粒子法を用いたミルククラウン現象のシミュレーション

桶作愛嬉 柴田直幸 亀井健一郎

東京大学理学部物理学科

1. はじめに

理学部物理学科では、例年、学部学生の有志で物理に関連した展示や講演、実演ショーを五月祭で行っている。その中に、計算機を用いた物理シミュレーションに関する展示がある。希望者がシミュレーション用のプログラムを自作し、当日実際に演示するという試みである。 我々3人は、今年の活動を考えていく中で粒子法に興味を持ち、簡単なシミュレーションを PC でも行ってみた。しかし、粒子法は計算容量も計算時間も多く、より大規模計算をするためには並列計算が必要不可欠であることを学び、スーパーコンピューターを利用した並列計算を行いたいと考えた。並列計算を行うことで、より大規模なモデルを扱うことが可能になり、また、我々の粒子法や並列計算についてのスキルアップにもつながると考えている。最終的には、本実験の成果を五月祭で展示・発表し、一般の方々にも並列計算の重要性を伝えることができると考えている。

2. 粒子法のアイデアと粒子法を用いる利点

粒子法の基本的なアイデアは、連続体である流体を複数の粒子の集まりとして表すことで離散化する、というものである。流体の運動はナビエーストークス方程式によって記述されるが、この方程式を離散化された粒子の運動方程式に翻訳することで、流体の時間発展を決定するのである。この翻訳の際、ナビエーストークス方程式に現れる空間微分の項は粒子間相互作用として扱い、着目する粒子から半径 r_e 以内の近傍に存在する粒子とのみ相互作用するものとする。具体的な相互作用のモデルは次節以降で述べる。

粒子法は流体シミュレーション手法としては、有限体積法や有限要素法に代表される格子法がある。これらの方法では、解析領域を格子で区切り、格子点上に速度などの物理量を格納する。これに対して、粒子法では、流体を複数の粒子の集まりとして離散化し、それぞれの粒子に物理量を格納する。両者の違いは、ちょうどナビエーストークス方程式を考える際にオイラー記述を用いるかラグランジュ記述を用いるかに対応している。オイラー記述とは、空間に固定された視点から流れを記述する方法であり、一方、ラグランジュ記述とは、流れとともに動く視点から流れを記述する方法である。今回のシミュレーションで扱った、粘性率が一定の非圧縮性流体の場合におけるナビエーストークス方程式で言えば、オイラー記述に基づく格子法では

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla)\mathbf{v} = -\frac{1}{\rho}\nabla P + \nu \nabla^2 \mathbf{v} + \mathbf{g}$$
 (1)

という式を離散化しているのに対し、ラグランジュ記述に基づく粒子法では、

$$\frac{D\boldsymbol{v}}{Dt} = -\frac{1}{\rho}\boldsymbol{\nabla}P + \nu\boldsymbol{\nabla}^2\boldsymbol{v} + \boldsymbol{g} \tag{2}$$

のように「ラグランジュ微分」D/Dt の形のままの式を離散化していると言える。ここで,v は流体の速度場,t は時刻, ρ は流体の密度,P は流体の圧力場,v は動粘性係数,g は外場(今回の場合は重力場)である。式(1),(2)自体は等価であるが,式(1)では対流項と呼ばれる項 (v· ∇)v があらわに出てしまっており,この対流項を精度よく安定に計算することが難しい[1]ことが知られており,格子法における大きな課題である。一方,粒子法では,ラグランジュ記述を用いているので対流項を計算する必要がなく,対流項の計算の困難を根本的に解決することができるという大きな利点がある。また,粒子法では,湧き出し,吸い込みがない場合における流体の質量保存則を容易に実現できるという利点もある。格子法では厳密に質量保存を満たすようにするには相当な注意が必要であるが,粒子法においては,各粒子の質量は時間変化しない定数として扱えばよいから,質量保存則は自然に満たされるのである。加えて,粒子法での離散化と比較して相対的に簡単であるという利点もある。

3. 粒子法の具体的な計算手法

前節では粒子法の計算手法についての概略を書いたが、本節ではその具体的な方法について述べる。ここでは五月祭のシミュレーションで行った陽解法について解説する。基本とする方程式は、

$$\frac{D\boldsymbol{v}}{Dt} = -\frac{1}{\rho}\boldsymbol{\nabla}P + \nu\boldsymbol{\nabla}^2\boldsymbol{v} + \boldsymbol{g} \tag{3}$$

および

$$\frac{\partial P}{\partial \rho} = c^2 \tag{4}$$

である。ここで,c は流体中の音速,その他の文字は前節で定義したとおりである。式(3)は前節でも述べた粘性率が一定の非圧縮性流体におけるナビエ-ストークス方程式であり,式(4)は本来,圧縮性流体において連続の式 $\nabla \cdot v = 0$ と運動量保存則から導かれる式で,陽解法で粒子法を行うための式と言える。(一方,半陰解法で解くときは連続の式を変形することで得られる圧力についてのポアソン方程式を用いる。)c には実際の物性値ではなく,実際よりも小さな仮想的な値を入れる。この仮想的な音速は次のように決める。[21]によれば,安定な計算を行うためには,流速を用いたクーラン数 C_v と音速を用いたクーラン数 C_c が以下の条件を満たさなければならない。

$$C_v \coloneqq \frac{v_{\text{max}} \Delta t}{l_0} < 0.2 \tag{5}$$

$$C_c := \frac{c\Delta t}{l_0} < 1.0 \tag{6}$$

ここで、 v_{\max} は流速の最大値、 l_0 は初期粒子間距離である。これを Δt について解くと、

$$\Delta t < \frac{0.2l_0}{v_{\text{max}}} \tag{7}$$

$$\Delta t < \frac{l_0}{c} \tag{8}$$

の2式を得る。数値安定性のためにはこれら2式を満たさなければならないが、式(8)の c として実際の物性値を代入してしまうと、式(8)の条件は式(7)の条件よりもはるかに厳しくなり、 Δt を非常に小さくしなければならないことになってしまう。そこで、 $c=5v_{\rm max}$ を満たすような仮想的な音速値を代入すれば、式(7)、(8)は同じ条件式になる。実際的には、シミュレーションの対象とする系における流速の最大値を適当に見積もり、その5倍を仮想的な音速として採用することになる。音速を仮想的に小さくするということは、流体の圧縮性を仮想的に大きくするということであるから、非圧縮条件を厳密には満たさなくなる。しかし、水深があまり高くなく、高い圧力があまり発生しないような場合には、陽解法による密度増加は小さく抑えられることが[3]で確認されている。陽解法を用いる利点としては、基本的に代入計算しかないので1回の時間ステップあたりの計算コストは全粒子数 N に対して O(N) となることが挙げられる。これは、半陰解法で解く際には、圧力についてのポアソン方程式を解く必要があるので計算コストが $O(N^{1.5})$ となることと比較すれば低コストであると言える。

さて、式(3)、(4)を離散化するにあたって、次のように着目粒子 i の周りの粒子数密度 n_i を定義する。

$$n_i \coloneqq \sum_{j \neq i} w(|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|) \tag{9}$$

式中の $w(|r_j-r_i|)$ は重み関数であり,今回のシミュレーションでは以下の形を採用した。

$$w(r) = \begin{cases} \left(\frac{r_{\rm e}}{r}\right) - 1 & (r < r_{\rm e}) \\ 0 & (r \ge r_{\rm e}) \end{cases}$$
 (10)

 $r_{\rm e}$ は前節で述べた影響半径であり、初期粒子間距離の 2.1 倍に設定した。粒子法では、今定義した粒子数密度および重み関数を用いて、グラディエント、およびラプラシアンを以下の式で近似する。[1]

$$\langle \nabla \phi \rangle_i = \frac{d}{n^0} \sum_{j \neq i} \left[\frac{\phi_j - \phi_i}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|^2} (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i) w(|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|) \right]$$
(11)

$$\langle \nabla^2 \phi \rangle_i = \frac{2d}{\lambda^0 n^0} \sum_{i \neq i} (\phi_i - \phi_i) w(|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|)$$
(12)

ここで、 ϕ は任意の物理量、d は空間の次元数である。また、 n^0 は粒子が等間隔で配置されている計算の初期段階における流体内部の粒子の粒子数密度であり、これが粒子数密度の基準値となる。(ある粒子 i の粒子数密度 n_i と基準値 n^0 の大小を比較することで、流体密度の変化が

求まることになる。) そして、 λ^0 は

$$\lambda^{0} := \frac{\sum_{j \neq i i} |\mathbf{r}_{j}^{0} - \mathbf{r}_{i'}^{0}|^{2} w(|\mathbf{r}_{j}^{0} - \mathbf{r}_{i'}^{0}|)}{\sum_{j \neq i i} w(|\mathbf{r}_{i}^{0} - \mathbf{r}_{i'}^{0}|)}$$
(13)

であり、計算の初期段階における流体内部の粒子 i'の影響半径内にある近傍粒子との距離の2乗の重み平均である。

上の近似式(11), (12)を用いて式(3), (4)を離散化することになるが、具体的には以下のようなステップの繰り返しを行う。まず、式(3)を離散化する際、圧力勾配の項は一旦無視して、仮の加速度 a^* を計算する。

$$\boldsymbol{a}^* = \nu \langle \nabla^2 \boldsymbol{v} \rangle^k + \boldsymbol{g} \tag{14}$$

上添字 k は時刻のステップを表している。これを用いて,仮の速度 u^* および仮の位置 r^* を求める。

$$\boldsymbol{u}^* = \boldsymbol{u}^k + \Delta t \boldsymbol{a}^* \tag{15}$$

$$\mathbf{r}^* = \mathbf{r}^k + \Delta t \mathbf{u}^* \tag{16}$$

次に, 仮の位置 r^* での粒子数密度 n^* を用いて式(4)を離散化して, 仮の圧力 P^* を計算する。

$$P^* = c^2 \rho \frac{n^* - n^0}{n^0} \tag{17}$$

この仮の圧力を用いれば、加速度の補正 a' は

$$\mathbf{a}' = -\frac{1}{\rho} \langle \nabla P \rangle^* \tag{18}$$

と表せ、これを用いて時刻 k+1 の真の速度、位置、圧力が以下のように求められる。

$$\boldsymbol{u}^{k+1} = \boldsymbol{u}^* + \Delta t \boldsymbol{a}' \tag{19}$$

$$\mathbf{r}^{k+1} = \mathbf{r}^* + (\Delta t)^2 \mathbf{a}' \tag{20}$$

$$P^{k+1} = c^2 \rho \frac{n^{k+1} - n^0}{n^0} \tag{21}$$

この計算を全粒子について行うことで次の時刻での流体の状態が分かることになる。これを1ス テップとして、求めたい時刻までこのステップを繰り返すことになる。

今回のシミュレーションでは、上記の説明で述べたことに加えて表面張力の効果も取り入れた。 本シミュレーションで用いたのはポテンシャルモデルと呼ばれるもので、[4]に基づいている。 まず、全粒子間に以下のポテンシャルが粒子間距離に応じて働くものとする。

$$P(r) = \begin{cases} C \cdot \frac{1}{3} \left(r - \frac{3}{2} r_{\min} + \frac{1}{2} r_{e} \right) (r - r_{e})^{2} & (r \le r_{e}) \\ 0 & (r > r_{e}) \end{cases}$$
 (22)

ここで、 r_{\min} は初期粒子間距離、 $C(\leq 0)$ はポテンシャルの表面張力の強さを表す係数である。このポテンシャルは r_{\min} より近距離では斥力、遠距離では引力として働くようになっている。

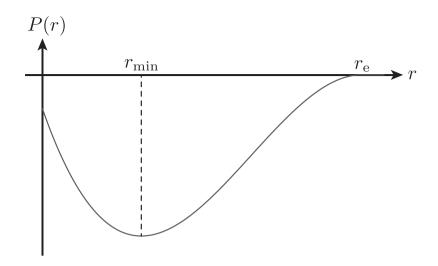


図1 本シミュレーションで採用したポテンシャルの形状

係数 C は物理的に決定することができる。初期配置での流体を図 2 の点線の位置で分割することを考えると、新たに生成される表面による表面張力エネルギーは分割された流体間のポテンシャルエネルギーの総和に等しい。特に、図 2 の A に着目すれば、表面積 r_{\min}^2 2 個分の表面張力エネルギーとポテンシャルエネルギーに関して以下の式が成り立つので、この式から C が決定できる。

$$2\sigma r_{\min}^2 = -\sum_{i \in A} P(r_{ij})$$
(23)

ここで、 σ は表面張力係数、 r_{ij} は粒子 i と j の間の距離である。このようにして求めた粒子間ポテンシャルによる力は P(r) のグラディエントであるから、

$$\frac{1}{m} \sum_{j \neq i} C(r_{ij} - r_{\min}) (r_{ij} - r_{\mathrm{e}}) \frac{\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j}{r_{ij}}$$
(24)

の加速度が各粒子に働く。ここで,m は 1 粒子の質量であり,和は着目粒子の近傍 r_e 内の他粒子すべてにわたって取る。今回のシミュレーションでは,仮の加速度 a^* を求める際にこの項を追加して計算した。

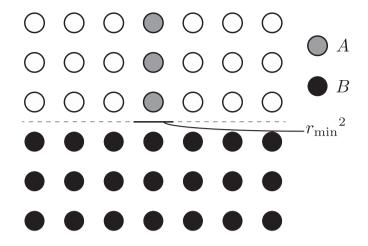


図2 ポテンシャルモデルの係数 C の決定方法

以上が今回のシミュレーションにおける時間発展の方法である。あとは入力となる粒子配置, 速度,圧力などの初期条件を考えたい問題に応じて決定すればよい。

4. シミュレーション内容

今回はミルククラウン現象をシミュレーションのテーマとして扱うことにした。ミルククラウン現象とは、平たい容器に液体を薄く張り、その上から同じ液体のしずくを 1 滴落とすと、王冠上の形を形成することがある、という現象である。本シミュレーションでは、この現象を以下のようにモデル化して扱った。

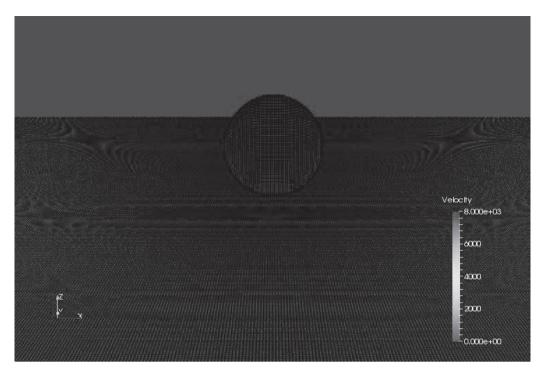
- 1辺の長さが 9 cm の正方形状の容器の上に、流体を厚さ 1 mm 程度で配置する。
- 直径 1 cm 程度の球状の流体に初速を持たせて、容器の上 1 mm から落下させる。

容器に張る液体の厚さ、しずくの大きさ、および水滴の初速度は入力パラメタとして調整を行った。また、今回のシミュレーションでは、動粘性係数、表面張力係数などは水の物性値[3]を用いた。

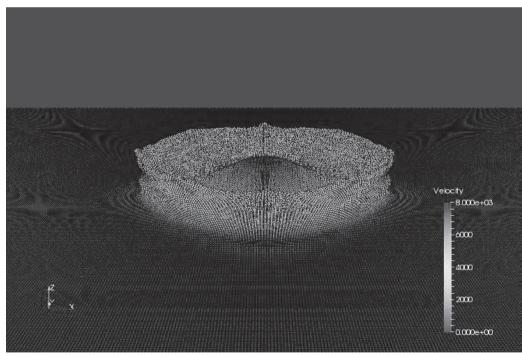
5. 計算結果

パラメタを様々に変化させた時の出力結果を以下に示す。可視化には ParaView を用いた。

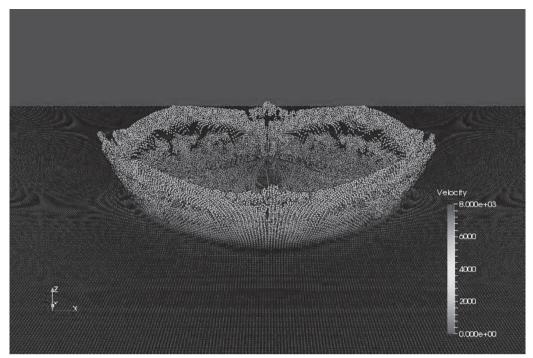
● 厚さ 1 mm, しずくの直径 10 mm, しずくの初速度 8000 mm/s (約 3 m 自由落下した時の速さ), 粒子数 282423



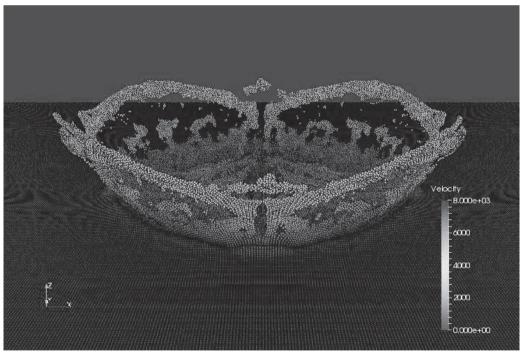
 \boxtimes 3 t = 0 s



 $\boxtimes 4 \ t = 2 \times 10^{-3} \ s$

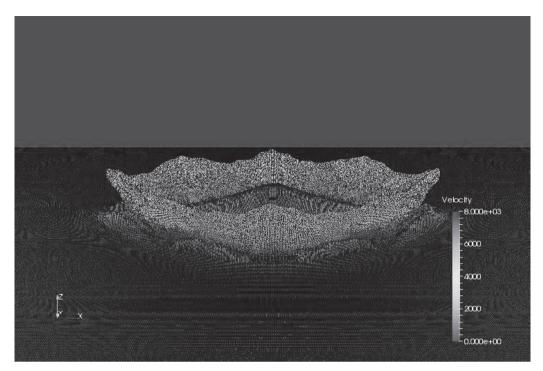


 $\boxtimes 5 \ t = 3 \times 10^{-3} \ s$

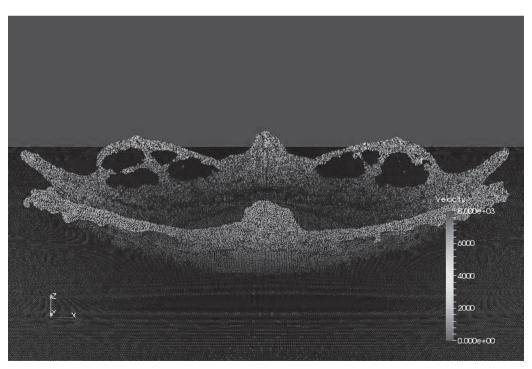


 \boxtimes 6 $t = 4 \times 10^{-3}$ s

● 厚さ 1 mm, しずくの直径 10 mm, しずくの初速度 7000 mm/s (約 2.5 m 自由落下した 時の速さ), 粒子数 11946816



 $\boxtimes 7 \ t = 2 \times 10^{-3} \ s$



 $\boxtimes 8 \ t = 4 \times 10^{-3} \ s$

- 厚さ 1 mm, しずくの直径 10 mm, しずくの初速度 2000 mm/s (約 20 cm 自由落下した 時の速さ)に設定すると、王冠上の構造はほとんど見られず、水面が少しくぼむ程度で あった。
- 厚さを cm のオーダーにすると,しずくの直径 10 mm,しずくの初速度 5000 mm/s 程度では王冠上の構造はほとんど見られず、水面が少しくぼむ程度であった。

6. 考察

王冠上の構造が見られるようなパラメタの設定は随分シビアであった。容器に張る液体の厚さとしずくの初速度に関して様々なパターンを試したが、容器の液体はなるべく薄く張り、また、しずくは 2 - 3 m の高さから落とすのがミルククラウン現象を観測するのにちょうどよい条件のようであった。容器の液体を mm のオーダーよりも大きくしてしまうと、しずくが液面に衝突する際の衝撃が吸収、拡散されてしまい、うまく王冠上の構造にならないことが分かった。

今回のシミュレーションでは、流体の物性値は水に設定したが、次回は粘性などのパラメタを 変化させた時の振る舞いの変化を確認したい。

7. まとめ

理学部物理学科が開催している五月祭の展示を通して、スーパーコンピュータを用いた大規模 並列計算シミュレーションを行った。五月祭の来場者は2700人程度であり、計算機物理の威力 を伝えられたのではないかと思う。

今回行った解析は、粒子法を用いたミルククラウン形成に関してであり、その特徴的なふるまいの傾向をつかむことはできた。今回のシミュレーションには、パラメータとして水の物性値を用いたが、今後は様々な物質に関して計算を実行し、その振る舞いを観察したい。

参考文献

- [1] 越塚誠一, 柴田和也, 室谷浩平, 粒子法入門 流体シミュレーションの基礎から並列計算と可視化まで(2014), 丸善出版
- [2] 大地雅俊, 越塚誠一, 酒井幹夫, "自由表面流れ解析のための MPS 陽的アルゴリズムの開発", 日本計算工学会論文集, Paper No. 20100013 (2010)
- [3] 大地雅俊,山田祥徳,越塚誠一,酒井幹夫,"MPS 陽解法における圧力計算の検証",日本計算工学会論文集,Paper No. 20110002 (2011)
- [4] 近藤雅裕, 越塚誠一, 滝本正人, "MPS 法における粒子間ポテンシャル力を用いた表面張力モデル", 日本計算工学会論文集, Paper No. 20070021(2007)
- [5] 国立天文台編,「理科年表(平成28年版)」, 丸善出版