

MPS法における粒子配置と体積保存性の関係

Relation between particle arrangement and volume conservation in MPS method

皆川俊平¹⁾, 越塚誠一²⁾, 小山毅³⁾

Shumpei Minagawa, Seiichi Koshizuka and Tsuyoshi Koyama

- 1) 鹿島建設 建築設計本部 (〒107-8502 東京都港区赤坂6-5-30, E-mail: minagaws@kajima.com)
 2) 東京大学大学院 工学系研究科 (〒113-8656 東京都文京区本郷7-3-1, E-mail: koshizuka@sys.t.u-tokyo.ac.jp)
 3) 東京大学大学院 工学系研究科 (〒113-8656 東京都文京区本郷7-3-1, E-mail: koyama@arch1.t.u-tokyo.ac.jp)

In MPS method, incompressibility of fluid is taken into account by solving the pressure Poisson equation under the condition that particle number density is constant. However, in actual analyses, it is often observed that the initial arrangement of particles in a square lattice structure changes to a close-packed structure after gravity is applied, resulting in a slight decrease in apparent volume. The cause of such volume change is discussed based on the relation between particle arrangement and particle number density.

Key Words : Particle Method, MPS, Particle Arrangement, Volume Conservation, Number Density

1. 序論

MPS (Moving Particle Semi-implicit) 法^[1]で流体の解析をしたことがある方ならば、誰しもが「水槽内に初期配置した粒子に重力を作用させると、しばらくして流体が静止した時には初期よりも見かけの体積がわずかに減っている(水位が減少している)」と感じた経験があるのではないだろうか。それと同時に、初期には正方格子状に配置した粒子が最密充填構造に近づいていることにも気づかれただろう。このような変化が起こるのはどうしてだろうか。剛体球の最密充填問題と同様の理屈と解釈している方も少なからずいると思われるが、粒子数密度が不変である条件を課すMPS法において剛体球のように粒子の凝縮が起こるのは不合理である。

本検討では正方格子状に初期配置した粒子が初期と同じ粒子数密度を保つような最密構造状の配置に変化した場合、見かけの体積は保存されるかという問題について、2次元問題および3次元問題を対象とし、解析の実例を交えて考察する。

2. MPS法の概要

本検討で用いるのは半陰解法による標準的なMPS法^[2]である。以下にその概要を示す。

半陰解法では、タイムステップ k から $k+1$ までの1ステップの間を以下の式のように2段階に分けて解く。

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_i^* &= \mathbf{u}_i^k + \nu(\nabla^2 \mathbf{u})_i^k \Delta t + \mathbf{g} \Delta t \\ \mathbf{r}_i^* &= \mathbf{r}_i^k + \mathbf{u}_i^* \Delta t \end{aligned} \quad (1)$$

$$\langle \nabla^2 P \rangle_i^{k+1} = -\frac{\gamma \rho^0}{(\Delta t)^2} \frac{n_i^* - n^0}{n^0} \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_i^{k+1} &= \mathbf{u}_i^* + \frac{1}{\rho^0} \langle \nabla P \rangle_i^{k+1} \Delta t \\ \mathbf{r}_i^{k+1} &= \mathbf{r}_i^* + (\mathbf{u}_i^{k+1} - \mathbf{u}_i^*) \Delta t \end{aligned} \quad (3)$$

ここで右上の添え字は時刻、右下の添え字は粒子番号を表し、 \mathbf{u} は流速ベクトル、 \mathbf{r} は位置ベクトル、 ν は動粘性係数、 \mathbf{g} は重力加速度ベクトル、 γ は緩和係数、 ρ は流体の密度、 n は粒子数密度、 P は圧力、 Δt は時間増分である。まずナビエーストークス方程式の粘性項と外力項のみを考慮した仮速度 \mathbf{u}^* を用いて粒子を仮の位置に更新する(式(1))。仮の位置では各粒子の粒子数密度 n_i^* は初期値 n^0 とは一致せず、非圧縮条件を満足しないのが一般的である。そこで、時刻 $k+1$ では粒子数密度が初期値と一致するという条件を課して圧力のポアソン方程式を陰解法で解く(式(2))。こうして求めた圧力を用いて最後に圧力勾配項を計算し、時刻 $k+1$ における速度および位置を求める(式(3))。粒子数密度一定条件を満足するためには式(2)の緩和係数 γ は1である必要があるが、計算の安定化を目的として実用上は0.2程度の値を採用することが多い。 ∇ は勾配、 ∇^2 はラプラシアンであり、 $\langle \rangle$ はそれらを(4)および式(5)の粒子間相互作用モデルを用いて計算することを表す。

$$\langle \nabla \phi \rangle_i = \frac{d}{n^0} \sum_{j \neq i} \left\{ \frac{\phi_j - \phi_i}{r_{ij}^2} (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i) w(r_{ij}) \right\} \quad (4)$$

$$\langle \nabla^2 \phi \rangle_i = \frac{2d}{\lambda^0 n^0} \sum_{j \neq i} \{ (\phi_j - \phi_i) w(r_{ij}) \} \quad (5)$$

ここで d は次元数、 r_{ij} は粒子 i と粒子 j の距離、 w は重み関数、 ϕ は勾配またはラプラシアンを計算する物理量である。重み関数 w 、粒子数密度 n およびラプラシアンモデルの定数 λ^0 の定義は以下の通りである。ここで r_e は影響半径である。

$$w(r) = \begin{cases} \frac{r_e}{r} - 1 & (r < r_e) \\ 0 & (r \geq r_e) \end{cases} \quad (6)$$

$$n_i = \sum_{j \neq i} w(r_{ij}) \tag{7}$$

$$\lambda^0 = \frac{\sum_{j \neq i} r_{ij}^2 w(r_{ij})}{\sum_{j \neq i} w(r_{ij})} \tag{8}$$

3. 2次元問題における面積保存性の検討

(1) 正三角形配置に関する理論的考察

2次元静水圧問題の解析では一般に最終的な粒子配置が正三角形状となることを念頭に置き、粒子数密度一定条件を満足する正三角形状配置について理論的に検討した。図- 1に正方形格子状と粒子数密度が同一となるように逆算した正三角形状配置の例を示す。粒子は初期粒子間距離を直径に持つ円で図示してある。それぞれの配置で1粒子が占める面積（以降、占有面積と呼ぶ）は図中の正方形の面積 A_s および正六角形の面積 A_t によって定義できる。図- 2は粒子数密度が同一の正方格子状配置と正三角形状配置の占有面積の比 A_t/A_s の理論値を、影響半径を横軸に取って示したものである。この比が1よりも大きければ正三角形状配置の方が膨張したように見え、1よりも小さければ収縮したように見えることを意味している。

図- 2は粒子数密度一定条件を満足する場合における極めて重要な3つの性質を示している。1つ目は、粒子配置が正方形格子状から正三角形状に変わった場合には見かけの面積が保存される保証はなく、膨張する場合もあるれば収縮する場合もあるという点である。膨張するというのは経験に反するので、違和感を覚える方も多いのではないだろうか。2つ目は、見かけの面積の変化は影響半径に依存するという点である。これは式(6),(7)から分かるように、粒子数密度は影響半径の非線形な関数であるが故に生じる現象である。3つ目は、影響半径が小さい場合には面積変化は大きい、影響半径を大きく取れば面積比は1に漸近するという点である。実用では初期粒子間距離の2~3倍程度の影響半径を用いることが多いので、図- 2によればそのような範囲では最大で約±2%の面積変化が生じる可能性がある。

なおこの結果は重み関数にも依存するため、式(6)とは異なる重み関数を採用した場合には傾向が異なる可能性には留意されたい。

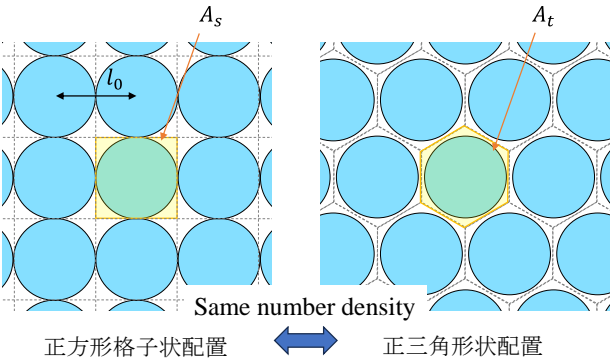


図- 1 占有面積の定義

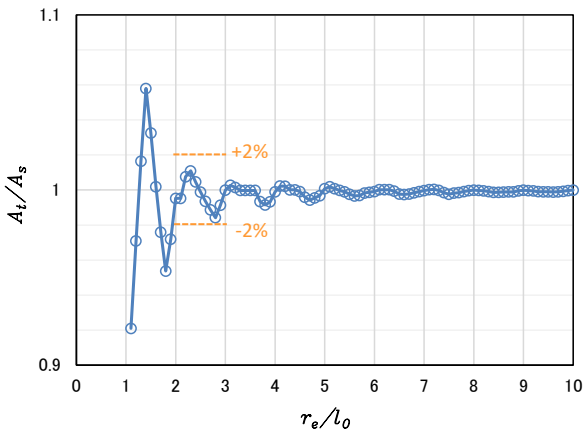


図- 2 占有面積の比

(2) 静水圧問題での検証

それでは、図- 2で面積比が1より大きくなるような影響半径を用いて静水圧問題を解析した場合、本当に流体は膨張して見えるのだろうか。検証のために、影響半径をパラメータとして水槽内の水を模擬した2次元静水圧問題（図- 3）の解析を行った。解析には商用のMPS法ソフトウェア（Particleworks 8.1.0）を用いた。初期粒子配置は50個×50個の正方形格子状とし、-Y方向に重力加速度を与えた。解析条件を表- 1に示す。

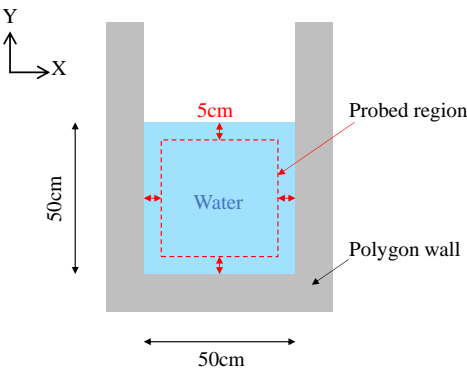


図- 3 静水圧問題の解析概要

表- 1 静水圧問題の緒元

初期粒子間距離 l_0 (cm)	1.0
密度 ρ (kg/m ³)	1000
動粘性係数 ν (m ² /s)	1.0×10^{-6}
重力加速度 g (m/s ²)	-9.8 (Y方向)
緩和係数 γ	0.2
解析時間 (s)	5.0
時間刻み Δt (s)	5.0×10^{-4}
影響半径比 r_e/l_0	1.9から3.5まで0.2刻み

以降に、影響半径比 r_e/l_0 を2.3, 2.7, 3.1とした3ケースの結果を代表として示す。図- 4は5.0秒時点における水槽中心付近の粒子配置のスナップショットである。いずれのケースでも配置は初期の正方形格子状から変化し、正三

角形状の配置に近づいていることが分かる。図- 5～図- 7は、壁や自由表面による不均一の影響を除くために壁および底面から5cm離れた40cm×40cmの領域内に存在する粒子の平均値である。図- 5に示す1粒子あたりの平均占有面積は、集計領域面積（1600cm²）を領域内に存在する粒子数で除して求めた値である。この図から平均占有面積が時間とともに変化する様子が見て取れる。最終的な平均占有面積は、影響半径比が2.3および3.1の2ケースでは約-0.5%、2.7のケースでは約-3.0%となっており、影響半径によって大きくばらついた。いずれのケースでも、平均粒子数密度（図- 6）は解析開始から約0.1秒後に自由落下の影響で初期よりも大きな値となるものの、その後は概ね初期と同じ値を保っていることや、平均粒子速度（図- 7）が約0.2秒のピーク以降は単調減少し静止状態に漸近していることから、結果の妥当性が確認できる。

平均粒子速度が約0.01m/s以下となる3～5秒の範囲で平均した1粒子あたりの占有面積の解析値を理論値と比較したものが図- 8である。山谷の形状は相似しており、影響半径による占有面積の増減は理論と解析で同様の傾向をした一方で、解析値は総じて理論値よりも小さく、初期よりも占有面積が増加するケースはなかった。この結果から、影響半径に依存して見かけの面積が増減するという前述の理論は正しいが、何らかの理由で理論値よりも面積が減少していると考えられそうである。そして結局のところ、解析すると見かけの面積が減少するという経験論は間違いではなかったようである。

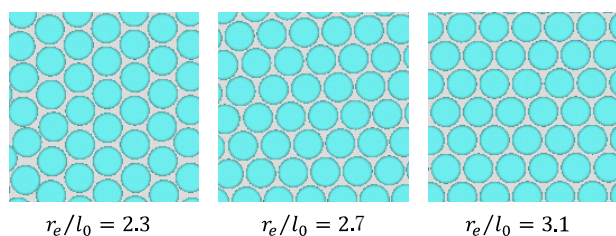


図- 4 粒子配置のスナップショット
(5.0秒時点, 水槽中心の約6cm×6cmの範囲)

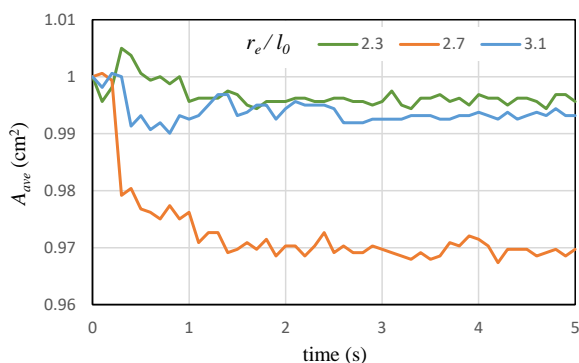


図- 5 1粒子あたりの平均占有面積

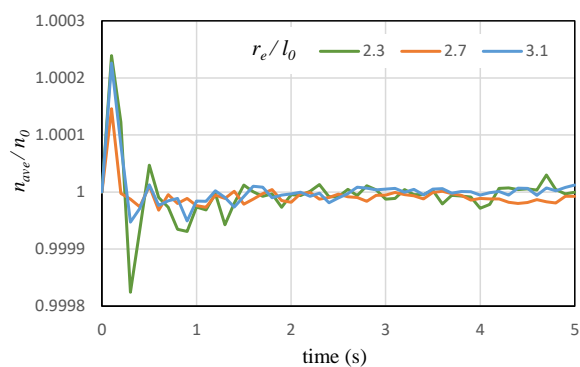


図- 6 平均粒子数密度と初期粒子数密度の比

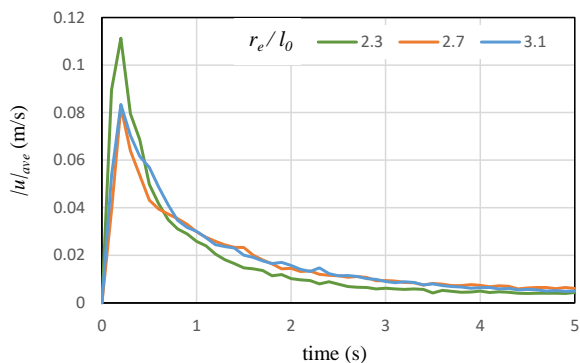


図- 7 平均粒子速度

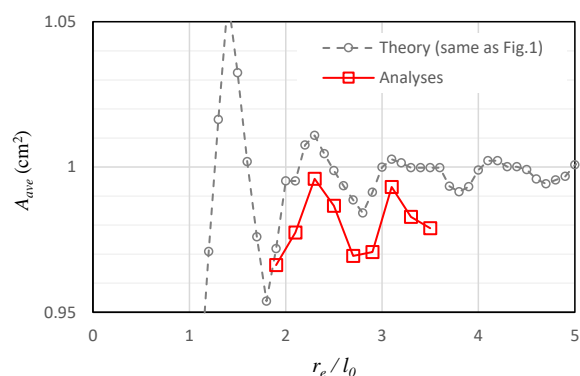


図- 8 占有面積の理論値との比較

(3) 面積が減少する要因の考察

前節で生じた見かけの面積減少の要因についての考察を以下に述べる。

まず考えられる要因の一つは、圧力のポアソン方程式（式(2)）の右辺の緩和係数 γ である。今回は計算の安定化を目的とし0.2を採用したが、これは粒子数密度の変化 $n_i^* - n^0$ を実際よりも0.2倍して小さく見積もることを意味しており、圧縮や膨張に対する感度を低下させていると解釈できるためである。そこで影響半径比を2.3に固定したまま、 γ を0.1, 0.2, 0.3としてパラメータスタディを行った。なお γ の上限を0.3としたのは、0.4以上では途中で粒子が爆発してしまったためである。解析の結果を図- 9～図- 11に示す。 $\gamma = 0.3$ のケースでは5秒経過後も流速が0に漸近せず、占有面積および粒子数密度の集計値も

振動が大きいいため有意な分析は困難であるが、 $\gamma = 0.1$ としたケースでは、 $\gamma = 0.2$ のケースよりもさらに大きな平均占有面積の減少と、平均粒子数密度の増加が確認できた。これは γ を小さくしたことで、圧縮に対してさらに鈍感になった結果であると解釈できる。すなわち、緩和係数を小さくするほど見かけの圧縮性も増加する傾向を示しており、1未満の緩和係数を採用することが面積減少の要因の一つであると考えられる。

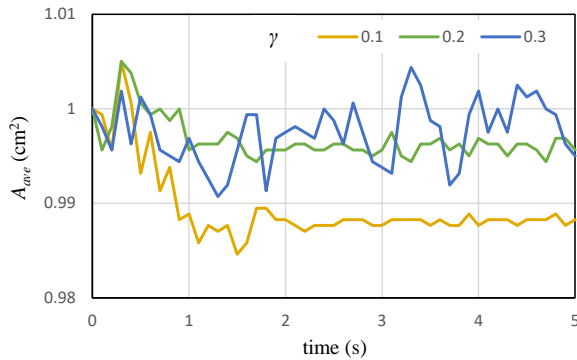


図- 9 占有面積の平均値

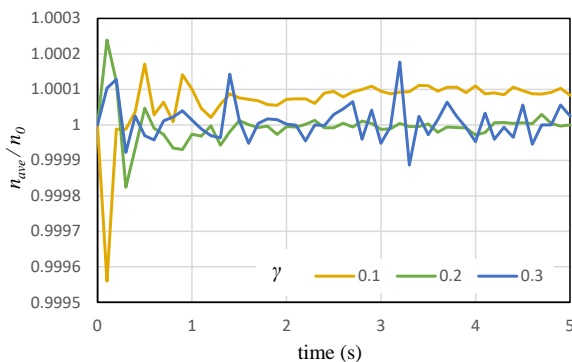


図- 10 初期との粒子数密度比の平均値

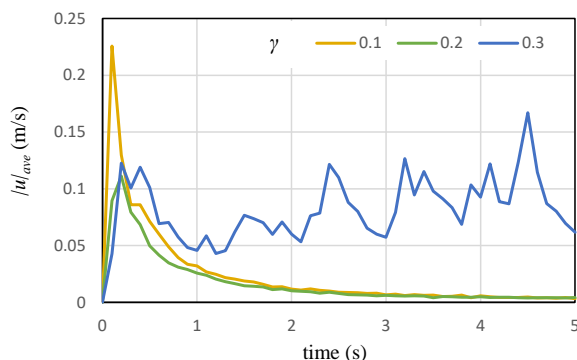


図- 11 粒子速度の平均値

また解析後の粒子配置は正三角形に近いものの、厳密には一致していないことも要因として考えられる。例として図- 12に示すような正三角形配置を横方向に α 倍、縦方向に β 倍に伸縮してできる二等辺三角形配置を考えてみた。粒子数密度が元の正三角形配置と等しくな

るように α と β を決めた場合の1粒子あたりの占有面積比の理論値を示したのが図- 13である。この場合も占有面積は保存されず、その変化量は影響半径および縦横比に依存するが、 $\alpha \cong 1$ なる微小な伸縮に対しては占有面積が減少する傾向が強いことが分かる。実際の解析における粒子配置は二等辺三角形とは限らないものの、このように正三角形配置からわずかに歪んだり乱れたりしたことで、正三角形配置を仮定した場合よりも見かけの面積が減少した可能性が考えられる。

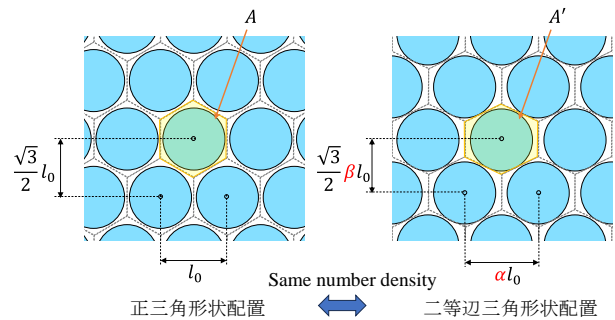


図- 12 二等辺三角形配置の定義

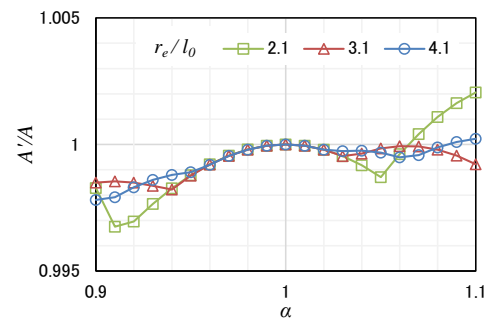


図- 13 二等辺三角形の占有面積比

4. 3次元問題における体積保存性の検討

(1) 最密充填配置に関する理論的考察

3次元でも2次元と同様の考察を行った。3次元空間における剛体球の最密充填構造は図- 14に示す立方最密充填構造 (cubic close-packing, 以降CCPと呼ぶ) および六方最密充填構造 (hexagonal close-packing, 以降HCPと呼ぶ) であることが知られている。図- 15は立方格子状配置と粒子数密度が同一となるようなCCPおよびHCPを逆算し、立方格子状配置との1粒子あたりの占有体積の比の理論値を、影響半径を横軸に取って示したものである。2次元の結果 (図- 2) と比較すると、影響半径に依存して占有体積が増減する点や影響半径が大きくなると体積比が1に漸近する点は同様であり、体積増減のピークとなる影響半径も概ね一致した。一方で体積変化の大きさは3次元の方が大きく、水位の変化は3次元問題での方が大きく見える可能性を示唆している。CCPとHCPを比較すると、両者の理論値に大きな差は見られなかった。

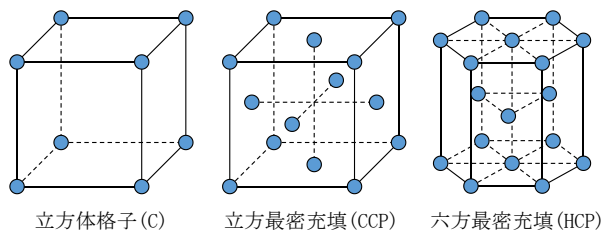


図- 14 検討した3次元粒子配置

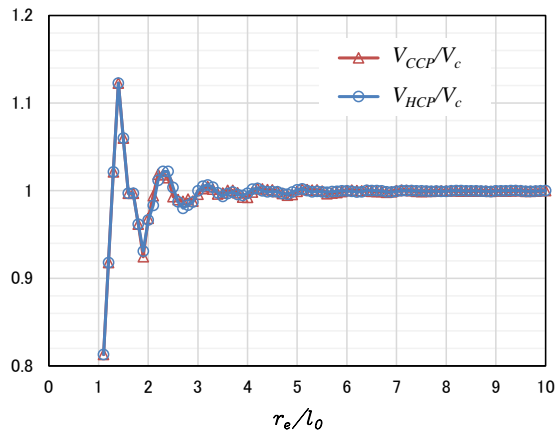


図- 15 占有体積の比

(2) 静水圧問題での検証

2次元と同様に、3次元でも影響半径をパラメータとして水槽内の水を模擬した静水圧問題の解析を行った。対象は図- 3の2次元水槽の紙面直交方向に50cmの奥行を考慮したものとし、初期粒子配置は50個×50個×50個の立方格子状とした。解析条件は表- 1と同様であるが、途中で粒子が爆発してしまったため影響半径比が1.9および2.1のケースは除外した。

図- 16に水槽断面における粒子配置のスナップショットの例を示す。最前面の粒子が正三角形格子状に配置し、奥にその隙間を充填するような正三角格子状配置の平面が見えており、最密充填に近い構造となっていることが分かる。また、3～5秒の範囲で平均した1粒子あたりの占有面積を図- 17に示す。理論値と解析値の増減の傾向は相似しているものの解析値は総じて理論値よりも小さく、2次元の場合と同様の特徴を示した。2次元の場合と同様に緩和係数や粒子配置の乱れが、占有体積が理論値よりも小さくなった要因であると考えられる。

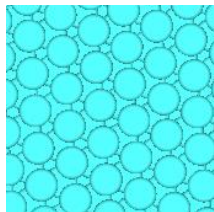
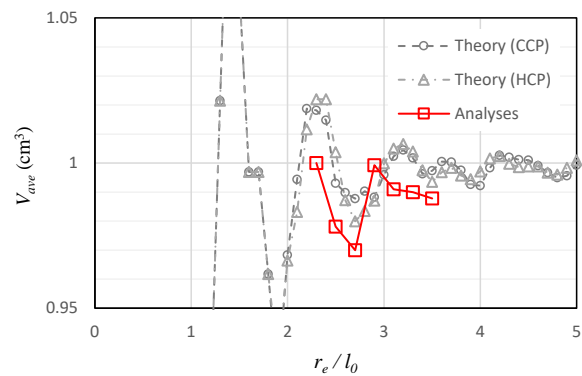
図- 16 粒子配置のスナップショット
(影響半径比2.7, 5.0秒時点)

図- 17 占有体積の理論値との比較

5. 結論

2次元および3次元を対象として粒子配置と粒子数密度の関係性を論じ、MPS法において流体の見かけの体積が保存されない現象について考察した。その結果、正方格子状に初期配置した粒子が粒子数密度を保ったまま最密充填構造状に変化した場合には、理論上見かけの体積は保存されず影響半径に依存して増減することを明らかにした。しかしながら実際に解析を行うと見かけの体積は理論値よりも小さくなる傾向があり、この原因は圧力のポアソン方程式を解く際に導入する緩和係数や粒子配置の乱れである可能性を指摘した。

なお本検討では自由表面や壁による不均一の影響を除いて分析を行ったが、自由表面付近に圧力0の表面粒子が凝集したり、壁モデルが適切でない場合には壁と流体粒子の距離が正しく保たれなかったりして、見かけの体積に影響を及ぼすことがある。また、初期のパッキングが不十分で不要な隙間があることが原因で意図した水位に達しないこともあるため、実用上はそういった点にも注意を払う必要がある。

参考文献

- [1] Koshizuka and Oka: Moving particle semi-implicit method for fragmentation of incompressible fluid, *Nucl. Sci. Eng.*, Vol.123, pp.421-434, 1996
- [2] 越塚誠一、柴田和也、室谷浩平: 粒子法入門、丸善出版、2014.