Stokesian Dynamics 法の高精度化と高速化

Improvement of Stokesian Dynamics on Accuracy and Speed

○ 市來 健吾 (京大人環)

Kengo Ichiki
GSHE, Kyoto University, Kyoto 606-8501, Japan

The aim of this work is to present an efficient computational method of hydrodynamic interaction among spherical particles in low-Reynolds-number flows.

1　イントロ

本研究は、レイノルズ数が０の極限の粘性流体中の多粒子の流体力学的相互作用の数値計算手法の話である。一時代を築いたStokesian Dynamics法 $^{1)}$ は、開発されて１０年以上を経過し、計算機能力の向上と、物理の理解の進歩に伴い、大きく二つの問題(限界)が顕在化してきた。一つは計算精度の系統的な向上の手続きが確立されていないこと。実際展開の１次までとったFTS版が通常使われる。もう一つはその計算量の多さ(粒子数 N に対して $O(N^3)$)のため、計算可能な粒子数が数百個に限られること。本研究では、以下の３つの手段を拠り所にこれらの問題を解決する。３つとは、多重極展開、逐次法、そして高速多重極展開である。

2　精度の拡張

出発点はStokes近似である。この時剛体表面が作る任意の速度場 $\boldsymbol{u}$ は

$$\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}) = -\frac{1}{8\pi\mu}\sum_{\beta=1}^{N}\int_{S_\beta} dS(\boldsymbol{y})\mathsf{J}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})\cdot\boldsymbol{f}(\boldsymbol{y}) \quad (1)$$

とかける。ここで $J_{ij}(\boldsymbol{r}) = (\delta_{ij} + r_i r_j/r^2)/r$ はOseenテンソルである。粒子表面での力密度 $\boldsymbol{f}$ を粒子中心で展開すると、

$$\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}) = \sum_{\beta=1}^{N}\sum_{m=0}^{p}\mathcal{J}^{(m)}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}^\beta)\cdot\mathcal{F}_\beta^{(m)} \quad (2)$$

となる。ここで、

$$\mathcal{J}^{(m)}(\boldsymbol{r}) := \frac{1}{8\pi\mu}\frac{1}{m!}\left[(-\boldsymbol{\nabla})^m\,\mathsf{J}\right](\boldsymbol{r}) \quad (3)$$

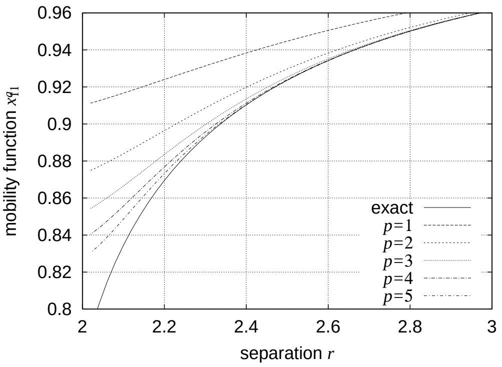
$$\mathcal{F}_\beta^{(m)} := -\int_{S_\beta} dS(\boldsymbol{y})(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{y}^\beta)^m\cdot\boldsymbol{f}(\boldsymbol{y}) \quad (4)$$

$\mathcal{F}$ は力のモーメントである。いま考えている多粒子問題は、粒子表面での境界値問題である。境界条件を課す方法はいくつかあるが、ここでは速度のモーメント $\mathcal{U}$ を導入する。

$$\mathcal{U}_\alpha^{(n)} := \frac{1}{4\pi a^2}\int_{S_\alpha} dS(\boldsymbol{y})(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x}^\alpha)^n\boldsymbol{u}(\boldsymbol{y}) \quad (5)$$

(2)式に(5)式の表面積分を作用させて、一般化された大移動度問題を構成できる。

$$\mathcal{U} = \mathcal{M}\cdot\mathcal{F} \quad (6)$$



Mobility function x^a_{11}.

モーメントの考慮する次数により、計算精度が上る。0 次のみ考慮する場合 SD の F 版に対応し、1 次まで考慮する場合は FTS 版に対応する。Fig.1 はこの展開が正しくプログラムされている事の確認のため、2 粒子問題の結果を厳密解と比較したものである。

3　高速化

剛体粒子は、高次の (irreducible) 速度モーメントは消える。このため移動度問題も抵抗問題も対応する高次の力のモーメントは未知数として解かれなければ成らない。いずれにせよ、適当な既知量/未知量に対して連立線形方程式 (6) を解かなければならない。Stokesian Dynamics 法ではここに直接法を用いたため $O(N^3)$ の計算が必要であったが、逐次法を用いる [3,4] ことで $O(N^2)$ まで効率化できる。ポイントは、各逐次ステップで任意の $\mathcal{F}'$ に対して $\mathcal{M}\cdot\mathcal{F}'$ を計算すれば良いことだ。つまり、更に高速化を望めば、この計算 (一般化された大移動度問題) を高速化すればよい。多重極展開は、粒子集団に対してその集団中心での展開にも使える。粒子の集団化により計算コストが軽減できる。

$$\begin{aligned}\mathcal{U}_\alpha &= \sum_{\beta=1}^{N} \mathcal{M}_{\alpha,\beta}\cdot\mathcal{F}_\beta \\ &= \mathcal{M}_{\alpha,D}\cdot\mathcal{F}_D \qquad (7)\end{aligned}$$

ここで

$$\mathcal{F}_D^{(m)} := -\sum_{\beta=1}^{N}\int_{S_\beta} dS(\boldsymbol{y})(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{y}_D)^m \boldsymbol{f}(\boldsymbol{y}) \qquad (8)$$

である。この集団化は速度モーメントに対しても適用できる。計算のために速度の微分係数 $\mathcal{V}$ を導入する。

$$\mathcal{V}^{(n)}(\boldsymbol{x}_P) := \frac{1}{n!}\left[\boldsymbol{\nabla u}\right](\boldsymbol{x}_P) \qquad (9)$$

自己効果を除き $\mathcal{U}$ と $\mathcal{V}$ は関係付けられている。$\boldsymbol{x}_P$ の $\mathcal{V}$ から $\boldsymbol{x}_C$ の $\boldsymbol{u}$ は次のように書ける。

$$\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}_C) = \sum_{n=0}\mathcal{V}^{(n)}(\boldsymbol{x}_P)\cdot(\boldsymbol{x}_C-\boldsymbol{x}_P)^n \qquad (10)$$

つまり、$\boldsymbol{V}$ の原点の移動は以下のように書ける。

$$\mathcal{V}^{(n)}(\boldsymbol{x}_C) = \sum_{m=n} {}_mC_n\mathcal{V}^{(m)}(\boldsymbol{x}_P)\cdot(\boldsymbol{x}_C-\boldsymbol{x}_P)^{m-n} \qquad (11)$$

高速多重極展開 [2] の詳細は文献に譲る。ポイント考慮する空間を色々なスケールで粗視化して、最初細かいスケールから力のモーメントを計算し、次に粗いスケールから順に、遠方の粒子からの寄与を速度の微分係数の形で計算していき、最後近接粒子の寄与は直接計算し、速度モーメントに変換することで、一般化された大移動度問題を計算する。この手順で先の集団化が効き、最大 $O(N)$ で計算できる。

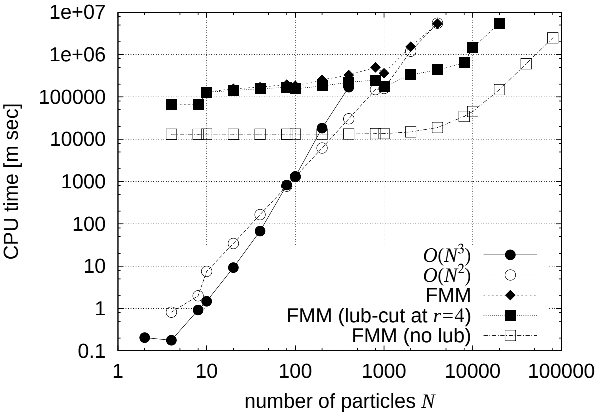


Fig. 2 CPU time.

4　結論

単純な多重極展開を用い、Stokesian Dynamics の高精度化と高速化を行った。

引用文献

1) J. F. Brady & G. Bossis, Annu. Rev. Fluid Mech. **20**, 111 (1988).

2) L. Greengard and V. Rokhlin, J. Comput. Phys. **73**, 325 (1987).

3) K. Ichiki & J. F. Brady, submitted to Phys. Fluids.

4) R. Weiss, *Parameter-Free Iterative Linear Solvers* (Akademie Verlag, Berlin, 1996).