4. 粒子力学
4-2. 微粒子混相系
4-2-2. ストークス動力学法

市來 健吾
Department of Mechanical Engineering,
The Johns Hopkins University

2003 年 2 月 25 日

1　ストークス動力学法とは

「ストークス動力学法」(Stokesian Dynamics method) が意味する内容は、人によりさまざまである。そこで、私がここで紹介するストークス動力学法を、「粘性流体中に分散した粒子が、流体から受ける力を計算する第一原理計算法」と定義することからはじめる。この定義に対して、Brady & Bossis[1)] で示された手法や、あるいはより狭義に、その中の近接相互作用の導入に対して用いられる場合がしばしばある。本稿では、言葉の本来の意味であり、それゆえに「分子動力学法」や「ブラウン動力学法」と同じレベルの術語として、ストークス動力学法を定義する。

以下この節では、最初にストークス動力学法を概観する。次に 2 節では現在の状況を、この手法の詳細も含めてまとめる。今後の発展を考える上でも、これまでの歴史をまとめておくことは意義があると考え、その他の手法も交え 3 節で紹介する。最後に 4 節で本稿をまとめる。

1.1　粉体工学とストークス動力学法

粉体工学にとって、ストークス動力学法はどのような意義をもつのだろうか? 私は理学の分野で教育を受け、理学的な動機から工学的な対象である粉体を研究してきた。この経験を通じていつも感じてきたことに、机上の一般論よりも現実的な現象論が大事であるという工学的な姿勢がある。一方で、粉体工学も成熟しつつある今日、理論や数値計算にはより精密な予言が、実験にはより精密な実証、検証が求められる。こうした状況の中、粉体の一般論構築という目標も現実的になってきたと感じる。ストークス動力学法は、この目標にとって重要な計算手法である。

粉体の記述には、大きく分けて粒子を直接扱う立場と、粒子を一つの連続体として扱う立場がある。ストークス動力学法は前者の立場にたち、粒子力学の中でも特に複雑である粒子間の流体力学的相互作用を、正確に与えることができる計算手法である。この正確な粒子力学の存在によって、粒子力学から連続体記述を導出するという一般論構築が、(それは今後さらに長い道のりを要するであろうが、) 現実的なものになる。

1.2　手法の限界、適用範囲

流体中に分散する粒子は、まわりからさまざまな力を受けながら運動方程式

$$m^\alpha \frac{d\boldsymbol{U}^\alpha}{dt} = \boldsymbol{F}_g^\alpha + \boldsymbol{F}_c^\alpha + \boldsymbol{F}_f^\alpha + \boldsymbol{F}_e^\alpha + \boldsymbol{F}_b^\alpha + \cdots \quad (1)$$

にしたがって運動する。ここで m^α は粒子 α の質量、$\boldsymbol{U}^\alpha$ は速度、右辺の $\boldsymbol{F}$ は粒子が受ける力– 例えば重力 $\boldsymbol{F}_g$ や接触力 $\boldsymbol{F}_c$ 、流体から受ける力 $\boldsymbol{F}_f$ 、電磁力 $\boldsymbol{F}_e$ 、熱揺動力 $\boldsymbol{F}_b$ など、である。これら粒子に働く力が全て分かれば、原理的に粒子の運動は全て予言することが出来る。ストークス動力学法は、このうち流体から受ける力 $\boldsymbol{F}_f$ を、粒子 Reynolds

数 $Re = au\rho/\mu$ が小さい極限 (Stokes 近似) で計算する手法である。ここで a は特徴的な長さとしての粒子半径、μ は流体の粘性、u は特徴的な速度、ρ は流体の密度である。

この Stokes 近似という制限は流体に対するもので、Navier-Stokes 方程式で粘性項が慣性項よりも大きい状況に対応する。したがって適用範囲は、粒子サイズが小さい場合、流体の粘性が大きい場合、特徴的な速度 (流体と粒子の相対速度) が小さい場合になる。この条件が満たされる限り、他に制限はない。つまり、粒子の慣性が効く場合 (つまり (1) 式の左辺が無視できない場合) や、熱揺動力が効く場合、電磁力 $\boldsymbol{F}_e$ が重要な場合にも適用できる。

では逆に流体から受ける力 $\boldsymbol{F}_f$ が無視できる状況は存在するだろうか? まず簡単のため、粒子慣性が無視できる場合を考える。以下の議論から分かる通り、$\boldsymbol{F}_f$ は粒子の速度に比例する。すると、運動方程式は $\boldsymbol{F}_f$ 以外の合力と $-\boldsymbol{F}_f = -\mathsf{R}\cdot\boldsymbol{U}$ の釣合いとなる。合力が決定論的に決まれば、粒子の速度 $\boldsymbol{U}$ がこの釣合いから決まる。つまり、 $\boldsymbol{F}_f$ はその他の合力と常に同じオーダーであり、無視できない。粒子慣性が効く場合は、先に述べた慣性の無い場合の粒子速度へ指数的に緩和する形になる。この緩和時間は質量 m^α に比例する。慣性が大きい弾道的な場合でなければ、同様に流体力学的相互作用は無視できない。

2 最新のストークス動力学法

まず最初に、ストークス動力学法の理論的な基礎と、その最新の状況を概観しよう。歴史的な背景とその他の手法については 3 節で述べる。

2.1 Stokes 方程式の境界値問題

Stokes 近似下では、非圧縮流体

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

は Stokes 方程式

$$0 = -\boldsymbol{\nabla}p + \mu\nabla^2\boldsymbol{u} \tag{3}$$

にしたがう。ここで $\boldsymbol{u}$ は流体の速度、p は圧力である。Navier-Stokes 方程式と異なり、Stokes 方程式は線形偏微分方程式で、ポテンシャル理論を用いて境界値問題を解くことができる。これまで多くの (そして本質的に等価な) 解法が示されてきたが、ここでは直観的に考えやすい実空間での多重極展開 [2] に沿って、剛体球形粒子に対する相互作用の計算を概説する。

剛体粒子が引きおこす速度場は、粒子表面の積分方程式

$$\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}) - \boldsymbol{u}^\infty(\boldsymbol{x}) = -\frac{1}{8\pi\mu}\sum_\alpha \int_{S_\alpha} dS(\boldsymbol{y})\ \mathsf{J}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})\cdot\boldsymbol{f}(\boldsymbol{y}) \tag{4}$$

で書ける。[3] ここで $\boldsymbol{u}^\infty$ は粒子が無い状況で系に与えられる流体の流れ、J は Stokes 方程式の Green 関数である Oseen テンソル

$$\mathsf{J}(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{r}\left(\mathsf{I} + \frac{\boldsymbol{r}\boldsymbol{r}}{r^2}\right) \tag{5}$$

であり、$\boldsymbol{f}$ は粒子表面 $\boldsymbol{y}$ での力密度である。以下、簡単のため $\boldsymbol{u}^\infty = \boldsymbol{0}$ とする。

Stokes 近似では、境界条件は速度か力密度で指定される。粒子表面の力密度を指定して速度を求める問題を 易動問題、逆に粒子表面の速度を指定して力密度を求める問題を 抵抗問題と呼ぶ。前者は粒子 α の表面 $\boldsymbol{y}$ に対する境界条件

$$\boldsymbol{u}(\boldsymbol{y}) = \boldsymbol{U}^\alpha + \boldsymbol{\Omega}^\alpha\times(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x}^\alpha) \tag{6}$$

を満たす解を、後者は

$$\boldsymbol{F}^\alpha = -\int_{S_\alpha} dS(\boldsymbol{y})\ \boldsymbol{f}(\boldsymbol{y}) \tag{7}$$

$$\boldsymbol{T}^\alpha = -\int_{S_\alpha} dS(\boldsymbol{y})\ \boldsymbol{f}(\boldsymbol{y})\times(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x}^\alpha) \tag{8}$$

を満たす解を求める問題である。ここで $\boldsymbol{x}^\alpha$ は粒子 α の中心、$\boldsymbol{U}^\alpha$ と $\boldsymbol{\Omega}^\alpha$ はそれぞれ粒子 α の並進と回転速度、$\boldsymbol{F}^\alpha$ と $\boldsymbol{T}^\alpha$ は粒子 α に働く力とトルクである。

これらの境界値問題を数値的に解くために、(4) 式の表面積分を直接扱う代わりに、速度モーメント

$$\mathscr{U}^{(n)}_{i,l\ldots}(\alpha) = \frac{1}{4\pi a^2}\int_{S_\alpha} dS(\boldsymbol{y})\ (\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x}^\alpha)^n_{l\ldots}\,u_i(\boldsymbol{y}) \tag{9}$$

と力モーメント

$$\mathscr{F}^{(m)}_{j,k\cdots}(\beta) = -\int_{S_\beta} dS(\boldsymbol{y})\ \left(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x}^\beta\right)^m_{k\cdots} f_j(\boldsymbol{y}) \tag{10}$$

を導入する。ここで下付きの添字はそれぞれのテンソルの座標指数 (x,y,z) を、$l\cdots$ と $k\cdots$ はそれぞれ n 個と m 個の指数の並びを表す。この $\mathscr{U}$ と $\mathscr{F}$ は線形方程式

$$\mathscr{U} = \mathscr{M}\cdot\mathscr{F} \tag{11}$$

で関係付けられる。ここで $\mathscr{U}$ と $\mathscr{F}$ は系に含まれる全粒子の速度モーメントと力モーメントを要素に持つベクトルで、$\mathscr{M}$ はそれらを関連付けるテンソルである。これを得るためには、まず (4) 式の右辺の被積分関数を粒子の中心に関して Taylor 展開する。

$$u_i(\boldsymbol{x}) = \sum_\alpha \sum_{m=0}^{\infty} \mathscr{J}^{(m)}_{ij,k\cdots}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^\alpha)\mathscr{F}^{(m)}_{j,k\cdots} \tag{12}$$

ここで $\mathscr{J}$ は

$$\mathscr{J}^{(m)}_{ij,k\cdots}(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{8\pi\mu}\frac{1}{m!}\left[(-\nabla)^m_{k\cdots} J_{ij}\right](\boldsymbol{r}) \tag{13}$$

で定義される Oseen テンソルの微分係数である。この速度場 $\boldsymbol{u}$ を速度モーメントの定義式 (9) に代入することで、例えば、$\mathscr{U}^{(n)}_{i,l\cdots}(\alpha)$ と $\mathscr{F}^{(m)}_{j,k\cdots}(\beta)$ を関連付けるテンソル要素は、

$$\mathscr{M}^{(n,m)}_{i,l\cdots;j,k\cdots}(\alpha;\beta) = \frac{1}{4\pi a^2}\int_{S_\alpha} dS(\boldsymbol{y})\ (\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x}^\alpha)^n_{l\cdots} \mathscr{J}^{(m)}_{ij,k\cdots}(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x}^\beta) \tag{14}$$

であることが分かる。この線形方程式 (11) は特異である。その理由は、両辺のベクトル $\mathscr{U}$ と $\mathscr{F}$ が、例えば

$$\mathscr{F}^{(1)}_{i,xy} = \mathscr{F}^{(1)}_{i,yx} \tag{15}$$

のように要素間に依存関係を持つためである。この依存関係は、以下のように縮約することができる。

$$\hat{\mathscr{U}} = \mathscr{P}\cdot\mathscr{U},\ \mathscr{U} = \mathscr{Q}\cdot\hat{\mathscr{U}} \tag{16}$$

ここで $\hat{\mathscr{U}}$ は独立な要素だけからなる irreducible テンソルである。また変換行列 $\mathscr{P}$ と $\mathscr{Q}$ は既知である。したがって (11) 式の既約な表現は

$$\hat{\mathscr{U}} = \hat{\mathscr{M}}\cdot\hat{\mathscr{F}} \tag{17}$$

となる。ここで $\hat{\mathscr{M}}$ は

$$\hat{\mathscr{M}} = \mathscr{P}\cdot\mathscr{M}\cdot\mathscr{Q} \tag{18}$$

である。

2.2 計算精度

計算精度を議論するために、(17) 式のベクトルをモーメントの次数でそろえて、次のように書き換える。

$$\begin{bmatrix} \hat{\mathscr{U}}^{low} \\ \hat{\mathscr{U}}^{high} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{\mathscr{M}}^{ll} & \hat{\mathscr{M}}^{lh} \\ \hat{\mathscr{M}}^{hl} & \hat{\mathscr{M}}^{hh} \end{bmatrix}\cdot\begin{bmatrix} \hat{\mathscr{F}}^{low} \\ \hat{\mathscr{F}}^{high} \end{bmatrix} \tag{19}$$

ここで $\hat{\mathscr{U}}^{low}$ と $\hat{\mathscr{F}}^{low}$ は剛体粒子の自由度に対応するモーメントの低次部分で、ぞれぞれ $\boldsymbol{U}$, $\boldsymbol{\Omega}$ と $\boldsymbol{F}$, $\boldsymbol{T}$ の線形結合である。$\hat{\mathscr{U}}^{high}$ と $\hat{\mathscr{F}}^{high}$ は残りの高次部分である。剛体粒子の場合、その性質から $\hat{\mathscr{U}}^{high} = 0$ である。したがって (19) 式は、さらに縮約された低次のモーメントのみの形で書ける。

$$\hat{\mathscr{U}}^{low} = \hat{\mathscr{M}}^*\cdot\hat{\mathscr{F}}^{low} \tag{20}$$

ここで

$$\hat{\mathscr{M}}^* = \hat{\mathscr{M}}^{ll} - \hat{\mathscr{M}}^{lh}\cdot\left(\hat{\mathscr{M}}^{hh}\right)^{-1}\cdot\hat{\mathscr{M}}^{hl} \tag{21}$$

である。現実の計算では (12) 式の展開を有限の次数 p で打ち切る。つまり (11) 式や (17) 式に含まれるモーメントの次数も有限である。この打ち切り次数を上げれば、得られる結果の精度も良くなる。この打ち切り誤差は次のように理解できる。r を考えている粒子間隔とする。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 $\hat{\mathscr{M}}^{lh}\cdot\left(\hat{\mathscr{M}}^{hh}\right)^{-1}\cdot\hat{\mathscr{M}}^{hl}$ に存在する $\hat{\mathscr{F}}^{(p+1)}$ 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、$\hat{\mathscr{M}}^{hh}$ (と、したがってその逆) にのみ存在するので、$\hat{\mathscr{F}}^{(p+1)}$ に関する最大誤差は $r^{-(p+2)}$ とスケールされる $\hat{\mathscr{M}}^{lh}$ と $\hat{\mathscr{M}}^{hl}$ の最低次から生じる。したがって誤差は $r^{-2(p+2)}$ でスケールされる。

以上の方法により、(20) 式を適切な境界条件で解くことで、無限流体中の有限粒子系に対する流体力学的相互作用を、要求された精度で計算することが可能となった。これは、もともとのストークス動力学法 [4] の多重極展開を、1 次のモーメント (つまり

力、トルク、ストレスレット) から任意の次数 p に拡張したことになっている。

この計算手法を周期境界条件に応用するには、相互作用の長距離性から Ewald 和の方法を用いる必要がある。しかしこの変更は、非周期境界の場合の式の Oseen テンソルを Ewald 和をとった周期境界条件下での Stokes 方程式の Green 関数 [5,6] に置き換えることで、形式的に行うことができる。

2.3 高速化

このように、現在ストークス動力学法は必要であれば高精度の結果を得ることができる。しかし正確な結果が得られるとしても、計算に必要な時間が長すぎては使いものにならない。現在最も重要な課題は、計算速度をいかに上げるかである。

ここでは、この課題に対する最近の研究である逐次法、高速多重極法、$\mathrm{P^3M}$ 法の応用を順に紹介していこう。

2.3.1 逐次法

ここまで見てきたように、ストークス動力学法の計算は線形方程式 (17) を、考えている境界条件に対して解くことである。つまり、易動問題では (21) 式を計算することであり、抵抗問題では (17) 式を反転させることである。この線形代数方程式の解法に直接法を用いると、粒子数 N に対して $O(N^3)$ の計算コストがかかる。従来より、ここがこの計算手法のボトルネックであった。ストークス動力学法の場合、線形方程式の係数行列は密であり、有限要素法などのような疎行列が表れる問題に比べてその恩恵は少ないが、逐次法を用いることで少なくとも $O(N^2)$ のコストまで下げることが出来る。[7]

逐次法は、既知ベクトル $\boldsymbol{b}$ と係数行列 A からなる次のような線形方程式

$$\mathsf{A}\cdot\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b} \tag{22}$$

に対して、A と予想ベクトル $\boldsymbol{x}'$ の積の計算を繰り返すことで、解 $\boldsymbol{x}$ を求める方法である。収束までの逐次回数が一定であれば、全体の計算コストは $\mathsf{A}\cdot\boldsymbol{x}'$ の計算コストでスケールされる。ストークス動力学法に応用する場合は、(21) 式のような行列の操作を避け、全ての操作を (17) 式で構成する必要がある。

抵抗問題では、直接 (17) 式自身を $\hat{\mathscr{U}}$ が既知ベクトル、$\hat{\mathscr{M}}$ が係数行列として逐次法にかければ、未知な量 $\hat{\mathscr{F}}$ を求めることができる。一方、易動問題を具体的に考えると、既知な量は $\hat{\mathscr{F}}^{low}$ と $\hat{\mathscr{U}}^{high}=0$ で、未知な量は $\hat{\mathscr{U}}^{low}$ と $\hat{\mathscr{F}}^{high}$ である。この問題を、既知ベクトル

$$\boldsymbol{b}=\hat{\mathscr{M}}\cdot\begin{bmatrix}\hat{\mathscr{F}}^{low}\\0\end{bmatrix} \tag{23}$$

と、行列とベクトルの積

$$\mathsf{A}\cdot\boldsymbol{x}=\begin{bmatrix}\hat{\mathscr{U}}^{low}\\0\end{bmatrix}-\hat{\mathscr{M}}\cdot\begin{bmatrix}0\\\hat{\mathscr{F}}^{high}\end{bmatrix} \tag{24}$$

で構成した逐次法を使えば、逆行列を直接計算することを避けることができる。この時のボトルネックは、抵抗問題の時と同様、速度モーメントの計算 (17) である。

2.3.2 高速多重極法

(17) 式の実際の計算では、速度モーメントを直接計算する代わりに、まず速度場の微分係数

$$\mathscr{V}^{(n)}_{i,k\cdots}(\boldsymbol{x})=\frac{1}{n!}\left[\nabla^n_{k\cdots}u_i\right](\boldsymbol{x}) \tag{25}$$

を計算し、これを $\mathscr{U}$ に変換している。したがって、ある力モーメント $\mathscr{F}'$ が与えられたときの速度場の微分係数 $\mathscr{V}$ の計算がここでのボトルネックである。これは各粒子に対して粒子和を含む計算で、通常 $O(N^2)$ のコストを要する。この計算に、高速多重極法を用いると、最大 $O(N)$ まで高速化することができる。

高速多重極法は最初 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 [8]、adaptive セル構造に拡張された [9]。ストークス動力学法への応用は、Mo & Sangani[10] による周期境界条件での定式化に対して応用された。[11] ここでは先に紹介した実空間での多重極展開による定式化に対する応用 [2] をまとめる。

(1) 計算手順　高速多重極法は 2.1 節で紹介した通常の多重極展開の拡張として考えられる。(12) 式では粒子表面に分布した力密度を粒子の中心での展開した。ここではある領域 C に分布する粒子群 β

の力モーメントを領域の中心 $\boldsymbol{x}^C$ で展開する。

$$u_i(\boldsymbol{x}) = \sum_{\beta\in C}\sum_{m=0}^{\infty} \mathscr{J}^{(m)}_{ij,k\cdots}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^\beta)\mathscr{F}^{(m)}_{j,k\cdots}(\beta) \quad (26)$$

$$= \sum_{m=0}^{\infty} \mathscr{J}^{(m)}_{ij,k\cdots}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^C)\mathscr{F}^{(m)}_{j,k\cdots}(C) \quad (27)$$

ここで粒子群 C の力モーメント $\mathscr{F}(C)$ は各粒子の力モーメント $\mathscr{F}(\beta)$ から代数的に計算することができる。

$$\mathscr{F}(C) = \sum_{\beta\in C} \mathcal{S}_F(\boldsymbol{x}^C, \boldsymbol{x}^\beta)\cdot\mathscr{F}(\beta) \quad (28)$$

$\mathcal{S}_F$ はモーメントの原点を移動する演算に対応した行列で、ベクトルの二項定理から書き下すことができる。このモーメントのシフト (28) は任意の集団に適用できる。したがって考えている領域に階層的なセル構造を導入することで、大きなセルのモーメントをより小さなモーメントから順次計算することができる。この方法は tree-code と呼ばれる手法で用いられ、$O(N\log N)$ のコストで N 体問題を計算できる。

高速多重極法は、このグルーピングを速度場の計算にも適用する。つまり Taylor 展開を使って、ある領域 D の中の速度場 $\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x})$ を、その領域の中心 $\boldsymbol{x}^D$ の速度場およびその微分係数 $\mathscr{V}(\boldsymbol{x}^D)$ から計算する。

$$u_i(\boldsymbol{x}) = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^D\right)^n_{k\cdots} \mathscr{V}^{(n)}_{i,k\cdots}(\boldsymbol{x}^D) \quad (29)$$

この展開された速度場は単純な巾級数で、その微分係数は簡単に計算できる。つまり、速度の微分係数 $\mathscr{V}$ の変換が以下のように構成できる。

$$\mathscr{V}(\boldsymbol{x}) = \mathcal{S}_V(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}^D)\cdot\mathscr{V}(\boldsymbol{x}^D) \quad (30)$$

(28) 式と同様に、この微分係数の変換を使って、階層的なセル構造に対して、大きなセルから小さなセルへ順次計算していくことが可能である。

簡単のため non-adaptive なセル構造での高速多重極法の計算手順を見ていこう。non-adaptive なセル構造とは、まず全粒子を含む領域を一つのセルとする。この階層を最上の 0 とする。次の階層のセルはこのセルを (3 次元の場合) 8 分割する。この分割を階層 l_m まで行う。この末端のセルの数は 8^{l_m} 個になる。

力モーメントから速度の微分係数を計算する最初のステップは、与えられた粒子の力モーメントを (28) 式を使って末端のセルにまとめる計算である。同様に下位のセルをまとめて順次上位のセルの力モーメントを計算する。ここまでの過程を、通常 upward pass と呼ぶ。この時点で、全てのセルに対するそれぞれの力モーメントが計算された。この力モーメントを使って、それらが作る速度場およびその微分係数を (27) およびその微分から計算する。ただしこの時、場を計算する場所 $\boldsymbol{x}$ が、考えているセルの場所 $\boldsymbol{x}^C$ から十分に遠いように注意する。あるセルにとって十分遠くのセルからの寄与が求まった後、(30) 式を使ってその下の階層のセルの場を計算する。ここで、上のセルには含まれていないが下のセルからは十分に離れているセルからの寄与を、先と同様に加える。この操作を末端のセルまで行う。この過程は downward pass と呼ばれる。最後に粒子の速度場を、末端セルの速度場と末端セルの近傍のセルに含まれる粒子からの寄与を合わせて計算する。

(2) 計算コスト　このプロセスの計算コストは、粒子と末端セルの力モーメントの変換が $O(N)$ 、最後の微分係数の変換が $O(Nn_L)$ 、upward pass と downward pass でのセル間のやりとりが $O(n_C)$ となる。ここで n_L は 1 つの末端セルに含まれる粒子数、n_C はセル構造全体のセル数である。non-adaptive セル構造の場合、n_C は

$$n_C = \sum_{l=0}^{l_m} 8^l \quad (31)$$

n_L は、粒子の配置が基本セルの中で一様であることを仮定して

$$n_L = \frac{N}{8^{l_m}} \quad (32)$$

となる。ここで l_m を

$$l_m \propto \log N \quad (33)$$

ととることで n_C は $O(N)$ 、n_L は $O(1)$ となり、力モーメント $\mathscr{F}$ から全ての粒子に対する速度の微

分係数 $\mathscr{V}$ を $O(N)$ のコストで計算できる。

(3) 精度　(12) 式の粒子表面の力密度の中心での展開と、(27) 式の高速多重極法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。先に見たとおり、前者の p 次の打ち切り誤差は $O(r^{-2(p+2)})$ である。これは粒子間距離 r が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。

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 (式 (27) の場合 $|\boldsymbol{x}^\beta - \boldsymbol{x}^C|$) 、$R$ は展開点と観測点の距離 (式 (27) の場合 $|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^C|$) である。高速多重極法では、この比が一定となるように計算する。したがって高速多重極法の打ち切り誤差は粒子間隔、つまり粒子の配置に独立である。このスキームの経験的な誤差を 2 体問題で検証してみると、実際に粒子間隔の小さいところでは前者の誤差が支配的であるが、大きくなると高速多重極法の誤差が支配的になることが分かる。

2.3.3　P^{3}M 法

ここまで見てきた高速多重極法は、周期境界条件の有無にかかわらず応用できる。これはこの定式化がもともとのストークス動力学法の自然な拡張になっているからである。一方、周期境界条件に特化した、もう一つの高速化のアプローチをここで紹介する。

Ewald 和の方法では、長距離相互作用を二つの部分に分離して計算する。その際、一方は速く減衰する単距離な相互作用になるようにとる。残りの寄与は必然的に長距離的な相互作用となるが、フーリエ変換することで、波数空間では速く減衰する形になっている。この結果、二つの有限和として相互作用を計算することが可能となる。実空間と波数空間の格子和の配分は、最初の分離に依存する。この分離パラメータは任意であり、通常は両者が同程度になるようにとることで、全体の計算量が極小になる。ここで、このパラメータを波数空間が多くなるように選び、波数空間の格子和を集中的に高速化するアプローチが「加速化ストークス動力学法」[12] である。これは、もともと重力系の計算法として開発された P^{3}M 法 (particle-particle particle-mesh method)[13] をストークス動力学に応用したもので、波数空間の格子和を高速フーリエ変換を用いて計算することで、全体として $O(N \log N)$ の計算コストで N 体問題を解く方法である。

この手法を 2.3.2 節で紹介した高速多重極法と比べた場合、非周期境界条件に適用できないという短所がある。しかし、周期境界条件では先の高速多重極法の実装に比べオーバーヘッドが小さく、高速である。

3　ストークス動力学法の歴史

3.1　ストークス動力学法以前

ここで、簡単にストークス動力学法の発展をまとめておく。まず計算手法の文脈で歴史を見ていこう。

3.1.1　分子動力学、ブラウン動力学

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分子動力学である。ここでの粒子は文字通り分子である。分子は真空中をある速度で飛んでいる。分子は衝突するだけで相互作用を持たないとした計算手法が Alder & Wainwright[14] によって定式化された。

分子動力学の考えをブラウン粒子に応用した手法がブラウン動力学である。ブラウン粒子と、それ取り囲む分散媒質を構成する分子の運動をすべての解く代わりに、媒質は連続体であるとする。粒子はその媒質から熱揺動力と粘性抵抗を受ける。この熱揺動力は、揺動散逸関係を満たすように粘性抵抗から決められる。この粘性抵抗に多体効果が入って来る。Ermak & McCammon[15] はこの粘性抵抗を、点源の重ね合わせで近似した。しかしこの手法には、粒子濃度が大きくなると数値的に不安定になるという問題があった。

3.1.2　重ね合わせの試行錯誤

この問題を解決するために、さまざまなアドホックな方法が試された。その中で、Brady & Bossis[16,17] 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

に易動問題、つまり速度の重ね合わせで表現するか、あるいは抵抗問題、つまり力の重ね合わせで表現するかのいずれかであった。経験的に、特に高濃度で、易動行列の重ね合わせ (点源の重ね合わせと同じ) の代わりに抵抗行列の重ね合わせをすることで精度が上がることが分かって来た。この試行錯誤の結果生まれたのが、近接効果の自己無矛盾な導入をはじめて行った、もともとのストークス動力学法 [1] であった。

ちなみに、先のブラウン動力学の不安定性は、点源の重ね合わせではなく、Durlofsky & Brady[4] の遠方効果ように (つまり 2.1 節で示した多重極展開のように) 粒子の有限サイズを適切に導入することで解決する。

ストークス動力学法ははじめ無限流体中の有限粒子系に対して定式化され、[4] その後 Beenakker[5] の Ewald 和をとった Oseen テンソルを用いて周期境界に拡張された。[6]

3.1.3 近接相互作用の補正

2.1 節で示した粒子中心での多重極展開は、2.2 節の誤差評価からも分かるように、粒子間距離が小さい時に解の精度が悪くなる。もともとのストークス動力学法 [1] では、この問題を解決する方法として、近接相互作用の補正を行った。

基本となる多重極展開により構成される易動行列 $\mathscr{M}^{\infty}$ をまず構成する。これは 1 次のモーメントで打ち切った近似解が使われた。2 体問題の厳密解 [18] から、$\mathscr{M}^{\infty}$ に含まれない近接効果を抜き出す。

$$\mathsf{L}_{2B} = \mathsf{R}_{2B} - (\mathsf{M}^{\infty}_{2B})^{-1} \tag{34}$$

これは 2 体問題で自己無矛盾となるように定義した、と解釈できる。この補正を系のすべての対に重ね合わせて $\mathscr{L}$ を構成し、抵抗行列を以下のように近似した。

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

この巧妙な近接効果の導入により、それまで全く不可能であった高濃度の系に対して、現実的で、数値的に安定な計算が可能となった。

この方法は低次の多重極展開の計算コストでより高精度の結果を与えるが、しかしその解の精度の定量的な評価が不明で、その正当性が確立していない。この意味で、一種の現象論と言える。また、ある状況ではこの補正が厳密な値から定量的にずれていることも報告されている [19] ため、注意が必要だ。

ここで紹介した近接効果の補正の方法とは別の方法が Sangani-Mo[20] により与えられている。そこでは近接効果を、粒子のすき間の中央での力モーメントの展開で表現している。残念ながら、両者の対応関係や、この方法で先の問題が解決されているかどうかは不明である。

3.2 流体力学的相互作用の歴史

次に、流体力学の文脈で Stokes 近似下の粒子間相互作用の歴史をまとめる。

3.2.1 Lamb の一般解

Lamb の教科書 [21] に紹介されている調和関数による Stokes 近似の一般解は、計算機が発達する以前の重要な手法である。2 粒子の厳密解 [18] は、この一般解を用いて求められている。また boundary collocation 法と呼ばれる数値手法は、Lamb の一般解を各粒子に対して重ね合わせ、その係数を境界条件を直接数値的に解くことで求める手法である。

3.2.2 多重極展開

ストークス動力学法の計算は、線形偏微分方程式の境界値問題を解くことと等価である。剛体粒子の場合、積分方程式表現はさらに単純になり、速度場は粘性ストレスの粒子表面での積分で書ける。この表面積分を粒子中心で展開する多重極展開は、singularity 法と呼ばれ、19 世紀末の Lorentz にまで遡ることができるそうだ。[22] もともとのストークス動力学法 [1] は、この展開を 0 次と 1 次までとったものに対応する。2 節で述べた定式化は、この方法の一般化である。

Mazur & van Saarloos[23] は波数空間での多重極展開から、irreducible テンソルを使った定式化を行った。Ladd[24] はこの定式化を周期系に応用し、もともとのストークス動力学法 [1] の結果を高精度に拡張した。

3.2.3 その他

Mo & Sangani[10] は、Lamb の一般解を周期境界条件下で用いるために、周期境界の解である橋本

の解 [25] との対応関係を用いて独自の定式化を行った。3.1.3 節で述べた通り、近接効果の補正も独自に行っており、また高速多重極法の応用 [11] もいち早く行っている。

3.3 その他の手法

3.3.1 境界要素法など

有限要素法は支配方程式の微分方程式を直接差分化して計算する方法であるが、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、[3,26] その積分方程式を差分化して計算する方法である。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系など、有限要素法では扱えない問題が扱える。

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.*[27] や Ganatos *et al.*[28] がその具体的な実装である。そこでは Lamb の一般解 [21,29] を用い、その係数を境界条件から決定する。Kim & Mifflin[30] はこの方法で 2 体問題を解いた。この手法の問題は、(境界要素法と同様であるが) 解が境界上の点の選択に依存し、場合によってパラメータを決定する線形方程式が特異になることである。このため動的な問題に用いるには注意が必要である。

3.3.2 格子ボルツマン法

格子ボルツマン法は、格子上での簡単な規則から流体の本質を近似的に記述しようとする試みから生まれた。そのため計算効率では他の数値解析に比べて大変よい性能をもつ。また Navier-Stokes 方程式との関係が理論的に示されており、原理的に Reynolds 数に制限はない。計算コストのスケーリングも、(基本的に流体の体積の差分化を行う有限要素法と同様に) $O(N)$ である。

ストークス動力学への応用は Ladd により行われている。[31–34]

3.3.3 ストークス動力学法との比較

ストークス動力学法は、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。ストークス動力学法はこの特徴を有効に使い、より粒子に最適化された数値手法といえる。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く、効率的である。

4 まとめ

固液混相系では欠くことの出来ない「流体力学的多体相互作用」は、一般に複雑であるために、これまで多くの解析で現象論に頼っていた。ストークス動力学法は、この相互作用を厳密に (望んだ精度で) 扱うことを可能にする。この詳細な流体力学的相互作用は、混相流の連続体モデルを導出する手がかりにもなる。これらの意味から、今後粉体工学に求められるであろう精密な理論、モデルの構築などに対して、この手法は極めて重要である。実際、すでにいくつかの研究がこの文脈で行われている。[35–37]

最後に、本稿で触れることのできなかった内容に関する文献をまとめておく。高速多重極法については国内で詳しい本が出版されている。[38] Stokes 近似の理論および数値的な詳細に関する成書は、Kim & Karrila[39] が全般にわたって詳しい。Pozrikidis[26] は境界要素法の詳細が記述されている。boundary collocation 法に関してはレビューがある。[40] 本稿で省略した実空間での多重極展開と高速多重極法の応用の詳細、また Stokes 近似での粒子相互作用の歴史に関しては、物性研究 [41] に詳しく書いた。

参考文献

1) John F. Brady and Georges Bossis. Stokesian dynamics. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, Vol. 20, pp. 111–157, 1988.
2) Kengo Ichiki. Improvement of the stokesian dy-

namics method for systems with finite number of particles. *J. Fluid Mech.*, Vol. 452, pp. 231–262, 2002.

3) O. A. Ladyzhenskaya. *The mathematical theory of viscous incompressible flow.* Gordon & Breach, 2nd edition, 1969.
4) Louis Durlofsky, John F. Brady, and Georges Bossis. Dynamic simulation of hydrodynamically interacting particles. *J. Fluid Mech.*, Vol. 180, p. 21, 1987.
5) C. W. J. Beenakker. Ewald sum of the Rotne-Prager tensor. *J. Chem. Phys.*, Vol. 85, pp. 1581–1582, 1986.
6) 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.
7) 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.
8) Leslie Greengard and V. Rokhlin. A fast algorithm for particle simulations. *J. Comput. Phys.*, Vol. 73, pp. 325–348, 1987.
9) J. Carrier, Leslie Greengard, and V. Rokhlin. A fast adaptive multipole algorithm for particle simulations. *J. Comput. Phys.*, Vol. 9, pp. 669–686, 1988.
10) 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.
11) 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.
12) Asimina Sierou and John F. Brady. Accelerated Stokesian Dynamics simulations. *J. Fluid Mech.*, Vol. 448, pp. 115–146, 2001.
13) R. W. Hockney and J. W. Eastwood. *Computer Simulation Using Particles.* McGraw-Hill, New York, 1981.
14) B.J. Alder and T.E. Wainwright. Studies in molecular dynamics. I. General method. *J. Chem. Phys.*, Vol. 31, pp. 459–466, 1959.
15) Donald L. Ermak and J. A. McCammon. Brownian dynamisc with hydrodynamic interactions. *J. Chem. Phys.*, Vol. 69, pp. 1352–1360, 1978.
16) Georges Bossis and John F. Brady. Dynamic simulation of sheared suspensions. *J. Chem. Phys.*, Vol. 80, p. 5141, 1984.
17) 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.
18) 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.
19) 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.
20) A. S. Sangani and G. Mo. Inclusion of lubrication forces in dynamic simulations. *Phys. Fluids*, Vol. 6, pp. 1653–1662, 1994.
21) H. Lamb. *Hydrodynamics.* Cambridge University Press, 6th edition, 1932.
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) Peter Mazur and W. van Saarloos. Many-sphere hydrodynamic interactions and mobilities in a suspension. *Physica A*, Vol. 115, pp. 21–57, 1982.
24) Anthony J. C. Ladd. Hydrodynamic interactions in a suspension of spherical particles. *J. Chem. Phys.*, Vol. 88, pp. 5051–5063, 1988.
25) 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.
26) C. Pozrikidis. *Boundary integral and singularity methods for linearized viscous flow.* Cambridge University Press, Cambridge, 1992.
27) 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.
28) 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.
29) J. Happel and Howard Brenner. *Low Reynolds number hydrodynamics.* Martunus Nihhoff, Dor-

drecht, 1973.

30) 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.
31) 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.
32) Anthony J. C. Ladd. Short-time motion of colloidal particles: Numerical simulation via a fluctuating lattice-Boltzmann equation. *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 70, pp. 1339–1342, 1993.
33) 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.
34) 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.
35) M. Marchioro, M. Tanksley, and A. Prosperetti. Flow of spatially non-uniform suspensions. Part I: Phenomenology. *Int. J. Multiphase Flow*, Vol. 26, pp. 783–831, 2000.
36) M. Marchioro, M. Tanksley, W. Wang, and A. Prosperetti. Flow of spatially non-uniform suspensions Part II: Systematic derivation of closure relations. *Int. J. Multiphase Flow*, Vol. 27, pp. 237–276, 2001.
37) W. Wang and A. Prosperetti. Flow of spatially non-uniform suspensions. Part III: Closure relations for porous media and spinning particles. *Int. J. Multiphase Flow*, Vol. 27, pp. 1627–1653, 2001.
38) 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.
39) Sangtae Kim and Seppo J. Karrila. *Microhydrodynamics*. Butterworth-Heinemann, Boston, 1991.
40) 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.
41) 市來健吾. Microhydrodynamics of colloidal suspensions. 物性研究, Vol. 76, pp. 584–641, 2001.