2D4 ストークス流中の粒子の高速、高精度数値計算法

○ 市來 健吾 (京大人環)

Fast and Accurate Numerical Scheme for Particles in Stokes Flows

Kengo Ichiki (GSHE, Kyoto University)

Key Words: hydrodynamic interaction, Stokes flow

abstract

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、Reynolds 数 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、開発されて既に１０年以上を経過した。その間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 [2] 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

Reynolds 数が 0 の時の流体の流れが従う方程式は、Navier-Stokes 方程式の慣性項を落した Stokes 方程式だ。

$$0 = -\boldsymbol{\nabla} p + \mu \nabla^2 \boldsymbol{u} \tag{1}$$

$$\boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{u} = 0 \tag{2}$$

この時剛体表面が作る任意の速度場 $\boldsymbol{u}$ は一般に

$$\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}) = -\frac{1}{8\pi\mu} \sum_{\beta=1}^{N} \int_{S_\beta} dS(\boldsymbol{y})\ \mathsf{J}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}) \cdot \boldsymbol{f}(\boldsymbol{y}) \tag{3}$$

とかける。ここで $J_{ij}(\boldsymbol{r}) = (\delta_{ij} + r_i r_j / r^2)/r$ は Oseen tensor、つまり Stokes 方程式の Green 関数である。粒子表面での力密度 $\boldsymbol{f}$ を粒子中心で展開すると、

$$\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}) = \sum_{\beta=1}^{N} \sum_{m=0}^{p} \mathcal{J}^{(m)}(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}^\beta) \cdot \mathcal{F}^{(m)}(\beta) \tag{4}$$

となる。ここで、

$$\mathcal{J}^{(m)}(\boldsymbol{r}) := \frac{1}{8\pi\mu}\frac{1}{m!}\left[(-\boldsymbol{\nabla})^m \mathsf{J}\right](\boldsymbol{r}) \tag{5}$$

$$\mathcal{F}^{(m)}(\beta) := -\int_{S_\beta} dS(\boldsymbol{y})\ (\boldsymbol{y}-\boldsymbol{y}^\beta)^m \cdot \boldsymbol{f}(\boldsymbol{y}) \tag{6}$$

$\mathcal{F}$ は力の moment 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 moment $\mathcal{U}$ を導入する。

$$\mathcal{U}^{(n)}(\alpha) := \frac{1}{4\pi a^2}\int_{S_\alpha} dS(\boldsymbol{y})\ (\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x}^\alpha)^n \boldsymbol{u}(\boldsymbol{y}) \tag{7}$$

(4) 式に (7) 式の表面積分を作用させて、generalized mobility problem を構成できる。

$$\mathcal{U} = \mathcal{M}\cdot\mathcal{F} \tag{8}$$

境界条件を適切に課すには、moments $\mathcal{F}$ と $\mathcal{U}$ を縮約する必要がある事に注意する。つまり、非圧縮性の条件と粒子表面が球である条件から縮約された p 次の moment の (独立な) 要素の数は $3(2p+1)-1$ 個になる。縮約された moment を irreducible moment と呼ぶ。

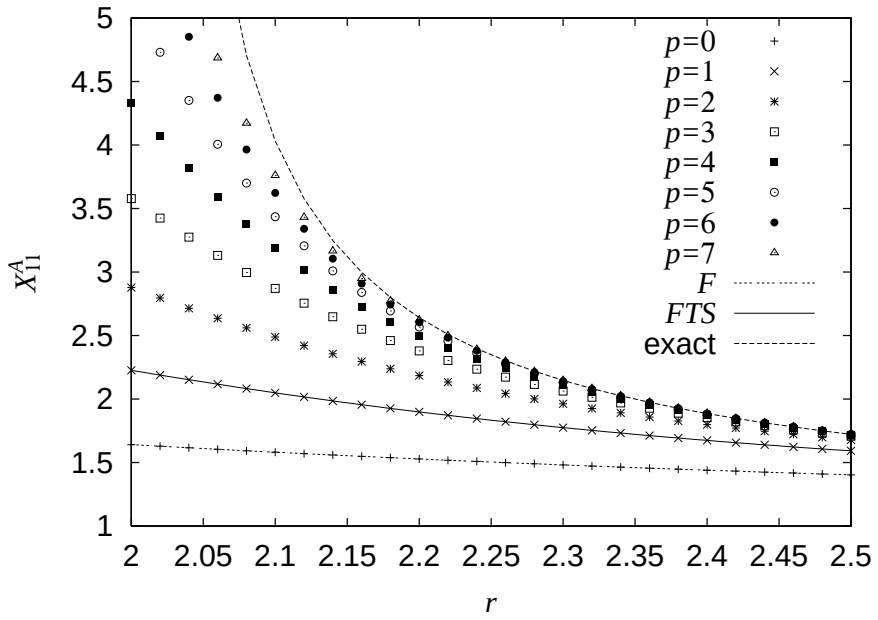

図 1. Resistance function X^A_{11}.

moment を打ち切る次数を増やすと、計算精度が上る。0 次のみ考慮する場合 Stokesian Dynamics 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。図 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 moment 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 moment 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 (8) 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 [4,5] 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。更に高速化を望めば、この計算 (generalized mobility problem) 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。

$$\begin{aligned}\mathcal{U}(\alpha) &= \sum_{\beta=1}^{N}\mathcal{M}_{\alpha,\beta}\cdot\mathcal{F}(\beta)\\ &= \mathcal{M}_{\alpha,D}\cdot\mathcal{F}(D)\end{aligned} \tag{9}$$

ここで

$$\mathcal{F}^{(m)}(D) := -\sum_{\beta=1}^{N}\int_{S_\beta} dS(\boldsymbol{y})\,(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{y}_D)^m\boldsymbol{f}(\boldsymbol{y}) \tag{10}$$

である。本研究の特徴は、速度 moments を直接計算せずに、速度の微分係数 $\mathcal{V}$ を介して計算する点にある。

$$\mathcal{V}^{(n)}(\boldsymbol{x}_P) := \frac{1}{n!}\left[\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{u}\right](\boldsymbol{x}_P) \tag{11}$$

これは、自己部分を除き $\mathcal{U}$ と $\mathcal{V}$ は関係付けられているからだ。速度の微分係数 $\mathcal{V}$ の方が計算が単純であり、多重極展開を容易に適用出来る。$\boldsymbol{x}_P$ の $\mathcal{V}$ から $\boldsymbol{x}_C$ の $\boldsymbol{u}$ は次のように書ける。

$$\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}_C) = \sum_{n=0}\mathcal{V}^{(n)}(\boldsymbol{x}_P)\cdot(\boldsymbol{x}_C-\boldsymbol{x}_P)^n \tag{12}$$

つまり、$\mathcal{V}$ の原点の移動は以下のように書ける。

$$\mathcal{V}^{(n)}(\boldsymbol{x}_C) = \sum_{m=n}{}_mC_n\mathcal{V}^{(m)}(\boldsymbol{x}_P)\cdot(\boldsymbol{x}_C-\boldsymbol{x}_P)^{m-n} \tag{13}$$

この $\mathcal{V}$ の原点の移動と $\mathcal{F}$ の原点の移動を用いて、高速多重極展開 [3] は構成でき、最高で N 体問題が $O(N)$ の cost で計算できる。この手法の詳細は文献に譲るが、ポイントは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、genralized mobility problem を計算する。図 2 に示すように、細分化するスケールを適切に選択することにより実際に $O(N)$ で計算できることが分かる。

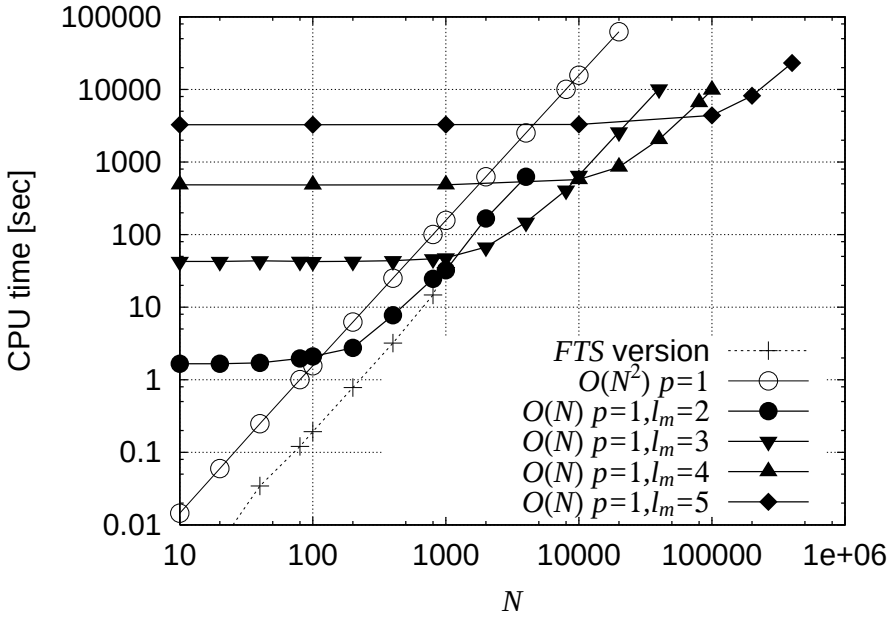

図 2. CPU time.

4 結論

多重極展開、逐次解法、高速多重極展開法を用い、Stokesian Dynamics の高精度化と高速化を行った。

謝辞

California Institute of Technology の John F. Brady 教授に感謝します。この研究は日本学術振興会から援助を受けています。

引用文献

1) J. F. Brady & G. Bossis, Annu. Rev. Fluid Mech. **20**, 111 (1988).
2) K. Ichiki, J. Fluid Mech. (submitted).
3) L. Greengard and V. Rokhlin, J. Comput. Phys. **73**, 325 (1987).
4) K. Ichiki & J. F. Brady, submitted to Phys. Fluids.
5) R. Weiss, *Parameter-Free Iterative Linear Solvers* (Akademie Verlag, Berlin, 1996).