ は粒子表面 $\boldsymbol{y}$ での力密度、$\mathsf{J}(\boldsymbol{r})$ は Oseen テンソル (6)、つまり Stokes 方程式 (5) の Green 関数である。繰り返された指数に対しては Einstein の規約を適用する。(36) 式は厳密である。この右辺を粒子中心 $\boldsymbol{x}^{\alpha}$ で展開すると、Oseen テンソルの微分係数 $\mathcal{J}$ と力モーメント $\mathscr{F}$ を用いて次のように書ける。

$$v_i(\boldsymbol{x}) = \sum_{\alpha=1}^{N}\sum_{m=0}^{p'} \mathcal{J}^{(m)}_{ij,k\ldots}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^{\alpha})\, \mathscr{F}^{(m)}_{j,k\ldots}(\alpha) \tag{37}$$

ここで仮の打ち切り次数 p' を導入する (詳しくは 3.2.4 節で定義する)。Oseen テンソルの微分係数 $\mathcal{J}$ と力モーメント $\mathscr{F}$ はそれぞれ次のように定義する。

$$\mathcal{J}^{(m)}_{ij,k\ldots}(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{8\pi\mu}\frac{1}{m!}\left[(-\nabla)^m_{k\ldots}\, J_{ij}\right](\boldsymbol{r}) \tag{38}$$

$$\mathscr{F}^{(m)}_{j,k\cdots}(\alpha) = -\int_{S_\alpha} dS(\boldsymbol{y})\ (\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x}^\alpha)^m_{k\cdots} f_j(\boldsymbol{y}) \tag{39}$$

省略された指数 $k\cdots$ は高次のテンソルに関してその次数 m を陽に書く場合に用いた。当然これらにも Einstein の規約を適用する。この力モーメントと習慣的に用いられる物理量 (力 $\boldsymbol{F}$, トルク $\boldsymbol{T}$, stresslet S) の陽な関係は次のようになる。

$$F^\alpha_i = \mathscr{F}^{(0)}_i(\alpha), \qquad T^\alpha_i = \epsilon_{ijk}\mathscr{F}^{(1)}_{k,j}(\alpha), \qquad S^{\ \alpha}_{ij} = \frac{1}{2}\left\{\mathscr{F}^{(1)}_{i,j}(\alpha) + \mathscr{F}^{(1)}_{j,i}(\alpha) - \frac{2}{3}\delta_{ij}\mathscr{F}^{(1)}_{k,k}(\alpha)\right\} \tag{40}$$

$$\mathscr{F}^{(0)}_i(\alpha) = F^\alpha_i, \qquad \mathscr{F}^{(1)}_{i,j}(\alpha) - \frac{1}{3}\delta_{ij}\mathscr{F}^{(1)}_{k,k}(\alpha) = \frac{1}{2}\epsilon_{jik}T^\alpha_k + S^{\ \alpha}_{ij} \tag{41}$$

ここで ϵ_{ijk} は

$$\epsilon_{xyz} = \epsilon_{yzx} = \epsilon_{zxy} = +1, \qquad \epsilon_{zyx} = \epsilon_{yxz} = \epsilon_{xzy} = -1 \tag{42}$$

で、それ以外はゼロである。

3.2.2 境界条件

(37) 式は粒子表面での速度という境界条件を満たすための変数を、連続量 $\boldsymbol{f}$ から扱いやすい離散量 $\mathscr{F}$ に変換したと言える。この $\mathscr{F}$ を決定するためには、$\mathscr{F}$ の要素の数だけ条件式が必要となる。速度場の境界条件を適用する方法には、少くとも以下の 3 つが考えられる: boundary collocation 法と、速度の微係数を使う方法、速度モーメントを使う方法。

boundary collocation 法 [32] では境界条件は collocation point と呼ばれる境界上の有限の点で直接課せられる。したがって (37) 式で定式化は完了する。このアプローチは単純であるが、動的な問題では困難が生じる。これはこの手法が collocation point の選択に依存し、そのためある状況では破綻する (解が求まらない) からである。別の方法として粒子中心での速度の微分係数

$$\mathscr{V}^{(n)}_{i,l\cdots}(\boldsymbol{x}^\alpha) = \frac{1}{n!}\left[\nabla^n_{l\cdots} v_i\right](\boldsymbol{x}^\alpha) \tag{43}$$

を使うものがある。このアプローチもまた単純であるが、二つの問題がある; 一つは $\mathscr{V}$ の対称性が力モーメント $\mathscr{F}$ と異なること、もう一つは (37) 式の展開では速度の微分係数の自己部分が特異となることである。前者は未知数と条件式の数のずれを生じ、その場合問題が不定になり得る。後者は自己相互作用はこの方法では考慮できないことを意味する。

もう一つの方法として速度モーメント

$$\mathscr{U}^{(n)}_{i,l\cdots}(\alpha) = \frac{1}{4\pi a^2}\int_{S_\alpha} dS(\boldsymbol{y})\ (\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x}^\alpha)^n_{l\cdots}\, v_i(\boldsymbol{y}) \tag{44}$$

を用いるものがある。ここで a は粒子半径である。速度モーメントは速度の微分係数よりも複雑であるが、先の二つの問題はない。粒子表面での速度は、与えられる流れ $\boldsymbol{u}^\infty$ に対する粒子 α の並進速度 $\boldsymbol{U}^\alpha$ と回転速度 $\boldsymbol{\Omega}^\alpha$、$\mathsf{E}^\alpha$ 変形テンソルによって $\boldsymbol{v}(\boldsymbol{y}) = \boldsymbol{U}^\alpha + \boldsymbol{\Omega}^\alpha \times (\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x}^\alpha) + \mathsf{E}^\alpha \cdot (\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x}^\alpha)$ と与えられる。したがって 0 次と 1 次の速度モーメントは次のように書ける。

$$\mathscr{U}^{(0)}_i(\alpha) = U^\alpha_i, \qquad \mathscr{U}^{(1)}_{i,j}(\alpha) = \frac{1}{3}\left(\epsilon_{ikj}\Omega^\alpha_k + E^\alpha_{ij}\right) \tag{45}$$

$$\Omega_i^\alpha = \frac{3}{2}\epsilon_{ijk}\mathscr{U}^{(1)}_{k,j}(\alpha), \qquad E^\alpha_{ij} = \frac{3}{2}\left\{\mathscr{U}^{(1)}_{i,j}(\alpha) + \mathscr{U}^{(1)}_{j,i}(\alpha)\right\} \tag{46}$$

速度モーメントと力モーメントを関係付ける線形方程式は、(44) 式の表面積分を (37) 式に行うことで得られる。

$$\mathscr{U}^{(n)}_{i,l\cdots}(\alpha) = \sum_{\beta=1}^{N}\sum_{m=0}^{p'} \mathcal{M}^{(n,m)}_{i,l\cdots;j,k\cdots}(\alpha,\beta)\ \mathscr{F}^{(m)}_{j,k\cdots}(\beta) \tag{47}$$

ここで $\mathcal{M}$ は次のように定義する。

$$\mathcal{M}^{(n,m)}_{i,l\cdots;j,k\cdots}(\alpha,\beta) = \frac{1}{4\pi a^2}\int_{S_\alpha} dS(\boldsymbol{y})\ (\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x}^\alpha)^n_{l\cdots}\mathcal{J}^{(m)}_{ij,k\cdots}(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x}^\beta) \tag{48}$$

この (47) 式、あるいは略記した表式

$$\mathscr{U} = \mathcal{M}\cdot\mathscr{F} \tag{49}$$

を一般化された mobility 問題、行列 $\mathcal{M}$ を一般化された mobility 行列と呼ぶ。以下では煩雑さを避けるためこのような略記を用いることがある。

実際に (49) 式を計算する時は、簡単のためまず速度モーメト $\mathscr{U}$ を自己部分 $\mathscr{U}^s$ と非自己部分 $\mathscr{U}'$ に分離する。

$$\mathscr{U} = \mathscr{U}^s + \mathscr{U}' \tag{50}$$

これは $\mathcal{J}$ を計算する方が $\mathcal{M}$ を計算するよりも簡単、つまり微分を計算する方が積分を計算するよりも簡単であるからだ。自己部分 $\mathscr{U}^s$ は次のように書ける。

$$\mathscr{U}^s = \mathcal{M}^s\cdot\mathscr{F} \tag{51}$$

ここで mobility 行列の自己部分 $\mathcal{M}^s$ は次のように与えられる。

$$\mathcal{M}^{s(n,m)}_{i,l\cdots;j,k\cdots} = \mathcal{M}^{(n,m)}_{i,l\cdots;j,k\cdots}(\alpha,\alpha) = \frac{1}{4\pi a^2}\int_{|\boldsymbol{r}|=a} dS(\boldsymbol{r})\ r^n_{l\cdots}\mathcal{J}^{(m)}_{ij,k\cdots}(\boldsymbol{r}) \tag{52}$$

この表面積分は Kronecker の delta の一般化とみなせる。行列 $\mathcal{M}^{s(n,m)}$ は次のような性質を持つ[*39]:

i. $\mathcal{M}^{s(n,m)}$ は n と m が両方とも偶数であるか、両方とも奇数である場合のみゼロではない。
ii. $\mathcal{M}^{s(n,m)}$ は $m \geq n+2$ ではゼロである。

0 次と 1 次の具体的な形は次のようになる。

$$\mathcal{M}^{s(0,0)}_{i;j} = \frac{\delta_{ij}}{6\pi\mu a} \tag{53}$$

$$\mathcal{M}^{s(1,1)}_{i,l;j,k} = \frac{1}{60\pi\mu a}\left[4\delta_{ij}\delta_{kl} - \delta_{ik}\delta_{jl} - \delta_{il}\delta_{jk}\right] \tag{54}$$

高次の場合も煩雑だが単純な計算で構成できる。それらを用いて自己部分は求めることができる。

[*39] この論文が教科書ならこれは演習になるだろう。ちなみに答えは論文 [39] の付録にある。

一方非自己部分の計算は、先に触れたように速度の微分係数 $\mathscr{V}'$ を計算し、それを速度モーメント $\mathscr{U}'$ に変換することにする。ここでダッシュは非自己部分を陽に表すために用いる。この変換を求めよう。定義から $\mathscr{V}'$ は次のように与えられる。

$$\mathscr{V}'^{(m)}_{i,k\cdots}(\alpha) = \frac{1}{m!}\left[\nabla^m_{k\cdots} v'^{\alpha}_i\right](\boldsymbol{x}^\alpha) \tag{55}$$

非自己粒子 $\beta \neq \alpha$ の作る速度の乱れは次のように書ける。

$$v'^{\alpha}_i(\boldsymbol{x}) = \sum_{\beta\neq\alpha}\sum_{m=0}^{p'} \mathscr{T}^{(m)}_{ij,k\cdots}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^\beta)\,\mathscr{F}^{(m)}_{j,k\cdots}(\beta) \tag{56}$$

ここで $\boldsymbol{v}'^{\alpha}$ を中心 $\boldsymbol{x}^\alpha$ で展開する。

$$v'^{\alpha}_i(\boldsymbol{y}) = \sum_{m=0} \mathscr{V}'^{(m)}_{i,k\cdots}(\alpha)\;(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x}^\alpha)^m_{k\cdots} \tag{57}$$

粒子 α に対する表面積分を行う事で、速度モーメントと速度の微分係数の関係が得られる。

$$\mathscr{U}'^{(n)}_{i,l\cdots}(\alpha) = \sum_{m=0}^{n+2} \mathscr{V}'^{(m)}_{i,k\cdots}(\alpha)\,\frac{1}{4\pi a^2}\int_{S_\alpha} dS(\boldsymbol{y})\;(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x}^\alpha)^{n+m}_{l\cdots k\cdots} \tag{58}$$

2 次までの具体的な形は次のように与えられる。

$$\mathscr{U}'^{(0)}_{i} = \mathscr{V}'^{(0)}_{i} + \frac{a^2}{3}\mathscr{V}'^{(2)}_{i,jj} \tag{59}$$

$$\mathscr{U}'^{(1)}_{i,k} = \frac{a^2}{3}\mathscr{V}'^{(1)}_{i,k} + \frac{a^4}{5}\mathscr{V}'^{(3)}_{i,kjj} \tag{60}$$

$$\mathscr{U}'^{(2)}_{i,kl} = \frac{a^2}{3}\delta_{kl}\mathscr{V}'^{(0)}_{i} + \frac{a^4}{15}\left(\delta_{kl}\mathscr{V}'^{(2)}_{i,jj} + 2\mathscr{V}'^{(2)}_{i,kl}\right) + \frac{4a^6}{35}\mathscr{V}'^{(4)}_{i,kljj} \tag{61}$$

(58) 式について 3 つの註がある。一つは、n と m の偶奇が一致すること。これは右辺の積分が Kronecker の delta の線形結合であることによる。二つ目は、m に関する和の上限についてである。これは速度場 $\boldsymbol{v}$ の重調和性

$$\nabla^2\nabla^2\boldsymbol{v} = \boldsymbol{0} \tag{62}$$

から来ている。したがって (58) 式には展開による打ち切り誤差はなく、$\mathscr{V}'$ から $\mathscr{U}'$ への変換は厳密である。(58) 式で m に関する和の上限が n ではなく $n+2$ であることは、$\mathscr{U}'^{(m)}$ には有限サイズ効果が $\mathscr{V}'^{(m+2)}$ のトレースとして入っていることを意味する。三つ目は非圧縮性

$$\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{v} = 0 \tag{63}$$

に関してである。このため速度の微分係数は $n \geq 1$ に対して $\mathscr{V}'^{(n)}_{i,ij\cdots} = 0$ となる。しかし速度モーメントに対しては同様の関係は 1 次にしか成立しない。つまり

$$\mathscr{U}'^{(1)}_{i,i} = 0 \tag{64}$$

であるが、$n \geq 2$ に対しては一般に $\mathscr{U}'^{(n)}_{i,ij\cdots} \neq 0$ である。これは $n \geq 2$ では $\mathscr{U}'^{n}_{i,ij\cdots}$ に $\mathscr{V}'^{(n)}_{j,iik\cdots} \neq 0$ というゼロではない項が必ず含まれるからである。

次数 m	完全形	対称形	縮約形
0	$\mathscr{U}_x^{(0)}, \mathscr{U}_y^{(0)}, \mathscr{U}_z^{(0)}$	$\mathscr{U}_x^{(0)}, \mathscr{U}_y^{(0)}, \mathscr{U}_z^{(0)}$	$\hat{\mathscr{U}}_x^{(0)}, \hat{\mathscr{U}}_y^{(0)}, \hat{\mathscr{U}}_z^{(0)}$
1	$\mathscr{U}_{x,x}^{(1)}, \mathscr{U}_{x,y}^{(1)}, \mathscr{U}_{x,z}^{(1)}$	$\mathscr{U}_{x,x}^{(1)}, \mathscr{U}_{x,y}^{(1)}, \mathscr{U}_{x,z}^{(1)}$	$-^a, \hat{\mathscr{U}}_{x,y}^{(1)}, \hat{\mathscr{U}}_{x,z}^{(1)}$
	$\mathscr{U}_{y,x}^{(1)}, \mathscr{U}_{y,y}^{(1)}, \mathscr{U}_{y,z}^{(1)}$	$\mathscr{U}_{y,x}^{(1)}, \mathscr{U}_{y,y}^{(1)}, \mathscr{U}_{y,z}^{(1)}$	$\hat{\mathscr{U}}_{y,x}^{(1)}, \hat{\mathscr{U}}_{y,y}^{(1)}, \hat{\mathscr{U}}_{y,z}^{(1)}$
	$\mathscr{U}_{z,x}^{(1)}, \mathscr{U}_{z,y}^{(1)}, \mathscr{U}_{z,z}^{(1)}$	$\mathscr{U}_{z,x}^{(1)}, \mathscr{U}_{z,y}^{(1)}, \mathscr{U}_{z,z}^{(1)}$	$\hat{\mathscr{U}}_{z,x}^{(1)}, \hat{\mathscr{U}}_{z,y}^{(1)}, \hat{\mathscr{U}}_{z,z}^{(1)}$
2	$\mathscr{U}_{\cdot,xx}^{(2)}, \mathscr{U}_{\cdot,xy}^{(2)}, \mathscr{U}_{\cdot,xz}^{(2)}$	$\mathscr{U}_{\cdot,xx}^{(2)}, \mathscr{U}_{\cdot,xy}^{(2)}, \mathscr{U}_{\cdot,xz}^{(2)}$	$-^b, \hat{\mathscr{U}}_{\cdot,xy}^{(2)}, \hat{\mathscr{U}}_{\cdot,xz}^{(2)}$
	$\mathscr{U}_{\cdot,yx}^{(2)}, \mathscr{U}_{\cdot,yy}^{(2)}, \mathscr{U}_{\cdot,yz}^{(2)}$	$-^c, \mathscr{U}_{\cdot,yy}^{(2)}, \mathscr{U}_{\cdot,yz}^{(2)}$	$-^c, \hat{\mathscr{U}}_{\cdot,yy}^{(2)}, \hat{\mathscr{U}}_{\cdot,yz}^{(2)}$
	$\mathscr{U}_{\cdot,zx}^{(2)}, \mathscr{U}_{\cdot,zy}^{(2)}, \mathscr{U}_{\cdot,zz}^{(2)}$	$-^c, -^c, \mathscr{U}_{\cdot,zz}^{(2)}$	$-^c, -^c, \hat{\mathscr{U}}_{\cdot,zz}^{(2)}$
3	$\mathscr{U}_{\cdot,xxx}^{(3)}, \mathscr{U}_{\cdot,xxy}^{(3)}, \mathscr{U}_{\cdot,xxz}^{(3)}$	$\mathscr{U}_{\cdot,xxx}^{(3)}, \mathscr{U}_{\cdot,xxy}^{(3)}, \mathscr{U}_{\cdot,xxz}^{(3)}$	$-^b, -^b, -^b$
	$\mathscr{U}_{\cdot,xyx}^{(3)}, \mathscr{U}_{\cdot,xyy}^{(3)}, \mathscr{U}_{\cdot,xyz}^{(3)}$	$-^c, \mathscr{U}_{\cdot,xyy}^{(3)}, \mathscr{U}_{\cdot,xyz}^{(3)}$	$-^c, \hat{\mathscr{U}}_{\cdot,xyy}^{(2)}, \hat{\mathscr{U}}_{\cdot,xyz}^{(2)}$
	$\mathscr{U}_{\cdot,xzx}^{(3)}, \mathscr{U}_{\cdot,xzy}^{(3)}, \mathscr{U}_{\cdot,xzz}^{(3)}$	$-^c, -^c, \mathscr{U}_{\cdot,xzz}^{(3)}$	$-^c, -^c, \hat{\mathscr{U}}_{\cdot,xzz}^{(2)}$
	$\mathscr{U}_{\cdot,yxx}^{(3)}, \mathscr{U}_{\cdot,yxy}^{(3)}, \mathscr{U}_{\cdot,yxz}^{(3)}$	$-^c, -^c, -^c$	$-^c, -^c, -^c$
	$\mathscr{U}_{\cdot,yyx}^{(3)}, \mathscr{U}_{\cdot,yyy}^{(3)}, \mathscr{U}_{\cdot,yyz}^{(3)}$	$-^c, \mathscr{U}_{\cdot,yyy}^{(3)}, \mathscr{U}_{\cdot,yyz}^{(3)}$	$-^c, \hat{\mathscr{U}}_{\cdot,yyy}^{(2)}, \hat{\mathscr{U}}_{\cdot,yyz}^{(2)}$
	$\mathscr{U}_{\cdot,yzx}^{(3)}, \mathscr{U}_{\cdot,yzy}^{(3)}, \mathscr{U}_{\cdot,yzz}^{(3)}$	$-^c, -^c, \mathscr{U}_{\cdot,yzz}^{(3)}$	$-^c, -^c, \hat{\mathscr{U}}_{\cdot,yzz}^{(2)}$
	$\mathscr{U}_{\cdot,zxx}^{(3)}, \mathscr{U}_{\cdot,zxy}^{(3)}, \mathscr{U}_{\cdot,zxz}^{(3)}$	$-^c, -^c, -^c$	$-^c, -^c, -^c$
	$\mathscr{U}_{\cdot,zyx}^{(3)}, \mathscr{U}_{\cdot,zyy}^{(3)}, \mathscr{U}_{\cdot,zyz}^{(3)}$	$-^c, -^c, -^c$	$-^c, -^c, -^c$
	$\mathscr{U}_{\cdot,zzx}^{(3)}, \mathscr{U}_{\cdot,zzy}^{(3)}, \mathscr{U}_{\cdot,zzz}^{(3)}$	$-^c, -^c, \mathscr{U}_{\cdot,zzz}^{(3)}$	$-^c, -^c, \hat{\mathscr{U}}_{\cdot,zzz}^{(2)}$

表 1:「完全形」と「対称形」、「縮約形」の要素。$-^a$ とある縮約は非圧縮性 $\mathscr{U}_{i,i} = 0$ による。$-^b$ と $-^c$ とある縮約はそれぞれ irreducible テンソルによるものと、$\mathscr{U}_{i,k\cdots}$ の添字 $k\cdots$ の対称性によるものである。$m \geq 2$ での添字 i は変化がないので省略した。

3.2.3 モーメントの縮約

例えば resistance 問題の場合、粒子にかかる力を粒子の速度から求めるために、一般 mobility 問題 (49) を速度モーメント $\mathscr{U}$ から力モーメント $\mathscr{F}$ に関して解く。例えば (64) 式で見たように、これらのモーメントに含まれる要素はそれぞれ独立ではない。このため線形方程式 (49) は不定となる。この状況は resistance 問題だけでなく mobility 問題でも起こる。そこでは力モーメントの高次の要素が未知数で、速度モーメントの高次の要素が剛体性から既知である。(詳しくは 3.2.5 節を見よ。) 正しい解を得るには、全て独立な要素から成る irreducible モーメントを関係付ける方程式に縮約する必要がある。速度場の性質による縮約、つまり非圧縮性と重調和性は既に 3.2.2 節で議論した。モーメントの要素の間には別の、粒子形が球であることによる依存性がある。ここでは速度モーメント $\mathscr{U}$ を使って議論するが、力モーメントに関しても全く同様である。

m 次の速度モーメント $\mathscr{U}_{i,k\cdots}^{(m)}$ について考える。まず添字 $k\cdots$ に明らかな対称性がある。この対称性を考えると m 次モーメントの独立な要素の数は各添字 i について 3^m から $(m+1)(m+2)/2$ となる。この段階の縮約形を「対称形」と呼ぶ (表 1 を見よ)。

モーメントの定義から、高次のモーメントは低次のモーメントと次のような関係を持つ。

$$\mathscr{U}^{(n+2)}_{j,ssk\cdots} = a^2 \mathscr{U}^{(n)}_{j,k\cdots} \tag{65}$$

この依存性を除くには、対称で traceless な irreducible テンソル [27] を使うとよい。p 次のテンソル $\mathscr{A}^p_{i\cdots}$ の縮約は次にように与えられる。

$$\hat{\mathscr{A}}^p_{i\cdots} = \sum_{k=0}^{[p/2]} a^p_k \delta_{(i_1 i_2}\delta_{i_3 i_4}\cdots\delta_{i_{2k-1}i_{2k}}\mathscr{A}^p_{i_{2k+1}\cdots i_p)s_1 s_1\cdots s_k s_k} \tag{66}$$

ここで a^p_k は次のように定義される。

$$a^p_k = (-1)^k \frac{p!}{(p-2k)!}\frac{(2p-2k-1)!!}{(2p-1)!!(2k)!!} \tag{67}$$

例えば 2 次と 3 次に関しては次のようになる。

$$\hat{\mathscr{A}}^2_{ij} = \mathscr{A}^2_{(ij)} - \frac{1}{3}\delta_{ij}\mathscr{A}^2_{ss} \tag{68}$$

$$\hat{\mathscr{A}}^3_{ijk} = \mathscr{A}^3_{(ijk)} - \frac{1}{5}\left(\delta_{ij}\mathscr{A}^3_{(kss)} + \delta_{jk}\mathscr{A}^3_{(iss)} + \delta_{ki}\mathscr{A}^3_{(jss)}\right) \tag{69}$$

添字を囲む括弧はそれらの添字に対する対称化を意味する。今の場合はモーメントの定義から添字に対して対称なので、この対称化は気にしなくてよい。この縮約によって m 次の独立な要素の数は $2m+1$ となる。縮約された要素は表 1 にまとめてある。

この縮約を表す演算子を $\mathcal{P}$、逆演算子 (つまり復元演算子) を Q とする。陽な形は (気合いで) 既知である。これらの演算子を使って irreducible モーメント $\hat{\mathscr{U}}$ と $\hat{\mathscr{F}}$ は次のように関係する。

$$\hat{\mathscr{U}} = \mathcal{P}\cdot\mathcal{M}\cdot\mathcal{Q}\cdot\hat{\mathscr{F}} \tag{70}$$

これを縮約された一般化 mobility 問題と呼ぶ。この式の具体的な計算手順は 3.2.4 節で、境界条件の適用は 3.2.5 節で示す。

3.2.4 打ち切りと計算手順

(37) 式で曖昧に導入した打ち切りは、独立な要素が陽に示されている縮約形の (70) 式においてなされるべきである。正式な打ち切り次数 p を、(70) 式のモーメント $\hat{\mathscr{U}}$ と $\hat{\mathscr{F}}$ の最高次と定義する。

実際の計算手順を、打ち切り p を陽に書きながら見ていく。(70) 式は次の 6 ステップからなる手順で計算する:

(i). 縮約された力モーメント $\hat{\mathscr{F}}$ から力モーメント $\mathscr{F}$ を力復元する。

$$\begin{bmatrix} \mathscr{F}^{(0)} \\ \vdots \\ \mathscr{F}^{(p)} \\ \mathscr{F}^{(p+1)} \\ \mathscr{F}^{(p+2)} \end{bmatrix}(\alpha) = \begin{bmatrix} \mathcal{Q}^{(0,0)} & \cdots & \mathcal{Q}^{(0,p)} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathcal{Q}^{(p,0)} & \cdots & \mathcal{Q}^{(p,p)} \\ \mathcal{Q}^{(p+1,0)} & \cdots & \mathcal{Q}^{(p+1,p)} \\ \mathcal{Q}^{(p+2,0)} & \cdots & \mathcal{Q}^{(p+2,p)} \end{bmatrix}\cdot\begin{bmatrix} \hat{\mathscr{F}}^{(0)} \\ \vdots \\ \hat{\mathscr{F}}^{(p)} \end{bmatrix}(\alpha) \tag{71}$$

(ii). 力モーメント $\mathscr{F}$ を使って速度の微係数の非自己部分 $\mathscr{V}'$ を計算する。

$$\begin{bmatrix} \mathscr{V}'^{(0)} \\ \vdots \\ \mathscr{V}'^{(p+2)} \end{bmatrix}(\alpha) = \sum_{\beta\neq\alpha} \begin{bmatrix} \mathcal{K}^{(0,0)} & \cdots & \mathcal{K}^{(0,p+2)} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathcal{K}^{(p+2,0)} & \cdots & \mathcal{K}^{(p+2,p+2)} \end{bmatrix} (\boldsymbol{x}^{\alpha} - \boldsymbol{y}^{\beta}) \cdot \begin{bmatrix} \mathscr{F}^{(0)} \\ \vdots \\ \mathscr{F}^{(p+2)} \end{bmatrix}(\beta) \tag{72}$$

ここで $\mathcal{K}$ は次のように定義される。

$$\mathcal{K}^{(n,m)}_{i,l\cdots;j,k\cdots}(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{n!}\left[\nabla^n_{l\cdots}\mathcal{J}^{(m)}_{ij,k\cdots}\right](\boldsymbol{r}) = \frac{1}{8\pi\mu}\frac{1}{n!}\frac{1}{m!}\left[\nabla^n_{l\cdots}(-\nabla)^m_{k\cdots}J_{ij}\right](\boldsymbol{r}) \tag{73}$$

(iii). $\mathscr{V}'$ を (58) 式を使って速度モーメント $\mathscr{U}'$ に変換する。

$$\begin{bmatrix} \mathscr{U}'^{(0)} \\ \vdots \\ \mathscr{U}'^{(p)} \end{bmatrix}(\alpha) = \begin{bmatrix} \mathcal{D}^{(0,0)} & \cdots & \mathcal{D}^{(0,p)} & \mathcal{D}^{(0,p+1)} & \mathcal{D}^{(0,p+2)} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \mathcal{D}^{(p,0)} & \cdots & \mathcal{D}^{(p,p+2)} & \mathcal{D}^{(p,p+1)} & \mathcal{D}^{(p,p+2)} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \mathscr{V}'^{(0)} \\ \vdots \\ \mathscr{V}'^{(p)} \\ \mathscr{V}'^{(p+1)} \\ \mathscr{V}'^{(p+2)} \end{bmatrix}(\alpha) \tag{74}$$

ここで $\mathcal{D}$ は次のように定義される。

$$\mathcal{D}^{(n,m)} = \frac{a^{n+m}}{4\pi}\int_{|\hat{\boldsymbol{r}}|=1} dS(\hat{\boldsymbol{r}})\,\hat{\boldsymbol{r}}^{n+m} \tag{75}$$

(iv). 速度モーメントの自己部分 $\mathscr{U}^s$ を計算する。

$$\begin{bmatrix} \mathscr{U}^{s(0)} \\ \vdots \\ \mathscr{U}^{s(p)} \end{bmatrix}(\alpha) = \begin{bmatrix} \mathcal{M}^{s(0,0)} & \cdots & \mathcal{M}^{s(0,p)} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathcal{M}^{s(p,0)} & \cdots & \mathcal{M}^{s(p,p)} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \mathscr{F}^{(0)} \\ \vdots \\ \mathscr{F}^{(p)} \end{bmatrix}(\alpha) \tag{76}$$

ここで $\mathcal{M}^s$ は (52) 式で与えられる。

(v). 自己部分と非自己部分を合わせて速度モーメント $\mathscr{U}$ を計算する。

$$\begin{bmatrix} \mathscr{U}^{(0)} \\ \vdots \\ \mathscr{U}^{(p)} \end{bmatrix}(\alpha) = \begin{bmatrix} \mathscr{U}^{s(0)} \\ \vdots \\ \mathscr{U}^{s(p)} \end{bmatrix}(\alpha) + \begin{bmatrix} \mathscr{U}'^{(0)} \\ \vdots \\ \mathscr{U}'^{(p)} \end{bmatrix}(\alpha) \tag{77}$$

(vi). $\mathscr{U}$ を $\hat{\mathscr{U}}$ に縮約する。

$$\begin{bmatrix} \hat{\mathscr{U}}^{(0)} \\ \vdots \\ \hat{\mathscr{U}}^{(p)} \end{bmatrix}(\alpha) = \begin{bmatrix} \mathcal{P}^{(0,0)} & \cdots & \mathcal{P}^{(0,p)} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathcal{P}^{(p,0)} & \cdots & \mathcal{P}^{(p,p)} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \mathscr{U}^{(0)} \\ \vdots \\ \mathscr{U}^{(p)} \end{bmatrix}(\alpha) \tag{78}$$

この 6 ステップからなる手順は (70) 式を表す一つのサブルーチンとみなせる。それは引数に縮約された力モーメント $\hat{\mathscr{F}}$ をとり、結果として縮約された速度モーメント $\hat{\mathscr{U}}$ を返す。

SDTOS では 3 つの打ち切り、つまり F と FT、FTS バージョンが示された。F バージョンは打ち切り $p = 0$ に対応し、一般化された mobility 行列は力 $\boldsymbol{F}$ を並進速度 $\boldsymbol{U}$ に結びつける。FT バー

ジョンでは、力モーメントの 1 次の反対称成分であるトルク $\boldsymbol{T}$ が考慮され、対応する角速度 $\boldsymbol{\Omega}$ があらわれる。FTS バージョンでは、力モーメントの 1 次の対称成分である stresslet S と、対応する rate-of-strain E が考慮される。これは打ち切り $p = 1$ に対応する。この定式化は FTS バージョンまで SDTOS [29] に完全に一致する。

打ち切りに関して注意しておく。(70) 式で縮約されたモーメントは p 次で打ち切られるが、力モーメントは $p + 2$ 次まで復元し、速度の微係数も $p + 2$ 次まで計算し、その結果を p 次まで速度モーメントに変換する必要がある。こうしないと有限サイズ効果が正しく取り込めない。実際 $p = 0$ でさえ有限サイズ効果はグリーン関数の 2 次微分のトレースとして考慮され、一般化された mobility 行列として (25) 式の $\mathcal{M}^{\infty}$ を得る。この意味で (37) や (47)、(56) 式で曖昧に導入された打ち切り次数 p' は、$p + 2$ と言える。ただし復元されたモーメントの $\mathscr{F}^{(p+1)}$ と $\mathscr{F}^{(p+2)}$ は、縮約されたモーメントの $\hat{\mathscr{F}}^{(p+1)}$ や $\hat{\mathscr{F}}^{(p+2)}$ の寄与を持っている訳ではない。

3.2.5 剛体粒子の高次バージョン

粒子表面の剛体性から、剛体粒子の持つ運動の自由度は $6N$ である; 独立な変数は力 $\boldsymbol{F}$ とトルク $\boldsymbol{T}$、それに対応した並進速度 $\boldsymbol{U}$ と回転速度 $\boldsymbol{\Omega}$ であり、縮約された速度モーメントの高次の部分は消える。これは mobility 問題であろうが resistance 問題であろうが高次の速度モーメントは常に既知であり、対応する高次の力モーメントは未知であることを意味する。有効な自由度だけで表現された問題を「contracted」と呼ぶことにする。剛体粒子の独立な変数を結びつける、したがって $6N \times 6N$ 次元をもつ contracted mobility 行列や resistance 行列は打ち切り次数 p に依存し、$p \to \infty$ の極限で厳密解に収束する。rate-of-strain が与えられるような線形流の問題では、自由度は FTS バージョンと同じ $11N$ となる。前者を FT-contraction 、後者を FTS-contraction と便宜上呼ぶことにする。

独立な自由度に対応する低次のモーメントを添字 l、残りの高次のモーメントを添字 h と書く。つまり FT-contraction では $\hat{\mathscr{F}}_l$ は $\boldsymbol{F}$ と $\boldsymbol{T}$、FTS-contraction では S が加わる。この記法を用いて (70) 式を次のように書く。

$$\begin{bmatrix} \hat{\mathscr{U}}_l \\ \hat{\mathscr{U}}_h \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{\mathcal{M}}_{ll} & \hat{\mathcal{M}}_{lh} \\ \hat{\mathcal{M}}_{hl} & \hat{\mathcal{M}}_{hh} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \hat{\mathscr{F}}_l \\ \hat{\mathscr{F}}_h \end{bmatrix} \tag{79}$$

剛体性 $\hat{\mathscr{U}}_h = 0$ から、対応する力モーメント $\hat{\mathscr{F}}_h$ は解ける。

$$\hat{\mathscr{F}}_h = -\left(\hat{\mathcal{M}}_{hh}\right)^{-1} \cdot \hat{\mathcal{M}}_{hl} \cdot \hat{\mathscr{F}}_l \tag{80}$$

したがって contracted mobility 問題は次のように書ける。

$$\hat{\mathscr{U}}_l = \hat{\mathcal{M}}^{*}(p) \cdot \hat{\mathscr{F}}_l \tag{81}$$

ここで contracted mobility 行列 $\hat{\mathcal{M}}^{*}(p)$ は次のようになる。

$$\hat{\mathcal{M}}^{*}(p) = \hat{\mathcal{M}}_{ll} - \hat{\mathcal{M}}_{lh} \cdot \left(\hat{\mathcal{M}}_{hh}\right)^{-1} \cdot \hat{\mathcal{M}}_{hl} \tag{82}$$

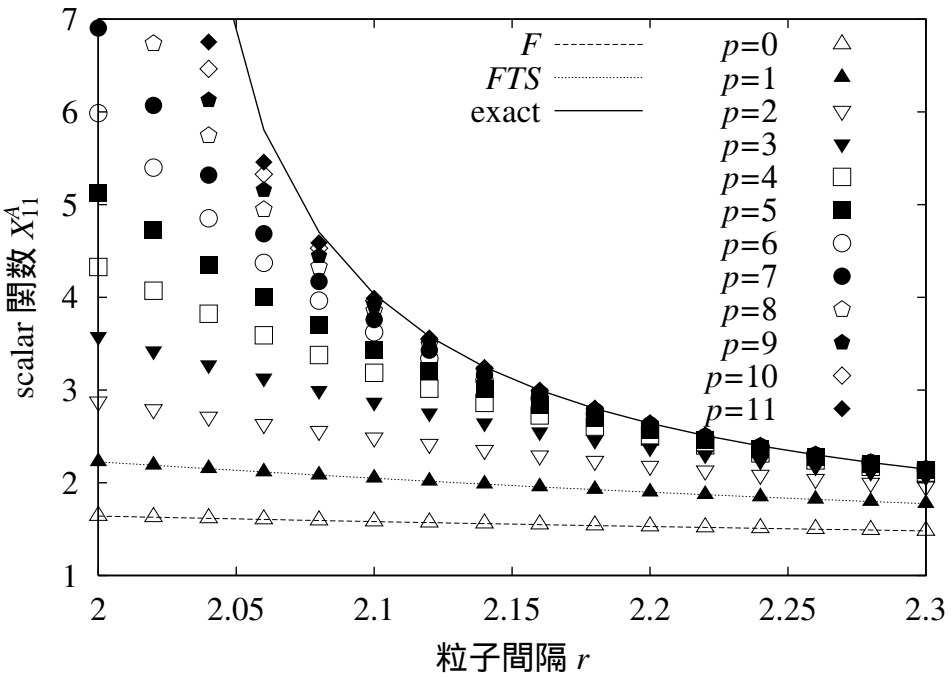

図 1: 2 体 resistance 問題のスカラー関数 $X^A_{11}(r;p)$ を様々な打ち切りに対して示す。'F' と 'FTS' は対応した解析表現の結果で、'exact' は Jeffrey & Onishi [46] の厳密解である。ここで示した手法の結果は $p = 0, 1, \cdots, 11$ に対して示した。

この行列は打ち切り p に依存し、$p \to \infty$ で厳密になる。この逆行列 $\hat{\mathcal{R}}^*(p) = (\hat{\mathcal{M}}^*)^{-1}$ は対応する contracted resistance 行列で、次の contracted resistance 問題を構成する。

$$\hat{\mathscr{F}}_l = \hat{\mathcal{R}}^*(p) \cdot \hat{\mathscr{U}}_l \tag{83}$$

行列 $\hat{\mathcal{M}}^*(p)$ と $\hat{\mathcal{R}}^*(p)$ の次元は FT-contraction では $6N \times 6N$、FTS-contraction では $11N \times 11N$ である。

この contracted 問題の実際の計算では、縮約された mobility 行列 $\hat{\mathcal{M}}$ を直接扱ったり、それを (79) 式のように陽に分割したりしたくない。先に示した 6 ステップの手順はこの要求に答える。逐次法による線形方程式の解法においては $\hat{\mathscr{F}}$ から $\hat{\mathscr{U}}$ を計算する手続きで十分である[*40]。

この定式化とその実装をテストするために、厳密解 [46] が分かっている 2 体問題を計算する。最初に resistance 問題を打ち切り $p = 0, 1, \cdots, 11$ で計算する。図 1 は 2 体 resistance 行列を与えるスカラー関数の一つ $X^A_{11}(r;p)$ を示す。打ち切り次数が $p \to \infty$ の極限で厳密解に収束している事が分かる。また $p = 0$ と $p = 1$ では対応する解析表現と完全に一致している事が分かる。解析表現は F バージョンは次のように、

$$X^A_{11}(r;0) = \frac{4r^6}{4r^6 - (3r^2 - 2)^2} \tag{84}$$

[*40] 具体的な詳細は論文 [39] の付録を参照。

FTS バージョンは次のように書ける。

$$X^A_{11}(r;1) = \frac{20r^6}{D}\left(-2880 + 2208r^2 - 260r^4 - 75r^6 + 20r^{10}\right) \tag{85}$$

ここで D は次のように与えられる。

$$\begin{aligned} D = {} & 2304 - 21120r^2 + 55600r^4 - 90600r^6 + 45945r^8 \\ & -800r^{10} - 1800r^{12} - 900r^{14} + 400r^{16} \end{aligned} \tag{86}$$

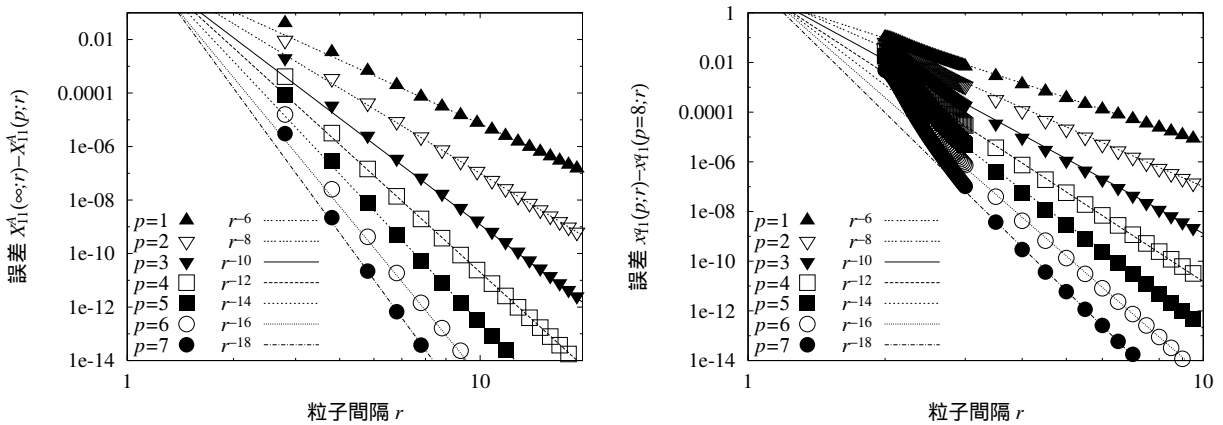

図 2: 2 体問題のスカラー関数の誤差。左は resistance 関数 $X^A_{11}(r;p)$ の厳密解 $X^A_{11}(r;p=\infty)$ からの差を、右は mobility 関数 $x^a_{11}(r;p)$ の高次の結果 $x^a_{11}(r;p=8)$ からの差を示す。

この定式化の打ち切り誤差を定量的に評価するため、resisntance 問題の厳密解との比較と mobility 問題での高次の解との比較を図 2 に示す。この結果からいずれの場合も誤差は $r^{-2(p+2)}$ でスケールされることが分かる。resistance 関数 Y^A_{11} や mobility 関数 y^a_{11} はこれらと同じ挙動を、その他の関数はより高次のスケーリングを持つことに注意する。つまりこの定式化全体の誤差は大きな r に対して $O(r^{-2(p+2)})$ となる。この次数に対する誤差は次のように理解できる。最初に mobility 問題を考える。p 次の打ち切りの最大誤差は、より高次での (正確な) 問題に対する $\hat{\mathcal{M}}_{lh}\cdot\left(\hat{\mathcal{M}}_{hh}\right)^{-1}\cdot\hat{\mathcal{M}}_{hl}$ に存在する $\mathscr{F}^{(p+1)}$ からの寄与である。r^0 というスケーリングを持つ自己部分は、$\hat{\mathcal{M}}_{hh}$ (と、したがってその逆) にのみ存在するので、$\mathscr{F}^{(p+1)}$ に関する最大誤差は $r^{-(p+2)}$ とスケールされる $\hat{\mathcal{M}}_{lh}$ と $\hat{\mathcal{M}}_{hl}$ の最低次から生じる。したがって mobility 問題の誤差は $r^{-2(p+2)}$ でスケールされる。mobility 問題だけでなく resistance 問題でも、剛体粒子に対しては $\mathscr{U}_h$ は常に既知であり、$\hat{\mathscr{F}}_h$ は未知である。つまり resistance 問題においても打ち切り誤差は $\mathscr{F}^{(p+1)}$ の寄与から $\hat{\mathscr{U}}_l$ にもたらされ、それは $r^{-2(p+2)}$ とスケールされる。$\hat{\mathscr{U}}_l$ から $\hat{\mathscr{F}}_l$ への最低次の寄与は自己部分であるから、resistance 問題の誤差も $r^{-2(p+2)}$ とスケールされる。

3.3 高速化

SDTOS のボトルネックは mobility 行列の反転にあり、それは $O(N^3)$ の計算コストが必要である。この計算は lubrication correction の導入だけでなく、(82) 式のような線形方程式の解法でも表

れる。したがって我々は線形方程式の解法を改良し $O(N^3)$ よりも早くする必要がある。我々が示した [41] ように、共役勾配型の逐次法の応用はこの改良の第一歩である。Stokesian Dynamics 法への逐次法の応用は $O(N^2)$ スキームを与える。この計算は mobility 行列と力モーメントのドット積から構成される。この計算が次のボトルネックになる。高速多重極法は古典的な多重極展開の簡単な拡張である。この方法は先の計算に応用できて、その結果 $O(N)$ スキームを与える。

混乱を避けるためにあらかじめ注意しておくが、ここで述べる $O(N^2)$ スキームや $O(N)$ スキームという用語は逐次法において収束が早い条件での計算コストに対するものである。より正確に言うと一回の逐次計算に掛かる計算コストに対するものである。したがってもし問題を解くのに例えば N^α という逐次回数が必要であれば、全体の計算には $O(N^2)$ スキームでは $O(N^{2+\alpha})$、$O(N)$ スキームでは $O(N^{1+\alpha})$ のコストが必要である。具体的な議論は 3.4 節で与える。

3.3.1 逐次解法

まず逐次法についてまとめ、次に今の問題に関する応用を議論する。以下のように与えられる標準的な線形方程式を考える。

$$\boldsymbol{b} = \mathsf{A} \cdot \boldsymbol{x} \tag{87}$$

ここで係数行列 A とベクトル $\boldsymbol{b}$ は既知で、未知ベクトル $\boldsymbol{x}$ について解く。共役勾配型の逐次法は、係数行列 A とある任意のベクトル $\boldsymbol{y}$ のドット積から構成される。したがって疎な係数行列など $\mathsf{A} \cdot \boldsymbol{y}$ の計算が速い場合は大変効率的である。このことはまた、今の問題のような密な行列に対しても速く収束する場合はこのドット積のコストで計算出来ることを意味する。

線形方程式 (79) を考える。resistance 問題に対しては係数行列は $\hat{\mathcal{M}}$、既知ベクトルは $\hat{\mathscr{U}}$ で、$\hat{\mathscr{F}}$ について解く。したがって 3.2.3 節で示した 6 ステップによる (70) 式の計算を使って逐次法を直接適用できる。この計算の 6 つのステップ全てが少くとも $O(N^2)$ のコストで計算できるので、全体の計算も $O(N^2)$ となる。mobility 問題や、移動出来る粒子と固定された粒子が共存する混合問題では状況は多少異なる。しかしこの差は本質的ではなく、これらの問題に対しても同じ 6 ステップの計算手順で逐次法を応用出来る。mobility 問題と resistance 問題での逐次回数の詳しい結果は 3.4.2 節で議論する。

SDTOS で示された lubrication correction は次のように扱う事が出来る。そこでは resistance 行列は、lubrication 行列 $\mathcal{L}$ を使って $(\mathcal{M})^{-1} + \mathcal{L}$ と近似される。ここで $\mathcal{M}$ は FTS バージョンなどある打ち切りでの mobility 行列である。lubrication 行列 $\mathcal{L}$ は 2 体の厳密解 [46] から構成される。この lubrication correction により、一般化された mobility 問題 (49) は次のように修正される。

$$(\mathsf{I} + \mathcal{M} \cdot \mathcal{L}) \cdot \mathscr{U} = \mathcal{M} \cdot \mathscr{F}. \tag{88}$$

これは $\mathscr{U}$ と $\mathscr{F}$ に関する一般化された線形方程式である。一般化された線形方程式の、行列の反転を陽に用いない取扱は可能である。そこでは次の二つのタイプのドット積、つまり $\mathcal{M} \cdot \mathscr{U}$ と $\mathcal{L} \cdot \mathscr{F}$ が必要となる。前者は 6 ステップの手順で、後者も lubrication の短距離性から $O(N)$ のコストで計算できる。lubrication correction に関して一つ注意しておく。最近 SDTOS の lubrication

correction の破綻と、それを克服する経験的な処方が報告された [23]。この処方は $\mathcal{L}$ に対して行われるものであり、望むならばその処方をこの定式化に用いることは出来る。ここでは詳細な議論には立ち入らない。

逐次法のバラエティについて簡単に述べておく。一般最小残差法 (GMRES) [81] は広く用いられている。これは対称行列に適している。しかし我々の問題では、生の行列 $\hat{\mathcal{M}}$ でさえ縮約によりわずかに非対称となる。実際 FTS バージョンでも、もし各粒子に対して以下の 11 要素のベクトル

$$ {}^t(U_x, U_y, U_z, \Omega_x, \Omega_y, \Omega_z, E_{xx}, E_{xy}, E_{xz}, E_{yy}, E_{yz}) \tag{89} $$

と

$$ {}^t(F_x, F_y, F_z, T_x, T_y, T_z, S_{xx}, S_{xy}, S_{xz}, S_{yy}, S_{yz}) \tag{90} $$

を使うと、SDTOS の mobility 行列は非対称になる。resistance 問題では $\hat{\mathcal{M}}$ が直接係数行列となるが、mobility 問題では $\hat{\mathcal{M}}$ の小行列のある組合せが係数行列となり、一般に非対称である。非対称だが正定値な行列に対しては安定化双共役勾配法 (BiCGSTAB) [91] や類似の手法が適している。本論文の計算ではこの方法を用いる。ここでは逐次法の詳細には立ち入らない。代りに多くの手法に関して概略してる本 [95] を挙げておく。

先に進む前に、現時点でのボトルネックがどこにあるかを見ておく。6 ステップの計算はステップ (ii) を除き全て各粒子に対するものであり、したがって $O(N)$ のコストである。一方ステップ (ii) の計算は $N-1$ 粒子に対する和を含むので、計算コストは $O(N^2)$ となる。ここが現在のボトルネックである。

3.3.2 高速多重極展開

ここでは高速多重極法 (fast multipole method、以下 FMM) を用いた更なる改良を議論する。FMM ははじめ Laplace 問題に対して 2 次元と 3 次元で、non-adaptive セル構造を用いて定式化され [33]、adaptive セル構造に拡張された [21]。Stokes 流れへの応用は周期境界条件のもとで Sangani & Mo (1996) [86] によって最初に示された。

ここでの現実的な目的は自由境界条件のもとでの $O(N)$ スキームを作ることであるが、加えて FMM をより単純な方法で定式化し実装したい。つまり FMM を、先の速度の微係数を用いた粒子に対する多重極展開を粒子集団に拡張することで再定式化する。この点がここでの定式化とオリジナルの FMM [33] や Sangani & Mo [86] の定式化との違いである。彼らは球面調和関数を用い、その結果式が複雑で計算コストが高いが、我々は単純な Cartesian モーメントと Cartesian 微係数を用い、代数演算だけで計算できる。ここでは non-adaptive セル構造のみ考える。

3.3.3 FMM の手順

$O(N^2)$ スキームの改良は (ii) の計算、つまり (72) 式、あるいは略記すると

$$ \mathscr{V}' = \mathcal{K} \cdot \mathscr{F} \tag{91} $$

に対してである。これは N 粒子に対する $(N-1)$ 和を含む。力モーメント $\mathscr{F}$ はここでは逐次法のある試行値として与えられる (既知である) ことに注意する。FMM のポイントは粒子を個別に扱うのではなく、力モーメント $\mathscr{F}(\beta)$ の粒子 β と速度の微係数 $\mathscr{V}'(\alpha)$ の粒子 α の両方に対してグループ化を行うことにある[*41]。

階層的なセル構造を導入し、このセル構造の階層間での計算を定式化する。全粒子を含む基本セルを階層 0 とする。階層 1 では、基本セルを 2^3 個に分割する。この分割されたセルを「子」と呼ぶ。この分割操作を最高階層 l_m まで繰り返す。最高階層のセルを「葉」と呼ぶ。「葉」を除く全てのセルは 2^3 個の「子」を持ち、基本セルを除く全てのセルはその「親」を持つ。このセル構造の中で FMM の手順は二つのステージ、つまり上向パスと下向パスを持つ。上向パスではあるセル C に含まれる全ての粒子の力モーメント

$$\mathscr{F}(C) = \sum_{\beta \in C} \mathcal{S}_F(\boldsymbol{x}^C, \boldsymbol{x}^\beta) \cdot \mathscr{F}(\beta) \tag{92}$$

が全階層の全セルに対して計算される。ここで $\boldsymbol{x}^C$ はセル C の中心である。演算子 $\mathcal{S}_F(\boldsymbol{x}^2, \boldsymbol{x}^1)$ は力モーメントの原点を $\boldsymbol{x}^1$ から $\boldsymbol{x}^2$ に移す。力モーメントの定義から二項定理を用いて $\mathcal{S}_F$ は求められる。下向パスでは漸化的に速度の微係数を計算する。このために演算子 $\mathcal{S}_V(\boldsymbol{x}^2, \boldsymbol{x}^1)$ を定義する。これは速度の微係数を求める点を $\boldsymbol{x}^1$ から $\boldsymbol{x}^2$ に移す。$\boldsymbol{x}^1$ での微係数は $\boldsymbol{x}^1$ での Taylor 展開の展開係数であるという事実から、その導出は直接的である。またここでセル C とその先祖から「十分離れた」セルからの寄与からなる速度の微係数

$$\mathscr{W}(C) = \sum_{\beta \notin N^C} \mathcal{K}(C, \beta) \cdot \mathscr{F}(\beta) \tag{93}$$

を導入する。N^C はセル C に近いセルを意味する。この「十分離れた」セルの導入は展開での精度を保証するためである。

FMM の具体的な計算手順は次に示す 5 ステップからなる:

(i). 定義 (92) により葉 L に対する力モーメントを計算する。

$$\mathscr{F}(L) = \sum_{\beta \in L} \mathcal{S}_F(\boldsymbol{x}^L, \boldsymbol{x}^\beta) \cdot \mathscr{F}(\beta) \tag{94}$$

ここで粒子に対する力モーメントは既知である。

(ii). 階層 l にあるセル P の力モーメントを階層 $l+1$ にある子セル C から計算する。

$$\mathscr{F}(P) = \sum_{C \text{ of } P}^{8} \mathcal{S}_F(\boldsymbol{x}^P, \boldsymbol{x}^C) \cdot \mathscr{F}(C) \tag{95}$$

この漸化式を用いて、階層 $l_m - 1$ から 2 までの力モーメントを計算する。

(iii). (少くとも) 階層 1 の $\mathscr{W}$ をゼロで初期化する。これはこの階層では十分離れたセルは存在しないからである。

[*41] tree-code と呼ばれる手法は、β に対してのみのグループ化を行い、$O(N \log N)$ の performance を持つ。tree-code については牧野 [108] を参照。

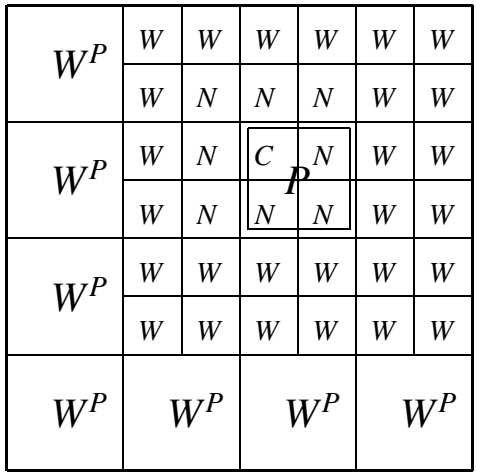

図 3: 2 次元でのセル構造。セル C に対する十分離れたセルは W、近いセルは N とした。セル C の親セル P から十分離れたセルでその子が W ではないセルを W^P とした。

(iv). 親の $\mathscr{W}(P)$ から $\mathscr{W}(C)$ を計算する。

$$\mathscr{W}(C) = \mathcal{S}_V(\boldsymbol{x}^C, \boldsymbol{x}^P) \cdot \mathscr{W}(P) + \sum_{W^C} \mathcal{K}(C, W) \cdot \mathscr{F}(W) \tag{96}$$

ここで W^C は、C と同じ階層にあるセルの中で N^C ではなく、その親が N^P であるものである。つまり右辺第 2 項は $\mathscr{W}(P)$ には含まれなかった寄与である。図 3 に 2 次元の場合の状況を示す。この関係を使って階層 2 から l_m にある全てのセルに対して $\mathscr{W}$ を計算する。

(v). 近いセルに含まれる粒子からの寄与を加え、粒子 α に対する速度の微係数を求める。

$$\mathscr{V}'(\alpha) = \mathcal{S}_V(\boldsymbol{x}^\alpha, \boldsymbol{x}^L) \cdot \mathscr{W}(L) + \sum_{\beta \in N^L, \beta \neq \alpha} \mathcal{K}(\alpha, \beta) \cdot \mathscr{F}(\beta) \tag{97}$$

(91) 式の直接計算をこの 5 ステップの手順で置き換えることで $O(N)$ スキームを得る。

ここで $\mathcal{S}_F$ による $\mathscr{F}$ の変換は厳密であることに注意する。つまりステップ (i) と (ii) には近似はない。したがって上向パスで計算された値は定義 (39) から直接計算された値に (有効桁の範囲で) 厳密に一致する。これはプログラムのよいテストになる。

3.3.4 コストの見積り

上に示した non-adaptive FMM スキームの計算コストを大まかに見る。ある逐次ステップの試行値として全ての粒子に対する力モーメントを与えて速度の微係数を求める計算は、各ステップを次のようなコストで実行される:

(i). 葉 L に対する (94) 式の計算は $O(N)$ のコストで計算される。

(ii). 階層 $l_m - 1$ から 2 のセルに対する (95) 式の計算は $O(8n_C)$ のコストで計算される。ここで n_C はセル構造に含まれる全セルの数である。

(iii). 階層 1 での $\mathscr{W}$ の消去は $O(1)$ のコストで計算される。

(iv). 階層 $l = 2$ から l_m のセルに対する (96) 式の計算は $O(n_C(1 + n_W))$ のコストで計算される。ここで n_W はあるセルに対する十分離れたセルの数である。

(v). 全粒子に対する (97) 式の計算は $O(N(1 + n_L))$ のコストで計算される。ここで n_L はある葉セルに含まれる粒子数である。

粒子数 N が大きい時ステップ (iii) のコストは無視できる。十分離れたセルの数 n_W は N に関して一定である。全てのセルの数 n_C と、ある葉セルに含まれる粒子数 n_L は次のようになる。

$$n_C = \sum_{l=0}^{l_m} 8^l = \frac{8^{l_m+1} - 1}{7} \tag{98}$$

$$n_L \approx \frac{N}{8^{l_m}} \tag{99}$$

ここで粒子の配置が基本セルの中で一様であることを期待した。l_m を固定した場合、N^2 でスケールされるステップ (v) のコストが N の大きな時支配的になる。一方 l_m を以下のようにとると、

$$l_m \approx \log N \tag{100}$$

n_C は $O(N)$ 、n_L は $O(1)$ となる。したがってステップ (ii) と (iv) 、(v) の計算コストは N でスケールされる。つまり力モーメント $\mathscr{F}$ による全ての粒子に対する $\mathscr{V}'$ を $O(N)$ のコストで計算できる。

3.3.5 打ち切り

3.2 節で議論した粒子表面の力密度の中心での展開と、FMM での粒子の力密度のグループ中心での展開は、原理的に独立である。3.2.5 節で見たように p 次の打ち切り誤差は $O(r^{-2(p+2)})$ である。これは距離 r が多大きいほど精度が良く、最大誤差は最小間隔の粒子対に対して起こることを意味する。

FMM の展開では、よい精度を得るためにある条件を課す必要がある。このために (93) 式に N^C を導入し、(96) 式のセル W^C を N^C によって以下のように定義した;

- W^C は C と同じ階層にある。
- W^C の親は N^P である。
- W^C は N^C ではない。

この定義から、C の十分離れたセルと、C の先祖の十分離れたセル、C の近いセルによって基本セルが過不足なく覆われる。典型的な N^C の定義は C 自身を含む最近接セルであり、最大 3^3 個となる。n_s を最も近い十分離れたセルまでの間にあるセルの数とするとこの状況は $n_s = 1$ となる。この選択が唯一でないことに注意する。例えば N^C として C の 5 倍の長さを持ち C を中心とする直方体の内部に含まれるセルととることも出来る ($n_s = 2$ に対応)。この場合 N^C は最大 5^3 個のセルを持ち、その結果はより精度のよいものとなる。

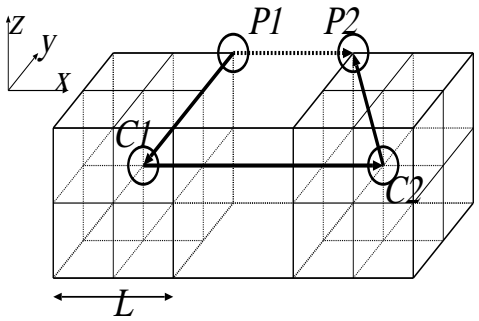

図 4: セル構造で、$n_s = 1$ の場合の、最も精度が悪くなる 3 次元での点の配置。点 C_1 と C_2 は長さ L のセルの中心で、それらはお互いに十分離れている。点 P_1 と P_2 はセル C_1 と C_2 から最も離れた点である。P_1 と C_1 の距離と C_1 と C_2 の距離の比は $\sqrt{3}/2(n_s+1)$ である。

一般に多重極展開の誤差は打ち切り次数と長さの比 r/R で特徴付けられる。ここで r は源と展開点の距離、R は展開点と観測点の距離である。FMM ではこの比は n_s によって次のように決められる。

$$\frac{r}{R} \leq \frac{\sqrt{3}}{2(n_s+1)} \tag{101}$$

$n_s = 1$ の時の最も精度の悪くなる状況を図 4 に示す。もし (93) 式で力モーメントを q 次で打ち切ると、$n+m > q$ となる $\mathcal{K}^{(n,m)}$ は無視でき、最大誤差は $\left(\sqrt{3}/2(n_s+1)\right)^{q+1}$ でスケールされる。したがって FMM の打ち切り誤差は r に独立である、つまり粒子の配置によらない。

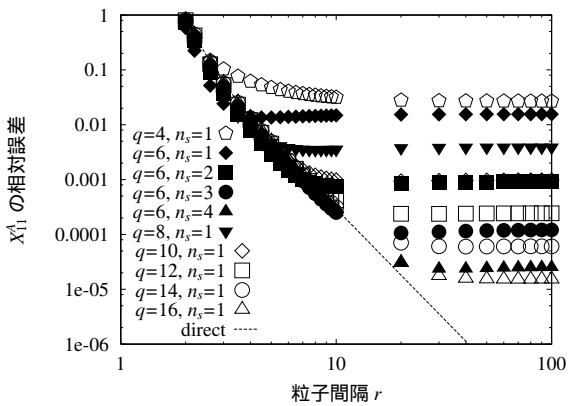

図 5: X_{11}^A の $p = 1$ での相対誤差を、距離 r に対してプロットしたもの。'direct' とある破線は (85) 式の $X_{11}^A(r; p = 1)$ の相対誤差で、r の大きなところで r^{-4} となる。

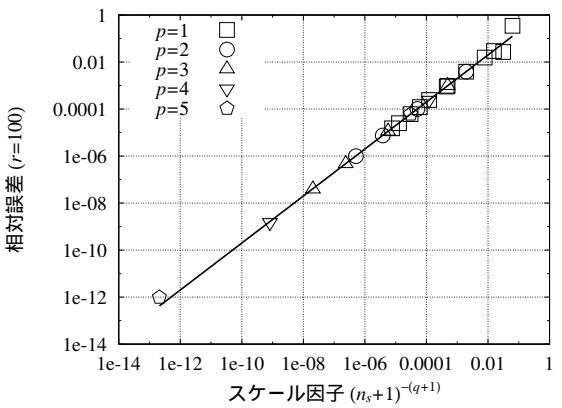

図 6: X_{11}^A の相対誤差をスケール因子 $(n_s+1)^{-(q+1)}$ に対してプロットしたもの。実線はこのスケーリングを示す。

現在のスキームの経験的な誤差を見積もるために、2 体 resistance 問題を解く。ここで展開点は

図 4 に示す最悪の状況を用いる。以下のように定義したスカラー関数 X^A_{11} の相対誤差を計算する。

$$\left| \frac{\left[X^A_{11}\right]^{FMM}(r;p,q,n_s) - X^A_{11}(r;\infty)}{X^A_{11}(r;\infty) - 1} \right| \tag{102}$$

ここで $\left[X^A_{11}\right]^{FMM}(r;p,q,n_s)$ は $O(N)$ スキームによる結果である。分母の 1 は 1 体の寄与、つまり無次元化された Stokes 抵抗である。図 5 に $p = 1$ での相対誤差を示す。r の小さいところでは $X^A_{11}(r;p=1)$ 自身の誤差が支配的であるが、r が大きくなると r によらない FMM の誤差が支配的になる。図 6 は $p = 2,\cdots,5$ を含む様々なパラメータでの、$r = 100$ での相対誤差と因子 $(n_s+1)^{-(q+1)}$ とのプロットである。

これら二つの領域の移り変る距離は、q と n_s が大きくなると大きくなる。標準的なパラメータ $n_s = 1$ と $q = 2(p+2)$ を選ぶ時、この移り変りは $p = 1$ に対して $r = 4$ のまわりで起きる; これは粒子の最小間隔が $r = 4$ よりも小さい比較的濃厚な粒子配置に対しては $O(N)$ スキームは $O(N^2)$ スキームと同じ程度の精度の解を与えることを意味する。一方、希薄な粒子配置に対しては $O(N)$ スキームは $O(N^2)$ スキームよりも精度の悪い解を与えることになる。この場合、$O(N^2)$ スキームは大変高い精度を持つ。

3.2 節の展開と FMM の展開は概念的に異なることを注意する。(72) 式では、$n \le p+2$ かつ $m \le p+2$ に対する $\mathcal{K}^{(n,m)}$、つまり $\mathcal{K}^{(p+2,p+2)}$ まで考慮する。これは得られる mobility 問題 (70) が解を持つためである。

3.4 計算結果

ここで、実際に $O(N^2)$ スキームと $O(N)$ スキームを使って、そのパフォーマンスを確かめる。以下に示す計算は全て 550 MHz の Pentium III プロセッサが 2 基、メモリが 1GB 載った FreeBSD の走るパソコンで行った。プログラムは Pentium プロセッサに最適化された GNU C コンパイラを使ってコンパイルした。

3.4.1 ベンチマーク

最初は mobility 問題 (81) や resistance 問題 (83) などの物理的な問題ではなく、(70) 式を直接力モーメントを与えて計算する。図 7 は $p = 1$ の場合の計算に掛かった CPU 時間である。$O(N^2)$ とある結果は 3.2.4 節の 6 ステップの手順による逐次法を用い、$O(N)$ とある結果は逐次手順のステップ (ii) の計算の (94) 式を (97) 式に置き換えた 5 ステップ FMM 手順を使った結果である。$O(N^2)$ スキームの CPU 時間が N^2 でスケールされることが分かる。'FTS' と書かれた結果は Durlofsky & Brady [29] に示された mobility 行列を陽に計算した結果である。$O(N^2)$ スキームの打ち切り p に対する一般化により余分なコストが掛かっている。FTS スキームが N^2 スケーリングとなる理由は、ここでは物理的な問題を解いていないので行列の反転が一切含まれないためである。l_m を固定した場合の $O(N)$ スキームには、CPU 時間が N に対して一定な領域と、N^2 でスケールされる

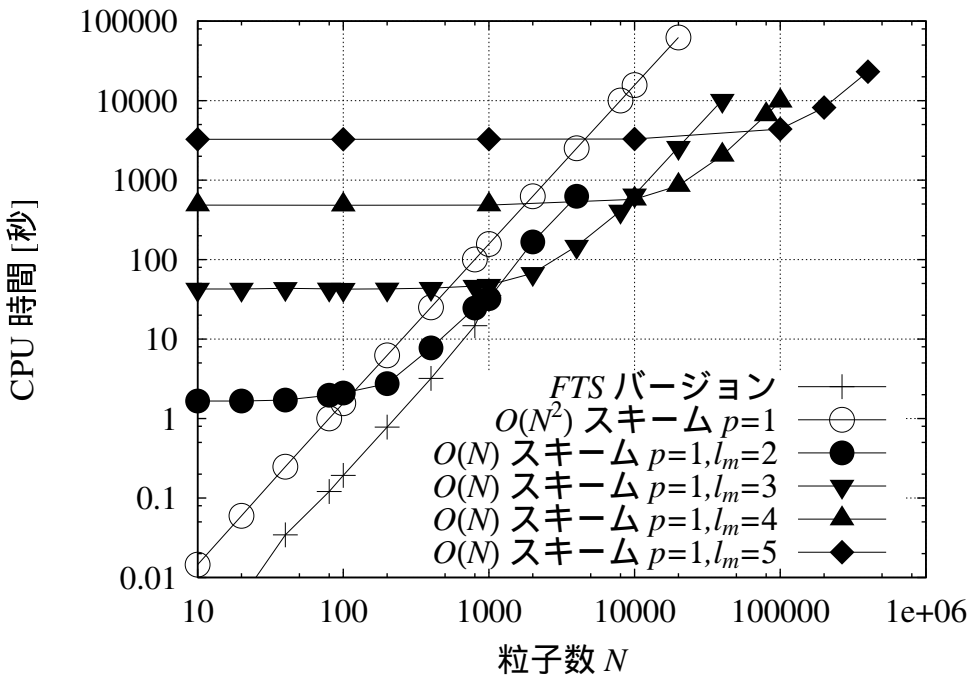

図 7: (70) 式の一回の計算に掛かる CPU 時間を、粒子数 N に対して示す。これらの計算の打ち切り次数は $p = 1$、つまり *FTS* バージョンと同じである。FMM の打ち切り次数は $q = 2(p + 2)$、十分離れたセルまでのセル間隔は $n_s = 1$、最大階層数は $l_m = 2, 3, 4, 5$ とした。「*FTS* バージョン」は比較のための元の Stokedian Dynamics による結果である。

領域がある。この移り変りは $O(N^2)$ のコストを持つステップ (v) の近いセルに対する粒子間の直接計算が、$O(N^0)$ のコストを持つセルに対する計算よりも支配的となる所で起こる。3.3.4 節で示したように、N が大きな時は系を (100) 式のようにより細かいセルに分割する必要がある。実際図 7 は、l_m に関する CPU 時間の移り変りが $N \approx 10^{l_m}$ の辺りで起こり、色々な $O(N)$ スキームに対する包絡線がほとんど N でスケールされることを示している。同様の振舞は高次バージョン ($p > 1$) でも見られる。

3.4.2 物理的な問題

次に物理的な問題を計算する。図 8 は間隔が $r = 3$ の単純立方格子上に配置した粒子に一定の力をかけた場合の平均落下速度である。この計算では、FMM の打ち切り次数を $q = 2(p + 2)$、十分離れたセルまでのセル間隔を $n_s = 1$ とした。落下速度は全て $N^{2/3}$ に比例した; もしこの粒子集団が同じ大きさの一つの物体だとすると、落下速度は N でスケールされる掛かった力と $N^{1/3}$ でスケールされる物体の大きさに比例する抵抗係数の比で与えられる。各 p に対する $O(N)$ スキームと $O(N^2)$ スキームの差は $O(N^2)$ スキーム自身の誤差と同じオーダーである。

これらの物理問題では、線形方程式を解く必要がある。逐次法を用いるとき、計算全体に必要な

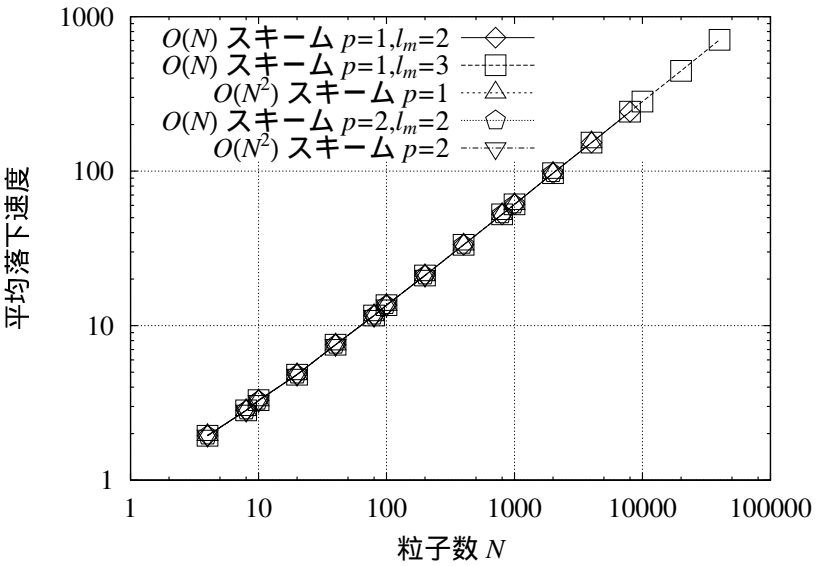

図 8: 間隔が $r = 3$ の単純立方格子上に粒子を配置した場合の平均落下速度。速度は 1 粒子の落下速度でスケールしてある。

コストは逐次回数 n_i に比例する。どのような問題でも、図 7 に示した (70) 式の一回の計算にかかる時間の n_i 倍の CPU 時間が必要である。なぜならば mobility 問題でも resistance 問題でも、また混合問題でも、(70) 式の計算が必ず核に含まれるからだ。逐次法の中での収束の状況を見るために、粒子間隔が $r = 3.0$ と 2.2 の単純立方格子の粒子配置とランダム配置に対して mobility 問題と resisntance 問題を解く。ランダム配置は一辺が $rN^{1/3}$ の直方体の領域に対して一様乱数によって粒

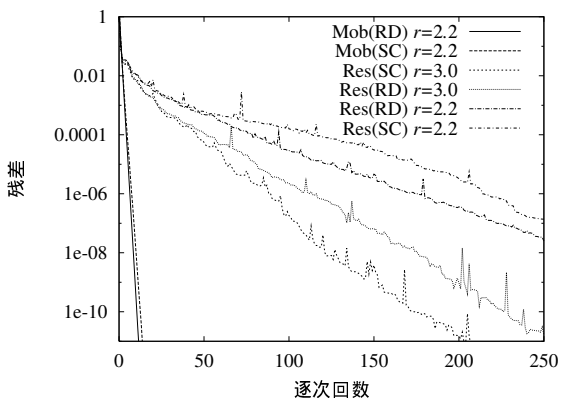

図 9: $N = 200$ に対する逐次法の残差。'Mob' と 'Res' はそれぞれ mobility 問題と resistance 問題を表す。'SC' と 'RD' はそれぞれ単純立方格子の粒子配置とランダム配置を表す。

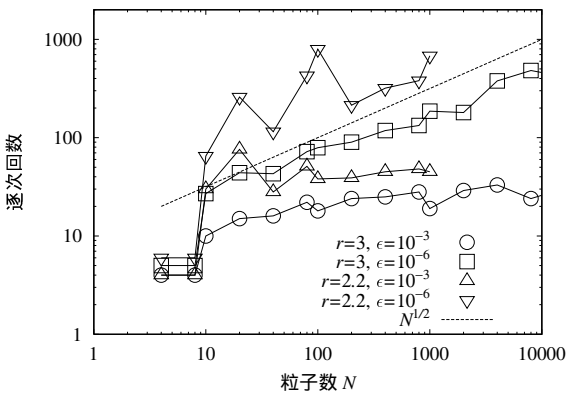

図 10: 粒子間隔が $r = 3.0$ と 2.2 の単純立方格子の粒子配列に対する resistance 問題での精度 $\epsilon = 10^{-3}$ と 10^{-6} での必要な逐次回数。

問題	mobility				resistance			
粒子配置	単純立方格子		ランダム		単純立方格子		ランダム	
間隔 r	3.0	2.2	3.0	2.2	3.0	2.2	3.0	2.2
$N = 4$	3	7	4	11	5	6	19	42
$N = 8$	3	6	5	10	5	6	30	59
$N = 10$	5	12	5	14	27	65	27	67
$N = 20$	5	15	6	11	44	259	40	116
$N = 40$	5	7	6	9	43	115	56	158
$N = 80$	6	11	6	7	72	427	69	101
$N = 100$	6	12	6	7	79	795	76	131
$N = 200$	5	8	6	7	90	214	114	176
$N = 400$	5	8	6		118	319	133	
$N = 800$	5	8	6		133	380	171	
$N = 1,000$	5	8	6		186	680	202	
$N = 2,000$	5				180		200	
$N = 4,000$	5				378		289	
$N = 8,000$	5				482		412	

表 2: mobility 問題と resistance 問題で、粒子間隔が $r = 3.0$ と 2.2 の単純立方格子の粒子配置とランダム配置に対して、$\epsilon = 10^{-6}$ の精度での逐次解法に必要な逐次回数をを示した。FMM に対するパラメータは $p = 1, q = 6, n_s = 1$ とした。(空欄は計算していないだけである。)

子を配置し、重なった場合を除いて構成した。図 9 は $N = 200$ に対する逐次回数を示す。mobility 問題の方が resistance 問題に比べ速く収束することが分かる。表 2 は精度 10^{-6} に必要な逐次回数である。mobility 問題については逐次回数は N に依らず、$O(N)$ のコストで解くことが出来る。一方 resistance 問題については N が大きくなるにつれて多くの逐次回数が必要となる。図 10 は resistance 問題に関する逐次回数である。高い精度 $\epsilon = 10^{-6}$ では逐次回数はおよそ $N^{1/2}$ で増加しているようであり、低い精度 $\epsilon = 10^{-3}$ では $\log N$ か、少くとも $N^{1/2}$ よりは少い回数で増加している。したがって resistance 問題を解くのに必要な計算コストは $O(N^{3/2})$ と予想される。

3.5 SDTNG の結論

低レイノルズ数の流れのもとで自由境界条件での剛体球形粒子の流体力学的な相互作用について、実空間の多重極展開を用いて定式化した。一般化された mobility 問題を導出した。これは原理的には任意の次数で、力モーメントを速度モーメントに関連付ける。この定式化では、速度モーメントを速度の微係数を使って計算した。この結果、単純 (で、ある意味自明) な定式化となった。SDTOS で Faxén の法則が使われたことが、恐らく *FTS* バージョンまでしか定式化出来ていなかった理由の一つである。*FTS* バージョンは、ここでの定式化の一次での打ち切りに相当する。ここでの定式化では Faxén は使われていないが、暗黙のうちにそれを含んだ定式化になっている; 流体速度の乱れを粒子表面で積分することは、ここでの定式化と Batchelor [6] に示される Faxén の法則の古典的な導出の両方で行われており、少くとも数学的には同じである。正則な問題を得るため

には、力モーメントと速度モーメントを適切に縮約することが本質的である; この縮約が、SDTOS の拡張のもう一つの障害であったのだろう。この障害を克服するために、力やトルク、 stresslet 、並進速度、角速度、 rate-of-strain という物理的な量を直接使わず、力モーメントと速度モーメントという数学的な量を使った。適切な縮約に対する系統的な定式化により、FTS での障害は無くなり、高次への拡張は直接的になった。この定式化によって、SDTOS の一つの困難は克服された。高次の $p = 11$ までの結果を陽な結果を示した。

SDTOS のもう一つの困難である計算スピードの改良についても示した。線形方程式の解法に逐次法を用いることで $O(N^2)$ スキームを定式化した。速度モーメントを速度の微係数を用いて計算しているため、高速多重極法 (FMM) を、古典的な多重極展開の自然な拡張として単純な形で定式化できる。non-adaptive FMM による $O(N)$ スキームを示した。この FMM の定式化では調和関数や三角関数は必要無い; これは FMM のオリジナルの定式化 [33] やその Stokes 流への応用 [86] との違い (であり長所) である。

これらのスキームのパフォーマンスは、一般化された mobility 問題の一回の計算に対してテストされた。この計算は mobility 問題や resistance 問題を解く際に常に含まれる。この計算に掛かる CPU 時間は、$O(N^2)$ スキームでは N^2 でスケールされ、$O(N)$ スキームでは non-adaptive セル構造の階層を $\log N$ と選ぶことで N でスケールされる。これらのスキームを用いた現実の問題の計算は、最大 $N = 400,000$ 粒子に対して行われた。mobility 問題については逐次回数が少く、$O(N)$ スキームを用いて N でスケールされるコストで計算できることが分かった。一方 resistance 問題ではより多くの逐次回数が必要で、高い精度 $\epsilon = 10^{-6}$ では $O(N)$ スキームを用いると $N^{3/2}$ の計算時間が必要となるようだ; ここで $O(N^2)$ スキームを用いると計算時間は $O(N^{5/2})$ となるが、いずれも SDTOS のコスト $O(N^3)$ よりは少い。ここでは逐次法に対する前処理は何も使っていないことに注意する。これは恐らくこの状況に有効であろうと思われる。

この $O(N)$ スキームによって、流体中の大きな粒子集団に対する詳細な流体力学的相互作用が計算できるようになる。幸い、自由境界条件での興味ある問題、例えば粒子集団の落下による崩壊 [71] やずり流れによる崩壊 [47] などは mobility 問題であり、$O(N)$ スキームで $O(N)$ のパフォーマンスが期待できる。

FMM の adaptive バージョンはここでは述べなかった。しかしこれは実際の動的な現象の研究に対しては重要である。なぜならば普通それらの系は構造やパターンを作り、そのため non-adaptive バージョンの FMM では良いパフォーマンスが期待できないからだ。

4　残された問題

以上で私の手持ちの話題は全て紹介し終った。以下ではここで紹介した手法のこれからの展開、発展、あるいは野望について、物理と計算手法に分けて見ていく。

4.1 物理としての未来

4.1.1 lubrication correction

この lubrication correction の問題は、自称「Stokesian Dynamics 三不思議」の最後に残っているものだ。SDTOS の lubrication correction に対しては単に「必然性が示されていない」という弱い批判に加え、最近 Cichocki *et al*. (1999) [23] が拡散係数の計算での 3 体効果でこの lubrication correction が破綻すること、またその解決法を理論的な正当化なしにではあるが示した。SDTOS の方法とは別のアプローチによる lubrication correction の導入が Sangani & Mo (1993) [85] に示されている。そこでは lubrication correction を接近する粒子の gap の中心での多重極で表現している。しかしそこでも、lubrication として評価する寄与を指定するパラメータは経験的に決められるに過ぎない。本論文で示した高次モーメントを使ったスキームは、2 粒子だけでなく 3 粒子やより多くの粒子系にたいしても正しい相互作用を与える。したがってこの問題に関する理論的な背景や、正しい処方を与えることが期待される。

高精度の結果を少いコストで計算する方法としての lubrication correction の正当化とは別に、Stokes 流れでの lubrication の持つ疑問をもう一点挙げておく。「粘性流体中で粒子の衝突がどうおこるのか？」という問いは本質的な、しかし難しい問題だ。流体の連続体記述を用いる限りは、lubrication の効果によりすき間 ϵ に対して $1/\epsilon$ の抗力が生じ、接触は妨げられる。粒子慣性が大きくなり、また流体粘性が小さくなる場合、例えば低い流速の流動層でさえ粒子の接触や衝突は生じている。連続体記述を放棄して小さい scale では流体を分子運動論的に扱うアプローチは、例えば Sundararajakumar & Koch (1996) [90] がある。

4.1.2 粉体流、流動層、その他

これまで一般的に流体が強く couple する物理現象は解析手段がない、あるいは複雑であるために流体力学の専門家以外からは敬遠されて来た。ここで紹介した計算手法は流体現象の中でもごく限られた Stokes 近似に対するものであるが、応用対象として考えられる問題を列挙する。

「粉体 (granular materials)」が近年物理の分野で研究されている。一般に粉体は suspension 粒子よりも大きくて重く、第ゼロ近似として空気の影響が効かない状況は広く研究されている。その文脈で「きれいではない問題」として残されているものが「流体の効く粉体の問題」である。例えば鉛直に立てた細管の中に粉体を流すと一様には流れず密度波が生じる。この現象は明らかに空気の影響である。zero-Reynolds-number の解析を安直に適用することは議論の余地が大いにあろうが、第一近似としての方向性は与えられるはずだ。

流動層は流体と最も couple した粉体と言える。高速流動層などは考慮の対象外となるが、流入流速の小さい状況に対しては、本手法は現在広く用いられている 2 流体モデルなど巨視的なモデルの基礎付けとして有意義な寄与を与えうる。流動層の粒子スケールでの挙動は、実はそれほど明ら

かになっていない。実際低速で観測されると言われる一様流動状態では粒子は静止している場合が観測されている [68] 。

粉体を離れてまず挙げられるのは、生体分子や DNA 、面状に構成した分子である膜、線状に並んだ分子である高分子などの媒質流体中での問題である。これらは古くから研究されてきたが、流体の多体効果が正しく扱われてきたとは言えない。また生物の運動、特に水中の微生物や動物の問題もある。最近注目される micro-machine などの微細な系は当然流体以外の寄与が重要な問題もあろうが、一般に環境の影響をより強く受けるため面白い現象があるかもしれない。

このようにまだまだ microhydrodynamics にフロンティアはあると思っている。

4.2 計算手法としての未来

3 節で紹介した数値手法は、そこで述べた通り素朴なもので何ら特殊な仮定などを用いていない。これは汎用性をはじめから意識した結果である。この手法の今後の発展として microhydrodynamics の中での応用に加え、流体に限らない一般の線形方程式で支配される問題への応用がある。例えば線形弾性論や、Laplace 問題である完全流体の渦無し流れ (bubbly liquids) 、完全流体の vortex dynamics 、重力多体系などが考えられる。以下ではそれぞれの問題の支配方程式を陽に書き、3 節で紹介した数値手法が形式的に応用可能なことを見る。

4.2.1 線形弾性論

FMM の応用は、特に国内では弾性論の問題において進んでいる。最近、弾性論の境界要素法と FMM に関する新しい成書 [107] が出ている。実際に私も FMM の勉強の当初、この本の著者の一人である福井卓雄氏の日本語で明快にまとめられた web 上のノート[*42] を見付け、大変参考になった。

線形弾性論の支配方程式は Navier 方程式である。

$$\mathbf{0} = \mu\nabla^2\boldsymbol{u} + (\lambda+\mu)\,\nabla\nabla\cdot\boldsymbol{u} + \rho\boldsymbol{b} \tag{103}$$

ここで $\boldsymbol{u}$ は変位、μ と λ は Lamé 定数と呼ばれる物質定数、ρ は密度、$\boldsymbol{b}$ は単位質量当たりに働く体積力である。Green 関数は Kelvin 関数と呼ばれ、3 次元の場合は次のようになる。

$$J^E_{ij}(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{8\pi\mu}\frac{1}{r}\frac{1}{\lambda+2\mu}\left\{(\lambda+3\mu)\,\delta_{ij} + (\lambda+\mu)\,\frac{r_i r_j}{r^2}\right\} \tag{104}$$

$$K^E_{ij;k}(\boldsymbol{r}) = -\frac{1}{4\pi}\frac{1}{r^2}\frac{1}{\lambda+2\mu}\left\{\mu\left(-\delta_{ij}\frac{r_k}{r} + \frac{r_i}{r}\delta_{jk} + \frac{r_j}{r}\delta_{ik}\right) + 3\,(\lambda+\mu)\,\frac{r_i r_j r_k}{r^3}\right\} \tag{105}$$

前者は single-layer potential、後者は double-layer potential である。これらを用いて変位 $\boldsymbol{u}$ の積分

[*42] http://taku3.anc-d.fukui-u.ac.jp/ tak/project/fast_bemJ.html

表現が得られる。

$$u_i(\boldsymbol{x}) = -\int_S dS(\boldsymbol{y})\ \left[J^E_{ij}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})\ f_j(\boldsymbol{y}) + K^E_{jk;i}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})\ n_j(\boldsymbol{y})u_k(\boldsymbol{y})\right] + \rho\int_V dV(\boldsymbol{y})\ J^E_{ij}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})\ b_j(\boldsymbol{y}) \tag{106}$$

ここで $\boldsymbol{n}(\boldsymbol{y})$ は表面 S 上の点 $\boldsymbol{y}$ での法線ベクトルで、体積 V の方向を正とする。

線形弾性論と Stokes 流れの支配方程式である (103) 式と (5) 式との類似性は明らかだ。しかし (106) 式と (36) 式の類似性は分かりにくい。それは簡単のために Stokes 流れで剛体条件から double-layer potential をはじめから省略したためだ。(36) 式を一般的に書くと次のようになる。

$$u_i(\boldsymbol{x}) = -\frac{1}{8\pi\mu}\int_S dS(\boldsymbol{y})\ \left[J_{ij}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})\ f_j(\boldsymbol{y}) + 2\mu K_{ijk}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})\ n_j(\boldsymbol{y})u_k(\boldsymbol{y})\right] \tag{107}$$

ここで $\mathsf{J}(\boldsymbol{r})$ は (6) 式で与えられた Oseen テンソル、$\mathsf{K}(\boldsymbol{r})$ は point force の作る stress に対応し、次のように与えられる。

$$K_{ijk}(\boldsymbol{r}) = -3\frac{r_i r_j r_k}{r^5} \tag{108}$$

この一般化は 3 節で示した定式化の困難とはならない。double-layer potential の表面積分の粒子中心での展開からは、力モーメントではなく速度モーメントが出てくる。

4.2.2 bubbly liquids

1.1.1 節で Navier–Stokes 方程式の Stokes 近似の逆の極限に完全流体があり、そこには渦無し流れと vortex dynamics があると言った。この完全流体の渦無し流れでの多体問題が bubbly liquids として議論されている液体中の気泡の問題だ。この問題も Stokes 流れの剛体粒子の suspension と類似の状況にある。つまり当初 2 流体モデルのような巨視的なモデルの構築が妥当な構成方程式や平均操作によりなされ、その後色々と問題点が指摘され、確実な足場 (粒子スケール) からの組み立てを試みている。多体相互作用の計算法は、Sangani & Didwania (1993) [84] や Smereka (1993) [88]、Yurkovetsky & Brady (1996) [97] がある。

colloidal suspension に対する Stokes 近似のように、bubbly liquids に対する渦無しの仮定は必ずしも自明ではない。Sangani & Didwania や Yurkovetsky & Brady によるとこの点に関しては Moore (1963,1965) [*43] が議論し、渦は気泡表面の厚さ $O(Re^{-1/2})$ の境界層に閉じ込められ、気泡背面での渦の剥離はなく wake の大きさも $O(Re^{-1/4})$ 程度である。この点は剛体と気泡や液泡との大きな違いである。Kok (1993) [*44] が 2 体問題に対して理論と実験の具体的な検証を行い、渦無し近似の正当性が確認され、一方界面活性剤により表面の流動が阻害される場合渦無し近似が破綻する

[*43] D.W.Moore, The boundary layer on a spherical gas bubble. *J. Fluid Mech.* (1963) **16**, 161; The velocity of rise of distorted gas bubbles in a liquid of small viscosity. *ibid* (1965) **23**, 749.

[*44] J.B.W. Kok (1993), Dynamics of gas bubbles moving through liquid. Part I. Theory. *Eur. J. Mech. B. Fluids* **12**, 515, Part II. Experiment. *ibid* 541.

ことが示された、とある。現実には存在する粘性力や気泡の衝突についても議論が残っているようである[*45]。

一般にベクトル場 $\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x})$ は Helmholtz 分解、つまり渦無し流れと湧き出し無し流れの和で書ける。

$$\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{\nabla}\phi(\boldsymbol{x}) + \boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}) \tag{109}$$

ここで ϕ と $\boldsymbol{A}$ は scalar potential と vector potential である。実際に前者は渦無し (rot $\boldsymbol{\nabla}\phi = 0$) であり後者は湧き出し無し (div $\boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{A} = 0$) である。ここで考えるのは渦無し流れなので流体の速度場は scalar potential ϕ を使って書ける。

$$\boldsymbol{u} = \boldsymbol{\nabla}\phi \tag{110}$$

非圧縮性から scalar potential ϕ は Laplace 方程式に従う。

$$\nabla^2\phi = 0 \tag{111}$$

Laplace 方程式 (111) の Green 関数は

$$J^L(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{4\pi}\frac{1}{r} \tag{112}$$

である。Green の定理から積分表示は次のように与えられる。

$$\phi(\boldsymbol{x}) = -\int dS(\boldsymbol{y}) \left\{ J^L(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})\, \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{u}(\boldsymbol{y}) - \left[\boldsymbol{\nabla}J^L\right](\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})\cdot\boldsymbol{n}\phi(\boldsymbol{y}) \right\} \tag{113}$$

気泡 α の表面の境界条件は、気泡の速度 $\boldsymbol{U}^\alpha$ と法線ベクトル $\boldsymbol{n}$ を用いて次のようになる。

$$\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\nabla}\phi = \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{U}^\alpha \tag{114}$$

このように境界値問題としての渦無し流れは Laplace 問題で、多体問題の構造は Stokes 流れと同様である。ここには完全流体の支配方程式である Eular 方程式、つまり Navier–Stokes 方程式 (2) で μ を 0 と置いた式の非線形性は現れていない。しかし時間発展にその非線形性は効いて来る。

4.2.3 vortex dynamics

FMM など多体問題の計算手法の問題の具体的な対象として、Laplace 問題に次いで古くから取り上げられている問題に vortex dynamics がある。これは完全流体の渦運動であり、Saffman の本 [83] がある。Lindsay & Krasny [64] の仕事は vortex dynamics に本論文の考えを (独立に) 適用したものであると言える。つまり球面調和関数を用いるのではなく、素朴に微分展開で定式化を行う方向である[*46]。そこでは高速化に関しては tree-code を採用している。

湧き出し無しとして速度場を vector potential で書く。

$$\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}) \tag{115}$$

[*45] 当然、これは部外者である私の偏見かもしれない。

[*46] Robert Krasny 氏には APS/DFD00 で私が発表した後声を掛けて頂き、彼の仕事を教えてもらった。その際頂いた投稿中の論文を読んで驚いたが、本当に私の考えてたことの渦ダイナミクス版、tree-code 版であると言える。

rotation を作用させると potential $\boldsymbol{A}$ に対して次のような Laplace 方程式を得る。

$$\nabla^2 \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}) = -\boldsymbol{\omega}(\boldsymbol{x}) \tag{116}$$

ここで $\boldsymbol{\omega} = \boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{u}$ である。したがって体積積分で potentail は次のように表せる。

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}) = \int dV(\boldsymbol{y})\, J^L(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y})\, \boldsymbol{\omega}(\boldsymbol{y}) \tag{117}$$

rotation を作用させて速度場の体積積分表現

$$\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}) = \int dV(\boldsymbol{y})\, J^V(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}) \times \boldsymbol{\omega}(\boldsymbol{y}) \tag{118}$$

を得る。ここで積分核 $\boldsymbol{J}^V$ は

$$\boldsymbol{J}^V(\boldsymbol{r}) = -\frac{1}{4\pi}\frac{\boldsymbol{r}}{r^3} \tag{119}$$

である。以上から point vortex は流体の流れに沿って運動するとすると運動方程式は次のようになる。

$$\boldsymbol{U}^\alpha = \sum_{\beta \neq \alpha} \boldsymbol{J}^V(\boldsymbol{x}^\alpha - \boldsymbol{x}^\beta) \times \boldsymbol{\omega}^\beta \tag{120}$$

ここで $\boldsymbol{\omega}^\beta$ は point vortex β の強さである。point vortex の場合は境界条件を解く必要がないので microhydrodynamics よりも単純である。

4.2.4 重力多体系

重力多体系は質点と見なした星のつくる重力ポテンシャルを求める問題としては Poisson 問題そのものである。質点の運動方程式は $\boldsymbol{U}^\alpha$ を質点 α の速度、m^β を質点 β の質量、$\boldsymbol{J}^G$ を万有引力とすると次のように書ける。

$$\frac{d}{dt}\boldsymbol{U}^\alpha = -\sum_{\alpha \neq \beta}^{N} \boldsymbol{J}^G(\boldsymbol{x}^\alpha - \boldsymbol{x}^\beta)\, m^\beta \tag{121}$$

ここで核 $\boldsymbol{J}^G$ は次のように書ける。

$$\boldsymbol{J}^G(\boldsymbol{r}) = G\frac{\boldsymbol{r}}{r^3} \tag{122}$$

ここで求めたいのは vortex dynamics の場合と同様に境界値問題を解くのではなく、与えられた質量 $\{m^\beta\}$ を持つ質点のある瞬間の質点配置 $\{\boldsymbol{x}^\alpha\}$ に対して (121) 式の右辺、つまり力である。計算のボトルネックは N 粒子に対する N 個の相互作用である。microhydrodynamics と違い、境界条件に関する線形方程式を解く必要が無い。したがって直接 FMM を応用することになる。重力多体系を質点で表す場合 FMM で計算するべき土台は microhydrodynamics での $p = 0$ の式と言える。一般に質点の配置は特殊な対称性を持たないので、ここでは reduction に神経を使う必要がない。

実は本原稿執筆中に、この原稿に先立つ本シリーズの牧野淳一郎氏による論文「重力多体系の数値解析」[108] が牧野さんの web で公開された。その原稿を読んで両者が大変密接に関係している

事を認めた[*47]。特に牧野さんの第 7 節「計算手法–空間領域」とここでの第 3.3 節「高速化に向けて」の関係は興味深い。これはある読者 (例えば重力多体系の研究者や非専門家) には「 FMM の別の問題への応用」と見えるかも知れない。しかしそう読まれる事は、少くとも本論文にとっては本意ではない。第 3 節でも繰り返し述べた通りここでの FMM の定式化と実装は既存の手法の単なる応用ではなく、「単純な物理は単純に実装しよう」というこの論文での主義にしたがった FMM の再定式化である。著者としてはここに何らかの something new を示したつもりであり、読者にもそれらを見出していただきたい。この対比で私が強調したいのは「簡潔性」の意味である。computer にとっての簡潔性と、人間にとっての簡潔性は明らかに異なり、また人間にとっての簡潔性もその視点により異なる。ここで示した定式化は computer にとって簡潔であり、人間にとっては確かに冗長であるが、ある意味で簡潔である。重力多体系のアプローチ (や、あるいは伝統的な FMM) と、ここで示した冗長だが単純なアプローチの比較は、機会があれば是非行いたい。

5 まとめ

この原稿は大部分が私の論文 [39] の日本語訳であると同時に、私がこれまで集めた知識を現時点ではじめから終りまで一通り並べて見たものでもある。ここで示した議論は大きく二つのレベル、microhydrodynamics の物理に関する議論と、数値手法に関する議論に分けられる。「本シリーズ」は本来後者に関するものだが、はじめに断った通りここでは意識的に前者に関する議論にも多くのページを割いた。この点に関してはこの文章を読まれた識者の方から「ここは間違っている」とか「ここはこうだ」など教えて頂ければうれしい。また長々と書いたこの駄文が「何だこんな事も分からんのか」という批判でも良いから一つの契機になり、microhydrodynamics の研究が再び活性化してくれれば大変うれしい。

二つのレベルの議論のうちの後者、つまり数値手法に関してはここで更に主張したい。以上見て来たように、一般に「多体問題」と呼ばれるカテゴリーの問題は統一の framework で相互作用、つまり力やポテンシャルを計算できる。本論文の定式化は、支配方程式の線形性を除き流体力学の特性や問題の特殊性に一切よっていない。また粒子に対して点電荷や質点、point vortex のような point 近似は行っていない。そこでは粒子の有限サイズ効果も積分方程式と適切なモーメントを用いて一般的に定式化された。重力多体系が質点を扱い調和関数を用いる事は当然とるべき最適化の道であるが、それゆえより一般的な問題、例えば非 Laplace 問題にはたとえ多少の修正を施す事で適用可能ではあっても直接応用する事は難しい。異なった二つの物理的な問題の計算手法を扱った牧野氏の論文 [108] とこの論文の類似性は注目するべきだ。この類似性からある統一的な framework の存在を、物性に限らない物理研究者、あるいは物理にすら限らない広い分野の研究者に認識してほしい[*48]。ここで紹介した私自身の研究の過程で強く感じたのは、各分野で「独立」に

[*47] 実は 2000 年 3 月に総研大で開催された「天体力学Ｎ体力学研究会」で牧野さんには個人的に FMM に関して質問して、色々教えて頂いた。

[*48] 何だか generalist VS specialist という対決の図式を勝手に作っ (て、specialist 批判をし) たようだが、一番大切な点は「絶妙なバランス感覚」だ、と最近思う。

類似の努力が行われていることである。このこと自身には悪い点ばかりではなく良い点もある。実際、応用ばかりしては生産的な something new の発見は限られる。しかし程度を越えた独立化や専門化も問題である。粒子系のシミュレーションに長けた重力多体系研究者の方々には星だけが物理ではない事を、流体物理の研究者の方々には流体だけが物理ではない事を、粉体の研究者の方々には粉体だけが物理ではない事を意識して頂き、一方 computer 科学者には例えばどの逐次法がどの問題に適しているのか、この問題にはこの手法を使うと最適に問題を実装できるなど、広く物理で議論されている様々な具体的な問題に対して目を向けて頂ければ、この framework が生産的な結果を生み出す土壌になると信じる。言うまでも無いことだが、これらは極度に専門化してしまった私自身に対する言葉でもある。

謝辞

この原稿執筆の機会を頂いた「物性研究」編集長であり研究指導者である早川尚男氏に感謝します。思えば修士一年の時早川さんから与えられた種子が、本当に長い年月をかけてこの原稿になったと言える。私の個人的な満足度は決して低くはないが、これまでの研究が当時の早川さんが夢想しただろう花に成り得たかどうかは自信がない。草稿段階の原稿を読んで貴重な意見を頂いた早川さん、大信田丈志氏、石井克哉氏、関眞佐子氏、佐野理氏に感謝します。束縛する事なく常に私の好きな研究をさせて下さった早川さん、都築俊夫氏、John F. Brady 氏に感謝します。1996 年 4 月から 5 年間の研究は日本学術振興会特別研究員制度の援助による。

参考文献

[1] B.J. Alder and T.E. Wainwright. Studies in molecular dynamics. I. General method. *J. Chem. Phys.*, Vol. 31, pp. 459–466, 1959.

[2] P. A. Arp and S. G. Mason. The kinetics of flowing dispersions IX. Doublets of rigid spheres (Experimental). *J. Colloid Interface Sci.*, Vol. 61, pp. 44–61, 1977.

[3] P. A. Arp and S. G. Mason. The kinetics of flowing dispersions VIII. Doublets of rigid spheres (Theoretical). *J. Colloid Interface Sci.*, Vol. 61, pp. 21–43, 1977.

[4] G. K. Batchelor. *An Introduction to Fluid Dynamics*. Cambridge University Press, Cambridge, 1967.

[5] G. K. Batchelor. The stress system in a suspension of force-free particles. *J. Fluid Mech.*, Vol. 41, pp. 545–570, 1970.

[6] G. K. Batchelor. Sedimentation in a dilute dispersion spheres. *J. Fluid Mech.*, Vol. 52, pp. 245–268, 1972.

[7] G. K. Batchelor. Brownian diffusion of particles with hydrodynamic interaction. *J. Fluid Mech.*, Vol. 74, pp. 1–29, 1976.

[8] G. K. Batchelor and J. T. Green. The determination of the bulk stress in a suspension of spherical particles to order c^2. *J. Fluid Mech.*, Vol. 56, pp. 401–427, 1972.

[9] G. K. Batchelor and J. T. Green. The hydrodynamic interaction of two small freely-moving spheres in a linear flow field. *J. Fluid Mech.*, Vol. 56, pp. 375–400, 1972.

[10] C. W. J. Beenakker. The effective viscosity of a concentrated suspension of spheres (and its relation to diffusion). *Physica A*, Vol. 128, pp. 48–81, 1984.

[11] C. W. J. Beenakker. Ewald sum of the Rotne-Prager tensor. *J. Chem. Phys.*, Vol. 85, pp. 1581–1582, 1986.

[12] C. W. J. Beenakker and Peter Mazur. Self-diffusion of spheres in a concentrated suspension. *Physica A*, Vol. 120, pp. 388–410, 1983.

[13] C. W. J. Beenakker and Peter Mazur. Diffusion of spheres in a concentrated suspension II. *Physica A*, Vol. 126, pp. 349–370, 1984.

[14] Georges Bossis and John F. Brady. Dynamic simulation of sheared suspensions. *J. Chem. Phys.*, Vol. 80, p. 5141, 1984.

[15] John F. Brady and Georges Bossis. The rheology of concentrated suspension of spheres in simple shear flow by numerical simulation. *J. Fluid Mech.*, Vol. 155, p. 105, 1985.

[16] John F. Brady and Georges Bossis. Stokesian dynamics. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, Vol. 20, pp. 111–157, 1988.

[17] John F. Brady and Luis J. Durlofsky. The sedimentation rate of disordered suspensions. *Phys. Fluids*, Vol. 31, pp. 717–727, 1988.

[18] John F. Brady, Ronald J. Phillips, Julia C. Lester, and Georges Bossis. Dynamic simulation of hydrodynamically interacting suspensions. *J. Fluid Mech.*, Vol. 195, pp. 257–280, 1988.

[19] Michael P. Brenner. Screening mechanisms in sedimentation. *Phys. Fluids*, Vol. 11, pp. 754–772, 1999.

[20] Russel E. Caflisch and Jonathan H. C. Luke. Variance in the sedimentation speed of a suspension. *Phys. Fluids*, Vol. 28, pp. 759–760, 1985.

[21] J. Carrier, Leslie Greengard, and V. Rokhlin. A fast adaptive multipole algorithm for particle simulations. *J. Comput. Phys.*, Vol. 9, pp. 669–686, 1988.

[22] Allen T. Chwang and T. Yao-Tus Wu. Hydrodynamics of low-Reynolds-number flow. part 2. singularity method for Stokes flows. *J. Fluid Mech.*, Vol. 67, pp. 787–815, 1975.

[23] B. Cichocki, M. L. Ekiel-Jeżewska, and E. Wajnryb. Lubrication corrections for three-particle contribution to short-time self-diffusion coefficients in colloidal dispersions. *J. Chem. Phys.*, Vol. 111, pp. 3265–3273, 1999.

[24] H. J. H. Clercx and P. P. J. M. Schram. Three particle hydrodynamic interactions in suspensions. *J. Chem. Phys.*, Vol. 96, p. 3137, 1992.

[25] M. D. A. Cooley and M. E. O'Neill. On the slow motion generated in a viscous fluid by the approach of a sphere to a plane wall or stationary sphere. *Mathematika*, Vol. 16, pp. 37–49, 1969.

[26] M. D. A. Cooley and M. E. O'Neill. On the slow motion of two spheres in contact along their line of centres through a viscous fluid. *Proc. Camb. Phil. Soc.*, Vol. 66, pp. 407–415, 1969.

[27] T. Damour and B. R. Iyer. Multipole analysis for electromagnetism and linearized gravity with irreducible Cartesian tensors. *Phys. Rev. D*, Vol. 43, pp. 3259–3272, 1991.

[28] Robert H. Davis and Andreas Acrivos. Sedimentation of noncolloidal particles at low Reynolds number. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, Vol. 17, pp. 91–118, 1985.

[29] Louis Durlofsky, John F. Brady, and Georges Bossis. Dynamic simulation of hydrodynamically interacting particles. *J. Fluid Mech.*, Vol. 180, p. 21, 1987.

[30] Donald L. Ermak and J. A. McCammon. Brownian dynamisc with hydrodynamic interactions. *J. Chem. Phys.*, Vol. 69, pp. 1352–1360, 1978.

[31] Peter Ganatos, Robert Pfeffer, and Sheldon Weinbaum. A numerical-solution technique for three-dimensional Stokes flows, with application to the motion of strongly interacting spheres in a plane. *J. Fluid Mech.*, Vol. 84, pp. 79–111, 1978.

[32] Michael J. Gluckman, Robert Pfeffer, and Sheldon Weinbaum. A new technique for treating multiparticle slow viscous flow: axisymmetric flow past spheres and spheroids. *J. Fluid Mech.*, Vol. 50, pp. 705–740, 1971.

[33] Leslie Greengard and V. Rokhlin. A fast algorithm for particle simulations. *J. Comput. Phys.*, Vol. 73, pp. 325–348, 1987.

[34] J. Happel and Howard Brenner. *Low Reynolds number hydrodynamics*. Martunus Nihhoff, Dordrecht, 1973.

[35] H. Hasimoto. On the periodic fundamental solutions of the Stokes equations and their application to viscous flow past a cubic array of spheres. *J. Fluid Mech.*, Vol. 5, pp. 317–328, 1959.

[36] Hidenori Hasimoto and Osamu Sano. Stokeslets and eddies in creeping flow. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, Vol. 12, pp. 335–363, 1980.

[37] Hisao Hayakawa and Kengo Ichiki. Statistical theory of sedimentation of disordered suspensions. *Phys. Rev. E*, Vol. 51, p. R3815, 1995.

[38] Herbert E. Huppert. GEORGE KEITH BATCHELOR. *J. Fluid Mech.*, Vol. 421, pp. 1–14, 2000.

[39] Kengo Ichiki. Improvement of stokesian dynamics method for systems with finite number of particles. *J. Fluid Mech.*, 2001. submitted to J. Fluid Mech.

[40] Kengo Ichiki. Lubrication effect on many-body problem in stokes flows. 2001. in preparation.

[41] Kengo Ichiki and John F. Brady. Many-body effects and matrix-inversion in low-Reynolds-number hydrodynamics. *Phys. Fluids*, Vol. 13, pp. 350–353, 2001.

[42] Imre M. Jánosi, Tamás Tél, Dietrich E. Wolf, and Jason A. C. Gallas. Chaotic particle dynamics in viscous flows: The three-particle stokeslet problem. *Phys. Rev. E*, Vol. 56, pp. 2858–2868, 1997.

[43] G. B. Jeffery. On the steady rotation of a solid of revolution in a visous fluid. *Proc. London Math. Soc.*, Vol. 14, pp. 327–338, 1915.

[44] D. J. Jeffrey. The calculation of the low Reynolds number resistance for two unequal spheres. *Phys. Fluids A*, Vol. 4, pp. 16–29, 1992.

[45] D. J. Jeffrey, J. F. Morris, and John F. Brady. The pressure moments for two rigid spheres in low-Reynolds-number flow. *Phys. Fluids A*, Vol. 5, pp. 2317–2325, 1993.

[46] D. J. Jeffrey and Y. Onishi. Calculation of the resistance and mobility functions for two unequal spheres in low-Reynolds-number flow. *J. Fluid Mech.*, Vol. 139, pp. 261–290, 1984.

[47] S. Kao and S. G. Mason. Dispersion of particles by shear. *Nature*, Vol. 253, pp. 619–621, 1975.

[48] S. Kim and R. T. Mifflin. The resistance and mobility functions of two equal spheres in low-Reynolds-number flow. *Phys. Fluids*, Vol. 28, p. 2033, 1985.

[49] Sangtae Kim. Stokes flow past three spheres: An analytic solution. *Phys. Fluids*, Vol. 30, p. 2309, 1987.

[50] Sangtae Kim and Seppo J. Karrila. *Microhydrodynamics*. Butterworth-Heinemann, Boston, 1991.

[51] Donald L. Koch and E. S. G. Shaqfeh. Screening in sedimenting suspensions. *J. Fluid Mech.*, Vol. 224, pp. 275–303, 1991.

[52] G. J. Kynch. The slow motion of two or more spheres through a viscous fluid. *J. Fluid Mech.*, Vol. 5, pp. 193–208, 1959.

[53] Anthony J. C. Ladd. Hydrodynamic interactions in a suspension of spherical particles. *J. Chem. Phys.*, Vol. 88, pp. 5051–5063, 1988.

[54] Anthony J. C. Ladd. Hydrodynamic interactions and the viscosity of suspensions of freely-moving spheres. *J. Chem. Phys.*, Vol. 90, pp. 1149–1157, 1989.

[55] Anthony J. C. Ladd. Hydrodynamic transport coefficients of random dispersions of hard spheres. *J. Chem. Phys.*, Vol. 93, pp. 3484–3494, 1990.

[56] Anthony J. C. Ladd. Dynamical simulations of sedimenting spheres. *Phys. Fluids A*, Vol. 5, pp. 299–310, 1993.

[57] Anthony J. C. Ladd. Numerical simulations of particulate suspensions via a discretized Boltzmann equation. Part 1. Theoretical foundation. *J. Fluid Mech.*, Vol. 271, pp. 285–309, 1994.

[58] Anthony J. C. Ladd. Numerical simulations of particulate suspensions via a discretized Boltzmann equation. Part 2. Numerical results. *J. Fluid Mech.*, Vol. 271, pp. 311–339, 1994.

[59] Anthony J. C. Ladd, Michael E. Colvin, and Daan Frenkel. Application of lattice-gas cellular automata to the Brownian motion of solid in suspension. *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 60, pp. 975–978, 1988.

[60] O. A. Ladyzhenskaya. *The mathematical theory of viscous incompressible flow*. Goldon & Breach, 2nd edition, 1969.

[61] H. Lamb. *Hydrodynamics*. Cambridge University Press, 6th edition, 1932.

[62] L. Gary Leal. *Laminar Flow and Convective Transport Processes*. Cambridge University Press, Boston, 1992.

[63] C. J. Lin, K. J. Lee, and N. F. Sather. Slow motion of two spheres in a shear field. *J. Fluid Mech.*, Vol. 43, pp. 35–47, 1970.

[64] Keith Lindsey and Robert Krasny. A particle method and adaptive treecode for vortex sheet motion in 3-D flow. *J. Comput. Phys.*, 2000. submitted to the J. Comput. Phys. September 19, 2000.

[65] J. H. C. Luke. Convergence of a multipole reflection method for calculating stokes flow in a suspension. *SIAM J. Appl. Math.*, Vol. 49, p. 1635, 1989.

[66] S. R. Majumdar. Slow motion of an incompressible viscous liquid generated by the rotation of two spheres in contact. *Mathematika*, Vol. 14, pp. 43–46, 1967.

[67] Peter Mazur and W. van Saarloos. Many-sphere hydrodynamic interactions and mobilities in a suspension. *Physica A*, Vol. 115, pp. 21–57, 1982.

[68] Narayanan Menon and Douglas J. Durian. Particle motions in a gas-fluidized bed in sand. *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 79, pp. 3407–3410, 1997.

[69] G. Mo and A. S. Sangani. A method for computing Stokes flow interactions among spherical objects and its application to suspensions of drops and porous particles. *Phys. Fluids*, Vol. 6, pp. 1637–1652, 1994.

[70] Avinoam Nir and Andreas Acrivos. On the creeping motion of two arbitrary-sized touching spheres in a linear shear field. *J. Fluid Mech.*, Vol. 59, pp. 209–223, 1973.

[71] J. M. Nitsche and G. K. Batchelor. Break-up of a falling drop containing dispersed particles. *J. Fluid Mech.*, Vol. 340, pp. 161–175, 1997.

[72] Kevin C. Nunan and Joseph B. Keller. Effective viscosity of a periodic suspension. *J. Fluid Mech.*, Vol. 142, pp. 269–287, 1984.

[73] R. W. O'Brien. A method for the calculation of the effective transport properties of suspensions of interacting particles. *J. Fluid Mech.*, Vol. 91, pp. 17–39, 1979.

[74] M. E. O'Neill. On asymmetrical slow viscous flows caused by the motion of two equal spheres almost in contact. *Proc. Camb. Phil. Soc.*, Vol. 65, pp. 543–556, 1969.

[75] Michael E. O'Neill and Samir R. Majumdar. Asymmetrical slow viscous fluid motions caused by the translation or rotation of two spheres. Part I: The determination of exact solutions for any values of the ratio of radii and separation parameters. *Z. Angew. Math. Phys.*, Vol. 21, pp. 164–179, 1970.

[76] Michael E. O'Neill and Samir R. Majumdar. Asymmetrical slow viscous fluid motions caused by the translation or rotation of two spheres. Part II: Asymptotic forms of the solutions when the minimum clearance between the spheres approaches zero. *Z. Angew. Math. Phys.*, Vol. 21, pp. 180–187, 1970.

[77] R. J. Phillips, J. F. Brady, and G. Bossis. Hydrodynamic transport properties of hard-sphere dispersions. i. Suspensions of freely mobile particles. *Phys. Fluids*, Vol. 31, pp. 3462–3472, 1988.

[78] C. Pozrikidis. *Boundary integral and singularity methods for linearized viscous flow*. Cambridge University Press, 1992.

[79] J. M. Rallison and A. Acrivos. A numerical study of the deformation and burst of a viscous drop in an extensional flow. *J. Fluid Mech.*, Vol. 89, pp. 191–200, 1978.

[80] William Bailey Russel, Dudley Albert Saville, and William Reymond Schowalter. *Colloidal Dispersions*. Cambridge University Press, Cambridge, 1989.

[81] Y. Saad and M. H. Shultz. GMRES - a generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear-systems. *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, Vol. 7, pp. 856–869, 1986.

[82] P. G. Saffman. On the settling speed of free and fixed suspensions. *Stud. Appl. Math.*, Vol. 52, pp. 115–127, 1973.

[83] P. G. Saffman. *Vortex Dynamics*. Cambridge University Press, Cambdridge, 1992.

[84] A. S. Sangani and A. K. Didwania. Dynamic simulations of flows of bubbly liquids at large Reynolds numbers. *J. Fluid Mech.*, Vol. 250, pp. 307–337, 1993.

[85] A. S. Sangani and G. Mo. Inclusion of lubrication forces in dynamic simulations. *Phys. Fluids*, Vol. 6, pp. 1653–1662, 1994.

[86] A. S. Sangani and G. Mo. An $O(N)$ algorithm for Stokes and Laplace interactions of particles. *Phys. Fluids*, Vol. 8, pp. 1990–2010, 1996.

[87] P. N. Segrè, E. Herbolzheimer, and P. M. Chaikin. Long-range correlations in sedimentation. *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 79, pp. 2574–2577, 1997.

[88] Peter Smereka. On the motion of bubbles in a periodic box. *J. Fluid Mech.*, Vol. 254, pp. 79–112, 1993.

[89] Margaret Stimson and G. B. Jeffery. The motion of two spheres in a visous fluid. *Proc. Roy. Soc. A*, Vol. 111, pp. 110–116, 1926.

[90] R. R. Sundararajakumar and Donald L. Koch. Non-contiuum lubrication flows between particles colliding in a gas. *J. Fluid Mech.*, Vol. 313, pp. 283–308, 1996.

[91] H. A. van der Vorst. BI-CGSTAB: A fast and smoothly converging variant of BI-CG for the solution of nonsymmetric linear systems. *SIAM J. Sci. Stat. Comp.*, Vol. 13, pp. 631–644, 1992.

[92] Shoichi Wakiya. Slow motions of a viscous fluid around two spheres. *J. Phys. Soc. Japan*, Vol. 22, pp. 1101–1109, 1967.

[93] Shoichi Wakiya. Slow motion in shear flow of a doublet of two spheres in contact. *J. Phys. Soc. Japan*, Vol. 31, pp. 1581–1587, 1971. Correction: J. Phys. Soc. Japan (1972) **33**, 278.

[94] Sheldon Weinbaum and Peter Ganatos. Numerical multipole and boundary integral equation technique in Stokes flow. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, Vol. 22, pp. 275–316, 1990.

[95] Rüdiger Weiss. *Parameter-Free Iterative Linear Solvers*. Akademie Verlag, Berlin, 1996.

[96] G. K. Youngren and A. Acrivos. Stokes flow past a particle of arbitrary shape: a numerical method of solution. *J. Fluid Mech.*, Vol. 69, pp. 377–403, 1975.

[97] Yevgeny Yurkovetsky and John F. Brady. Statistical mechanics of bubbly liquids. *Phys. Fluids*, Vol. 8, pp. 881–895, 1996.

[98] A. A. Zick and G. M. Homsy. Stokes flow through periodic arrays of spheres. *J. Fluid Mech.*, Vol. 115, pp. 13–26, 1982.

[99] R. クーラン, D. ヒルベルト. 数理物理学の方法. 東京図書, 1959.

[100] ランダウ, リフシッツ. 流体力学. 東京図書, 1970.

[101] 久保亮五, 戸田盛和 (編) . 統計物理学. 岩波講座 現代物理学の基礎, No. 5. 岩波書店, 1978.

[102] 今井功. 流体力学 (前編). 裳華房, 1973.

[103] 今井功. ある流体物理屋の軌跡. 日本物理学会誌, Vol. 51, pp. 787–794, 1996.

[104] 佐野理. 連続体の力学. 裳華房, 2000.

[105] 寺沢寛一 (編) . 自然科学者のための数学概論 応用編. 岩波書店, 1960.

[106] 寺沢寛一. 自然科学者のための数学概論. 岩波書店, 1983.

[107] 小林昭一 (編) . 波動解析と境界要素法. 京都大学学術出版会, 2000.

[108] 牧野淳一郎. 重力多体系の数値解析. 物性研究, 2001.