

# 粒子法とその高精度化への試みについて

鈴木幸人（みずほ情報総研），越塚誠一（東大工）

## Particle methods and improvements on them

Y. Suzuki\* and S. Koshizuka\*\*

\* Mizuho Information and Research Institute Inc.,

\*\* Dept. of Quantum Eng. Systems Science, University of Tokyo

### ABSTRACT

Particle methods are meshless simulation techniques in which motion of continua is approximated by discrete dynamics of a finite number of particles. Therefore they have a great degree of flexibility in dealing with the complex motion of surfaces or boundaries. In this study, novel particle methods are developed as discrete Hamiltonian systems which approximate the infinite dimensional Hamiltonian systems for incompressible fluid flows and nonlinear elastodynamics. Some numerical tests indicate the excellence of these methods in conservation of mechanical energy as well as linear and angular momenta.

Key Words: particle method, Hamiltonian, symplectic, nonlinear wave, nonlinear elastodynamics

### 1. 序論

粒子法<sup>1)</sup>は、連続体の運動を離散粒子群の運動として近似する数値計算手法であり、これにより飛沫を伴う砕波、固体の破碎など非常に複雑な現象が解析できるようになると期待されている。現在までに、SPH(Smoothed Particle Hydrodynamics)<sup>2),3)</sup>、MPS(Moving Particle Semi-implicit)<sup>4),5)</sup>法等の手法が提案されており、有限体積法、有限要素法など格子を用いる手法では難しかった非常に複雑な現象に対しても適用が試みられている<sup>6),7)</sup>。

一方、粒子法は有限体積法、有限要素法などと比べると新しい計算手法であり、計算精度の点などで未だ検討すべき課題が残されている。本研究では、粒子法の高精度化を目指す一つの試みとして、Hamiltonianに基づく粒子法を開発した。これは、連続体の運動を支配する無限自由度のLagrangianを直接離散化して有限自由度のLagrangianを得て、それをLegendre変換することによって粒子群の運動を記述するHamiltonianを導出するもので、その数値時間積分法にHamilton系の構造を離散化後も保存することが保障されるsymplecticスキームを採用することにより、力学的エネルギー等の保存量を精度良く保存する計算手法を構築した<sup>7),8)</sup>。

以下、本論文では2章でHamiltonianに基づく粒子法を簡単に解説し、3章に計算例を示す。最後に4章で結論を述べる。

### 2. Hamiltonianに基づく粒子法

#### (1)連続体のLagrangian力学

非圧縮非粘性流れのLagrangianは次のように表され

る。

$$\mathcal{L}[\mathbf{q}_t, \dot{\mathbf{q}}_t, t] := \int_{\Omega_0} \left\{ \frac{\rho_0(\mathbf{a})}{2} |\dot{\mathbf{q}}_t(\mathbf{a})|^2 - \lambda_t(\mathbf{a}) [1 - J_t(\mathbf{a})] \right\} d\mathbf{a}$$

ここで $\mathbf{a}$ は流体粒子のラベルとなるLagrange座標で、その定義域は流体の初期配置 $\Omega_0$ をとるものとする。

$\mathbf{r} = \mathbf{q}(\mathbf{a}, t) = \mathbf{q}_t(\mathbf{a})$ はLagrange座標 $\mathbf{a}$ に対応する流体粒子が時刻 $t$ でとる空間配置(Euler座標)であり、微分同相写像 $\mathbf{q}_t: \mathbf{a} \mapsto \mathbf{q}(\mathbf{a}, t)$ を各時刻 $t$ で指定することにより流体の運動が完全に記述される。 $\dot{\mathbf{q}}_t(\mathbf{a}) := \partial \mathbf{q}(\mathbf{a}, t) / \partial t$ はLagrange座標 $\mathbf{a}$ に対応する流体粒子の速度である。 $\rho_0$ はLagrange座標上の密度であり、したがって上記Lagrangianの第1項は運動エネルギー分布を表している。 $J := \det(\partial \mathbf{q}_t / \partial \mathbf{a})$ は時刻 $t$ における流体変形 $\mathbf{q}_t(\mathbf{a})$ のJacobianであり、流体の(初期配置からの)体積変化を表している。 $\lambda$ は非圧縮条件 $J=1$ に対するLagrangeの未定乗数であり、非圧縮流れの圧力に対応する。

一方、Euler座標上の密度場はLagrange座標上の密度場 $\rho_0$ により

$$\rho(\mathbf{r}, t) := \int_{\Omega_0} \rho_0(\mathbf{a}) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{q}(\mathbf{a}, t)) d\mathbf{a}$$

と定義される。ここで $\delta$ はDiracの $\delta$ 関数であり、この定義式は質量保存則 $\rho_0(\mathbf{a}) d\mathbf{a} = \rho(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r}$ と同値である<sup>9)</sup>。

これを用いると、非圧縮流れのLagrangianは

$$\mathcal{L}[\mathbf{q}_t, \dot{\mathbf{q}}_t, t] = \int_{\Omega_0} \left\{ \frac{\rho_0(\mathbf{a})}{2} |\dot{\mathbf{q}}_t(\mathbf{a})|^2 - \lambda_t(\mathbf{a}) \left[ 1 - \frac{\rho_0(\mathbf{a})}{\rho(\mathbf{q}_t(\mathbf{a}), t)} \right] \right\} d\mathbf{a}$$

と表される。この Lagrangian に対する最小作用の原理から、Euler 方程式

$$\ddot{\mathbf{q}} = -\nabla \lambda / \rho$$

が導出される<sup>7)</sup>。

なお、弾性体についても、同様にして Lagrangian よりその運動を記述することができる<sup>8)</sup>。

### (2) 粒子法の Lagrange 力学的定式化

Lagrange 座標上の流体領域  $\Omega_0$  を  $\Delta \mathbf{a}_1, \dots, \Delta \mathbf{a}_N$  の  $N$  個の微小領域に分割して、それぞれの微小領域上で

$$\mathbf{q}_i(\mathbf{a}) \approx \mathbf{q}_i(t), \quad \dot{\mathbf{q}}_i(\mathbf{a}) \approx \dot{\mathbf{q}}_i(t), \quad \lambda_i(\mathbf{a}) \approx \lambda_i(t),$$

$$\rho_0(\mathbf{a}) \approx \rho_{0i}, \quad J_i(\mathbf{a}) \approx J_i(t)$$

と各変数を定数関数で近似する。さらに  $\delta$  関数を近似する滑らかな関数  $f_\delta$  を導入して、Euler 座標上の密度を

$$\rho(\mathbf{r}, t) \approx \sum_{j=1}^N \rho_{0j} f_\delta(|\mathbf{r} - \mathbf{q}_j(t)|) |\Delta \mathbf{a}_j|$$

と離散近似すると、先述の非圧縮流れの Lagrangian は  $L(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_N, \dot{\mathbf{q}}_1, \dots, \dot{\mathbf{q}}_N, \lambda_1, \dots, \lambda_N)$

$$= \sum_{i=1}^N \left[ \frac{m_i}{2} |\dot{\mathbf{q}}_i(t)|^2 - \lambda_i(t) g_i(\mathbf{q}_1(t), \dots, \mathbf{q}_N(t)) \right]$$

ただし

$$m_i := \rho_{0i} |\Delta \mathbf{a}_i|$$

$$g_i(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_N) := |\Delta \mathbf{a}_i| \left[ 1 - \frac{m_i}{\sum_{j=1}^N f_\delta(|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j|)} \right]$$

と離散化することができる。ここで  $|\Delta \mathbf{a}_i|$  は微小領域  $\Delta \mathbf{a}_i$  の体積を表している。この離散化された Lagrangian は、 $|\Delta \mathbf{a}_i| \rightarrow 0$  の極限で  $i=1, \dots, N$  に関する和が  $\Omega_0$  上の積分に収束するといった意味で、非圧縮流れの Lagrangian を近似している。その一方で、この離散化 Lagrangian は位置  $\mathbf{q}_i(t)$ 、速度  $\dot{\mathbf{q}}_i(t)$  および質量  $m_i$  の粒子群の Lagrangian であるとみることができる。実際、この Lagrangian に Hamilton の最小作用の原理を適用すると、粒子群の運動方程式

$$m_i \ddot{\mathbf{q}}_i = \sum_{j=1}^N m_j m_j \left( \frac{\lambda_i}{\rho_i^2} + \frac{\lambda_j}{\rho_j^2} \right) f'_\delta(|\mathbf{q}_{ij}|) \frac{\mathbf{q}_{ij}}{|\mathbf{q}_{ij}|}$$

が得られる<sup>7)</sup>。ただし

$$\mathbf{q}_{ij} := \mathbf{q}_j - \mathbf{q}_i$$

$$\rho_i := \sum_{j=1}^N m_j f_\delta(|\mathbf{q}_{ij}|)$$

と定義した。なお、弾性体の場合についても同様に Lagrangian を離散化することが可能である<sup>8)</sup>。

### (3) 粒子法の Hamilton 力学的定式化

Legendre 変換：

$$\mathbf{p}_i := \partial L / \partial \dot{\mathbf{q}}_i$$

$$H := \sum_{i=1}^N \mathbf{p}_i \cdot \dot{\mathbf{q}}_i - L$$

を施すと、上記の離散化 Lagrangian は holonomic な拘

束条件

$$g_i(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_N) = 0$$

をもつ Hamiltonian

$$H(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_N, \mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N, \lambda_1, \dots, \lambda_N) = \sum_{i=1}^N \left[ \frac{|\mathbf{p}_i|^2}{2m_i} + \lambda_i g_i(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_N) \right]$$

に変換される。このとき、先述の Lagrange の運動方程式は Hamilton の正準方程式

$$\dot{\mathbf{q}}_i = \partial H / \partial \mathbf{p}_i = \mathbf{p}_i / m_i$$

$$\dot{\mathbf{p}}_i = -\partial H / \partial \mathbf{q}_i = \sum_{j=1}^N m_j m_j \left( \frac{\lambda_i}{\rho_i^2} + \frac{\lambda_j}{\rho_j^2} \right) f'_\delta(|\mathbf{q}_{ij}|) \frac{\mathbf{q}_{ij}}{|\mathbf{q}_{ij}|}$$

と同値である。この Hamilton 系の配位空間  $\mathcal{M}$  は上記の holonomic 拘束条件（これは連続体の体積一定の条件に対応する）から定まる

$$\mathcal{M} := \left\{ (\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_N) \in \mathbf{R}^{3N} \mid g_i = 0 (i=1, \dots, N) \right\}$$

であり、その配位空間  $T^*\mathcal{M}$  は速度ベクトル  $(\dot{\mathbf{q}}_1, \dots, \dot{\mathbf{q}}_N)^T$  が配位空間に接する条件（これは連続体の速度場の非発散条件に対応する）より

$$T^*\mathcal{M} := \left\{ (\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_N, \mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N) \in \mathbf{R}^{6N} \mid g_i = 0, \sum_{j=1}^N \frac{\partial g_i}{\partial \mathbf{q}_j} \cdot \frac{\mathbf{p}_j}{m_j} = 0 (i=1, \dots, N) \right\}$$

である。弾性体についても、同様の Hamiltonian 粒子法の定式化が可能である<sup>8)</sup>。

### (4) 数値時間積分法

holonomic な拘束条件をもつ Hamilton 系に対する symplectic スキームとして RATTLE 法を挙げることができる<sup>9)</sup>。これを上記の Hamilton 系に適用すると

$$\mathbf{p}_i^{n+1/2} = \mathbf{p}_i^n - \frac{\Delta t}{2} \sum_{j=1}^N \lambda_j^{n+1/2} \frac{\partial g_j}{\partial \mathbf{q}_i}(\mathbf{q}_1^n, \dots, \mathbf{q}_N^n)$$

$$\mathbf{q}_i^{n+1} = \mathbf{q}_i^n + \Delta t \frac{\mathbf{p}_i^{n+1/2}}{m_i}$$

$$g_i(\mathbf{q}_1^{n+1}, \dots, \mathbf{q}_N^{n+1}) = 0$$

$$\mathbf{p}_i^{n+1} = \mathbf{p}_i^{n+1/2} - \frac{\Delta t}{2} \sum_{j=1}^N \lambda_j^{n+1} \frac{\partial g_j}{\partial \mathbf{q}_i}(\mathbf{q}_1^{n+1}, \dots, \mathbf{q}_N^{n+1})$$

$$\sum_{j=1}^N \frac{\partial g_i}{\partial \mathbf{q}_j}(\mathbf{q}_1^{n+1}, \dots, \mathbf{q}_N^{n+1}) \cdot \frac{\mathbf{p}_j^{n+1}}{m_j} = 0$$

と表される。ここで、 $\Delta t$  は時間ステップ幅であり、上添字  $n, n+1/2$  および  $n+1$  はそれぞれ時刻  $t = t_n \equiv t_0 + n\Delta t$ ,  $t = t_{n+1/2} \equiv t_n + \Delta t/2$  および  $t = t_{n+1} \equiv t_n + \Delta t$  における値であることを示す。この RATTLE 法は次のようにして時間進行することができる。すなわち、第 1 式を第 2 式に代入し、さらにそれを第 3 式に代入すると  $\lambda_j^{n+1/2}$  を未知数とする非線型方程式が得られる。これを Newton-Raphson 法により解き  $\lambda_j^{n+1/2}$  を求める。また、これを用いて第 2、第 3 式

より運動量と位置を更新する。さらに、第4式を第5式に代入することにより  $\lambda_j^{n+1}$  に関する線型方程式が得られるが、これを解くことにより  $\lambda_j^{n+1}$  を求める。また、これを用いて第5式より運動量を更新する。

### 3. 計算例

本章では、Hamiltonian に基づく粒子法による矩形容器内定在波の計算例について示す。この例題については、初期振幅と水深との比に関する二次の項までの Stokes 摂動展開を用いて非線型波動の解析解が導かれており<sup>10)</sup>、これと数値解を比較することにより Hamiltonian に基づく粒子法の計算精度を検討した。

#### (1) 計算条件

図1に計算体系と初期条件を示す。水深  $h$  は静止状態で  $1.0\text{m}$  である。初期の波形は、 $\eta_0$  を初期の表面変位として

$$\eta_0(x) = A \cos\{k(x + \lambda/2)\}$$

とした。 $A = 0.1h$  は振幅、 $k = 2\pi/\lambda$  は波数、 $\lambda = 2\text{m}$  は波長である。ただし水平方向に  $x$  座標を、鉛直方向に  $y$  座標をとり、波長  $\lambda$  は容器の幅とした。計算領域は

$$\left\{ (x, y) \in \mathbf{R}^2 \mid -\frac{\lambda}{2} \leq x \leq \frac{\lambda}{2}, -h \leq y \leq h \right\}$$

であり、 $y = 0$  を静止時の水面位置にとった。なお、容器の壁面境界を与える代わりに  $x$  方向に周期境界を仮定した。初期の速度は一様に  $0$  である。

初期粒子は初期水面の下に正方格子上に配置した。したがって、初期水面形状は階段状に近似されることになる。正方格子の間隔は  $0.01\text{m}$  とし、そのときに必要となる粒子数は  $20099$  である。時間ステップ幅  $\Delta t$  は  $1.0 \times 10^{-3}$  秒とし、計算は  $5$  秒まで行った。

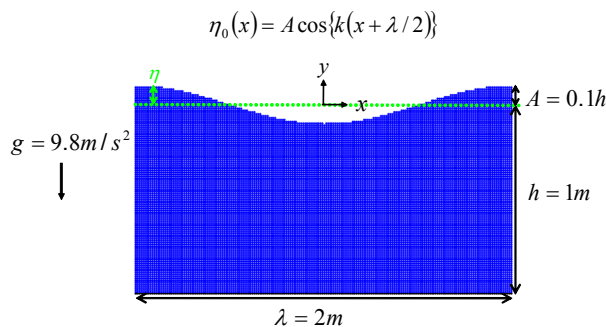


図1 計算体系と初期条件

#### (2) 計算結果

容器中央における水位の変化について、計算結果と解析解を比較したものを図2に示す。ここで、"linear theory"はStokes摂動展開の初項の線型解を意味しており、"second order theory"は二次

までの非線型解を意味している。計算結果は、少なくとも最初の3サイクル程度までは、線型解よりも非線型解に近いものとなっており、非線型効果が妥当に計算できていることを示している。実際、線型解は常に一定の振幅で水位が振動するのに対して、数値解と非線型解は1番目と3番目の極大値が2番目の極大値よりも高く、2番目の極小値が1番目と3番目の極小値よりも低くなっている。これは非線型波に特有の挙動である。

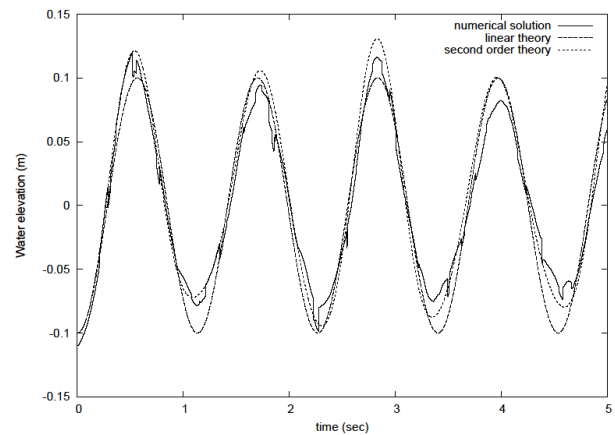


図2 容器中央における水位の変化

また、粒子配置の時間変化を図3に示す。容器中央の水位が1回目の極大値をとる  $0.6$  秒の時点では、線型波のものよりも尖った波形となっており、これが図2に見られる線型波よりも高い極大値に対応している。これに対して容器中央の水位が1回目の極小値をとる  $1.1$  秒の時点および2回目の極大値をとる  $1.7$  秒の時点では、線型波のものよりも緩やかな波形となっており、これらが図2に見られる線型波よりも高い極小値、低い極大値に対応している。また、波形がほぼ平坦になる  $0.3$  秒および  $0.9$  秒の時点では高次モードを確認することができる。これも非線型波に特有のものである。以上の傾向は、各時刻の波形を水深で規格化して示した図4においてより明確に確認することができる。

ただし、3サイクル以降の数値解の振幅は、全力的エネルギーが図5に示すように精度良く(初期値の  $0.001\%$  以内の誤差で)保存されているにもかかわらず、徐々に減衰する傾向が見られる。これは、粒子法の計算において徐々に粒子の運動がランダム化し、全体の波の運動エネルギーが小スケールのランダム運動のエネルギーに変換される傾向にあることによるものである。これはほとんど全ての粒子法に共通する問題点であり、運動のランダム化が起こらないような粒子法の開発は今後の課題である。

なお、複雑な自由表面挙動を伴う非圧縮流れに対する計算手法で力学的エネルギーを保存するものは、粒子法に限らず有限体積法、有限要素法等の

格子を用いる手法においても未だ提案されていない。力学的エネルギーが数値誤差により散逸する場合、計算は安定に行うことができるが、この定在波の解析においては波の振幅が徐々に減衰することになる。一方、非粘性波動を解析解と同程度に精度良く計算できる手法としては、ポテンシャル流れを仮定した定式化を用いるもの<sup>10,11)</sup>が挙げられる。ただし、これらの手法では、粒子法で計算されている表面のトポロジーの変化が起こるような複雑な流れは扱うことができない。

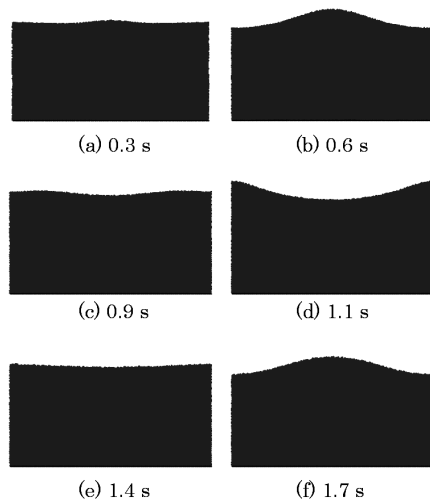


図3 粒子配置の時間変化

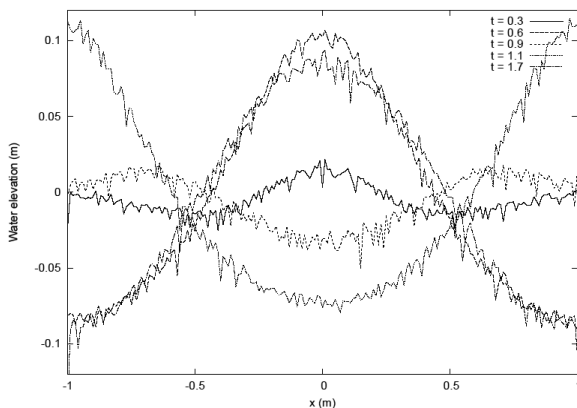


図4 波形の時間変化

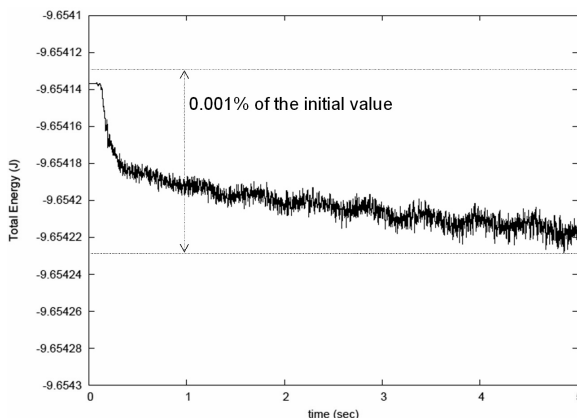


図5 全力学的エネルギー

#### 4. 結論

粒子法の高精度化へ向けての一つの試みとして、Hamiltonian に基づく粒子法の開発を行った。これは、連続体の Lagrangian を直接離散化することによって粒子法の Hamiltonian を導出するもので、数値時間積分法に symplectic スキームを採用することにより各種保存量を精度よく保存する計算手法となっている。実際、矩形容器内定在波の計算例で示したように、そのエネルギー保存性は非常に良いものである。さらに、少なくとも3サイクル程度までは非線型波動を精度良く計算することも確認された。

一方、定在波の3サイクル以降では、力学的エネルギーは保存しているにもかかわらず、徐々に振幅が減衰する結果が得られた。これは数値誤差によって運動が徐々にランダム化することが原因であり、それが起こらないような粒子法の開発は今後の課題である。

なお、本論文で示した手法では、Lagrangian の空間離散化と symplectic スキームによる時間離散化は、ともに最低次精度のものを用いている。粒子の回転自由度等を考慮して空間精度を向上すること<sup>12)</sup>、および高次精度の symplectic スキーム<sup>13,14)</sup>を採用して時間精度を向上することも可能であると考えられ、それらについて検討することも今後の課題である。

#### 参考文献

- 1) 越塚: 粒子法, 丸善株式会社, 2005.
- 2) L.B.Lucy: *Astron. J.*, **82**, (1977), pp.1013-1024.
- 3) R.A.Gingold, J.J.Monaghan, *Mon. Not. R. Astron. Soc.*, **181**, (1977), pp.375-389.
- 4) S.Koshizuka, Y.Oka: *Nucl. Sci. Engrg.*, **123**, (1996), pp.421-434.
- 5) H.Xie, S.Koshizuka, Y.Oka: *Int. J. Numer. Methods Fluids*, **45**, (2004), pp.1009-1023.
- 6) 宋, 越塚, 岡: 日本機械学会論文集 A 編, **71**, (2005), pp.16-23.
- 7) Y.Suzuki, S.Koshizuka, Y.Oka: *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, **196**, (2007), pp.2876-2894.
- 8) Y.Suzuki, S.Koshizuka: *Int. J. Numer. Methods Engrg.*, **74**, (2008), pp.1344-1373.
- 9) B.Leimkuhler, R.D.Skeel: *J. Comput. Phys.*, **112**, (1994), pp.117-125.
- 10) G.X.Wu, R.E.Taylor: *Appl. Ocean Res.*, **16**, (1994), pp.363-372.
- 11) M.J.Chern, A.G.L.Borthwick, R.E.Taylor: *J. Fluids Struct.*, **13**, (1999), pp.607-630.
- 12) 鈴木: 粒子法の高精度化とマルチフィジクスシミュレータに関する研究, 東京大学博士論文, 2008.
- 13) S.Reich: *SIAM J. Numer. Anal.*, **33**, (1996), pp.475-491.
- 14) S.Reich: *Numer. Math.*, **76**, (1997), pp.249-263.