



COMPUTATIONAL MECHANICS

計算力学部門ニューズレター No. 69

May, 2023

目次

■ 部門長就任・退任の挨拶			
・第101期部門長就任にあたって	佐賀大学	萩原 世也	2
・第100期部門長退任にあたって	豊橋技術科学大学	飯田 明由	3
■ 部門賞			
・2022年度計算力学部門贈賞報告	慶應義塾大学	高野 直樹	4
	東京都立大学	伊井 仁志	
・功績賞を受賞して	東京大学	高木 周	7
・業績賞を受賞して	東北大学	下山 幸治	9
・業績賞を受賞して	佐賀大学	只野 裕一	10
・業績賞を受賞して	広島大学	田中 智行	12
■ 特集：粒子法の進展			
・特集にあたって	東京大学	柴田 和也	14
・粒子法による流体・固体・粉体、それらの統合解析に向けた現状	九州大学大学院	浅井 光輝	16
・粒子法の流体潤滑問題への応用	宇宙航空研究開発機構	根岸 秀世	20
	産業技術総合研究所	近藤 雅裕	
	東京大学	柴田 和也	
・物理的健全性がある新しい粒子法（MPH法）の紹介	産業技術総合研究所	近藤 雅裕	26
・MPS法におけるポリゴン壁面上での濡れ計算モデルの開発	株式会社デンソー	服部 豪	30
・非 Lagrange 型の粒子法に関して	筑波大学	三目 直登	35
	筑波大学	田中 克治	
・高精度粒子法による数値流体解析とその高精度化原理について	東京大学	松永 拓也	39
■ 部門からのお知らせ			
・第35回計算力学講演会（CMD2022）優秀講演表彰	豊橋技術科学大学	飯田 明由	43
・2023年度年次大会部門企画について	東京都立大学	伊井 仁志	44
・第36回計算力学講演会（CMD2023）開催案内	豊橋技術科学大学	横山 博史	45

第101期部門長就任の挨拶



部門長就任にあたって

第101期部門長
萩原 世也
佐賀大学

この度、第100期飯田明由部門長（豊橋技術科学大学）の後の第101期部門長を務めさせていただくことになりました佐賀大学の萩原世也です。計算力学部門は現在部門登録者数4,500名弱であり、日本機械学会の各部門の中でも大きな部門のひとつとなっています。この計算力学部門を運営委員会委員、店橋護副部門長（東京工業大学）、下山幸治幹事（九州大学）、荻野正雄副幹事（大同大学）を始めとした総務委員会委員、各委員会や研究会の皆様と関係する全ての皆様のお力添えのもとに、円滑な運営とさらなる発展に努めて参りたいと思います。

2020年度以降コロナ禍により計算力学部門の活動もかなり制限を受けてきました。計算力学部門最大の行事である計算力学講演会も2020年度は、第33回計算力学講演会が中止となり、2021年度の第34回計算力学講演会（北海道大学）、2022年度第35回計算力学講演会（鹿児島大学）もオペレーションは開催大学で行われたものの講演会自体はオンラインで開催となりました。

2023年度の第36回計算力学講演会はようやく対面での開催となる予定です。開催場所は愛知県豊橋市であり実行委員会の委員の方が開催に向けて着々と準備をされているところです。お互いに実際にお会いしてお話できることを楽しみにしております。2024年度の第37回計算力学講演会の実行委員会も開催に向けて準備を進めております。皆様のご参加とご協力をお願いいたします。

次は計算力学部門の講演会以外の主な委員会の活動もご紹介したいと思います。

表彰委員会では、飯田明由100期部門長が委員長となり、機械学会賞候補の推薦、計算力学部門賞各種表彰の候補者の審査および文部科学大臣賞「若手科学者賞」の学会への部門推薦候補者の審査をされる予定です。

広報委員会では、年2回のニュースレターの発行と計算力学部門のホームページの管理、部門登録者へのinformationメールの配信作業等をご尽力いただいております。

新学術誌編修委員会では日本機械学会論文集、Mechanical Engineering Reviews, Mechanical Engineering Journal, Mechanical Engineering LettersのCMカテゴリの編修があります。これらの編修はCMカテゴリマネージャを始めとした編修委員の方々のご尽力により運営されております。

年次大会担当委員会では、2023年度・2024年度年次大会の計算力学部門や部門横断の行事の募集や取りまとめを担当いただいております。

固体2級対策講習会担当委員会では計算力学技術者2級（固体力学分野の有限要素法解析技術者）認定試験対策講習会の実施をご担当されています。

日韓シンポジウム担当委員会では韓国からコロナ禍により休止されていた日韓シンポジウム開催準備の申し入れがあり、その窓口となり再開を探っています。

産学連携推進委員会では、年次大会や計算力学講演会においてフォーラムおよびオーガナイズドセッションの企画にご尽力いただいております。

部門間交流担当委員会による部門間連携については、機械材料・材料加工部門、材料力学部門、設計工学・システム部門、生産システム部門と連携して2023年6月20日(火) 10:45-17:00に機械材料・材料加工のシミュレーションと計測（第3回：金属AMの応用と潮流）（<https://www.jsme.or.jp/event/23-22/>）を開催する運びであります。そして若手シンポジウム担当委員会を立ち上げ、99期部門長の高野直樹教授（慶應義塾大学）のご尽力により、2023年8月7日(月)～9日(水)に材料力学部門との合同企画にて若手研究者を対象としたM&M・CMD若手シンポジウム2023（<https://www.jsme.or.jp/conference/mmdcmdconf23-2/index.html>）を金沢にて合宿形式において開催いたします。

さらに研究会として逆問題解析手法研究会、マルチスケール計算固体力学研究会、電磁流体解析関連技術研究会、設計と運用に活かすデータ同化研究会、設計情報駆動研究会、解析・設計の代替モデリング研究会が2023年度中に活動しております。このような研究会活動は継続的に行われており、計算力学部門として円滑に活動を支援していければと思っています。

最近ではデジタルトランスフォーメーションや人工知能の活用などが注目されております。これらを機械工学へ活用・発展させていく上で計算力学関連分野の関わりは非常に大きくなるものと思います。したがって日本機械学会の分野横断型の部門である計算力学部門が社会および学会に果たす役割は非常に大きくなると考えています。これらの特徴をさらに生かして積極的に貢献できればと思っています。

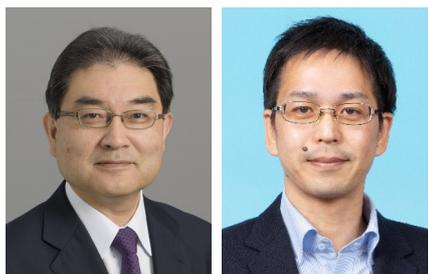
そして徐々に社会活動がコロナ禍の経験を経て以前とは少し異なる「通常」に向かうと考えられます。新たな「通常」に向けて2023年度はスタートの年度となるべく充実するように、これからの計算力学部門の活動が技術的課題の解決や研究テーマの創出、あるいはビジネスの創出などにもつながってまいりますよう努力したいと思っています。是非とも部門活動にご支援、ご参加いただきますようお願い申し上げます。



部門長退任にあたって

第100期部門長
飯田 明由
豊橋技術科学大学

部門賞



2022年度計算力学部門贈賞報告

2022年度計算力学部門表彰委員会

委員長 高野 直樹 慶應義塾大学(左)

副委員長 伊井 仁志 東京都立大学(右)

計算力学部門では、1990年度より部門賞として、功績賞と業績賞の2つの賞を設けています。功績賞は、学術、技術、教育、学会活動、出版、国際交流などで計算力学の発展と進歩に幅広く顕著な貢献のあった個人に贈られます。業績賞は、計算力学の分野で顕著な研究または技術開発の業績を挙げた個人に贈られます。歴代受賞者の一覧は部門ホームページ<https://www.jsme.or.jp/cmd/>に掲載されています。2022年度(第100期)は、6月初旬に部門登録会員に向けたインフォメーションメールと部門ホームページにて「部門賞候補ご推薦のお願い」を周知し、6月29日を期日として候補者の募集を行いました。推薦のあった候補者について選考委員および表彰委員会にて慎重厳正な審査を行い、功績賞1名、業績賞3名、合計4名の受賞者を以下のように決定しました。

功績賞 高木 周 氏(東京大学)

業績賞 下山 幸治 氏(九州大学, 受賞時は東北大学)

業績賞 只野 裕一 氏(佐賀大学)

業績賞 田中 智行 氏(広島大学)

オンライン開催となった第35回計算力学講演会において表彰式が執り行われ、各氏には表彰と記念品が郵送にて贈呈されました。本報レター読者の皆様にも、ご受賞4氏のご業績をご紹介します。その栄誉を広くご周知させていただきますとともに、改めて各氏へのお祝いを申し上げます。

高木周氏は、数値流体力学の分野において、特に気泡、赤血球、微粒子などの分散相が混ざった流れである混相流の数値解析に関するテーマについて、長年にわたり、顕著な業績をあげています。

なかでも、気泡に働く様々な力の詳細な解析や、水中に微量に含まれる表面活性剤が、単一気泡の挙動を大きく変化させ、さらには気泡間相互作用を介して、大規模な気泡乱流構造を劇的に変化させるマルチスケール現象について、理論、数値計算、実験の様々な手法を駆使して詳細に解析し、インパクトのある成果をあげています。

ごく最近、混相流の分野における世界トップジャーナルであるInternational Journal of Multiphase Flow (2022)や、Journal of Fluid Mechanics (2021)に発表された論文では、流体構造連成解析により、壁近傍の気泡群の挙動を詳しく調査するだけでなく、実験も行っており、観察に基づくモデル化と、モデリング・シミュレーションの妥当性確認を行っています。

一連の研究成果は国内外で高く評価され、上記の

International Journal of Multiphase FlowsのAssociate Editorをつとめています。さらに、Cambridge University Pressから新たに立ち上がった学術雑誌FlowのAssociate Editorや、日本流体力学会の英文雑誌であるFluid Dynamics ResearchのEditorもつとめています。高木氏は、最先端の流体力学研究に関する幅広い知識を有し、当該分野を牽引してこられました。

2007年～2010年の間は、スーパーコンピュータ「京」に関する大型プロジェクト「次世代計算科学研究開発プログラム(2008年～2012年)」において「臓器全身スケール研究開発チーム」のチームリーダーとして、東京大学から理化学研究所へ3年間出向という形をとられてプロジェクトに専念され、多くの成果を生み出してこられました。このプロジェクトでは、大量の赤血球を含む血流の計算を実施するため、新たな計算手法を開発し、世界最速の流体構造連成解析手法の開発に成功しました。

さらに、後継の「予測する生命科学・医療および創薬基盤」では、課題3「予測医療に向けた階層統合シミュレーション」のグループリーダーをつとめ、タンパク質分子のダイナミクスを取り入れた血栓症シミュレータや、筋骨格系と脳神経系を連成させた階層統合シミュレータなど、計算生体力学に関する最先端のソフトウェア開発を手がけてきました。特に、量子・分子レベルから連続体レベルの現象まで、複雑な階層構造を有する現象において、分子レベルの微視的ふるまいが、系全体の巨視的ふるまいや機器の性能、治療法に与える影響を評価するマルチスケール解析・階層統合シミュレーションは、新規性、独自性に富む内容であり、生体力学現象のシミュレーションの分野でも顕著な功績があります。

これらの研究成果は、日本機械学会論文集をはじめ、前記の通り、多くの著名な国際雑誌に掲載されています。日本機械学会からは、「クラウドキャビテーションの崩壊現象を利用した結石破砕法(第1報, クラウドキャビテーション制御方法の開発)」と題した論文に対して、2007年に論文賞が授与されています。ほかにも、1998年に「静止流体中を上昇する球形気泡に働く力」と題した論文に対して日本混相流学会論文賞が授与されています。日本機械学会計算力学部門では、2008年に「流体力学の分野における移動境界問題に対する数値計算手法の開発」に対して業績賞が授与されました。

また、学会活動としては、2020年度に日本機械学会計算力学部門長をつとめられ、コロナ禍の非常事態であったにもかかわらず、会議のオンライン化の態勢を整え、熱工学部門・流体工学部門・計算力学部門の合同企画オンライン講習会「機械学習×熱・流体工学の最先端」を立ち上げました。この講習会

は、多くの参加者を得て毎年1回開催されるシリーズ講習会となりました。計算力学講演会は中止とせざるを得なかったかわりに、コロナ禍で分断された研究者が成果をもちよるためのCMD2020計力学スクウェア研究報告集(A-TS 01-27)を短期間で編纂し、2020年12月に発刊しました。

ほかにも、日本機械学会医工学テクノロジー推進会議委員長(2018年)、日本機械学会論文集B編編集委員長(2012年)の要職を歴任されたほか、日本流体力学会会長、日本混相流学会会長もつとめています。国際的にも、力学に関する100年の伝統を持つ権威ある国際的学術組織である理論応用力学連合(IUTAM)のCongress Committeeメンバーにも選出されています。

以上のように、高木周氏は、数値流体力学と流体構造連成解析の分野で、国内外において大きな貢献と功績があります。

1995年 東京大学大学院工学系研究科機械工学専攻助手
 1996年 東京工業大学工学部機械宇宙学科助手
 1998年 東京大学大学院工学系研究科機械工学専攻講師
 2002年 東京大学大学院工学系研究科機械工学専攻助教授
 2007年 (独)理化学研究所次世代計算科学研究開発プログラム・臓器全身スケール研究開発チーム チームリーダー
 2010年 東京大学大学院工学系研究科機械工学専攻教授

下山幸治氏は、航空宇宙システムの最適設計、複雑動的システムの最適化手法、数値流体力学における不確実性の定量的評価など、スーパーコンピュータを駆使して流体機械に発生する空気の流れをシミュレートし、流体機械のものづくりに役立てる研究において、独創的かつ有用な研究実績をあげています。

非線形性を有する物理現象に影響される設計の性能を正しく評価するためには、高価な計算コストが求められます。そこで下山氏は、物理シミュレーションを必要最小限のケースで適合的に実施することで、航空機・自動車などの流体機械の性能解析および設計を高精度・高効率に実施する、独自のデータ駆動型アプローチの開発に取り組んできました。さらに、開発アプローチを数々のものづくり案件に適用し、従来設計よりも性能・コスト・安全性の各面で優れた革新的設計の創出を目指しておられます。

下山氏が開発した手法では、限られた入力条件に対して実施された物理シミュレーションの出力を教師データとして、高価な物理シミュレーションを代替する安価な数理モデルを構築します。これにより、物理シミュレーションを実施したことのない任意の入力条件に対して出力を瞬時に推定できるようになり、物理シミュレーションを頼りに行われる性能解析・設計を大幅に高速化できます。この際、「ガウス過程」と呼ばれる確率過程を用いて、シミュレーションの出力を「エラーバー」付きでモデル化します。このモデルをベースに、性能が外れ値を取らない確率や、最適設計の存在確率など、ものづくりの品質保証に役立つ指標を算出し、指標値が乏しくなる入力条件でシミュレーションを追加実施し、その結果を教師データに加えていくことで、最適かつ強靱な設計の在処を正確に推測できるアプローチを開発しました。学術的な面だけでなく、企業と共同研究を通じて、研究成果の一部は製品化に繋がるなど、産業界

にも高いインパクトを与えています。

下山氏が開発した手法は、国内外の学術論文誌に掲載されているほか、国内外の関連学会からの要請を受けて、基調講演・特別講演・招待講演を多数行われてきました。また、世界各国の研究者と国際共同研究に取り組み、開発手法の一部を「KADAL」というオープンソースプログラムとしてGitHubで一般公開し、国内外の研究者に広く活用されています。スパコン「富岳」成果創出加速プログラムに共同参画し、航空機フライト試験を代替するデータ駆動型の流体・構造連成設計技術の先導的実証にも取り組んでいます。2012年および2014年には「頭脳循環を加速する若手研究者戦略的海外派遣プログラム」の一環で米国スタンフォード大学に、2013年および2017年には仏国エコール・サントラル・リヨンに招聘されるなど、これらの経験が評価され、2019年に東北大学・リヨン大学・仏国立研究センター(CNRS)が開設した国際共同研究ユニット「ELyTMAX」において、下山氏の解析・設計のデータ駆動型アプローチに関する研究が活動の柱の一つとなっており、日仏両国の間で今後の更なる研究推進が期待されています。

学会活動においては、日本機械学会計算力学部門で2019年より「解析・設計のための代替モデリング研究会」を立ち上げ、これまでに、産学官から100名程度の研究者およびエンジニアの方々からの賛同を受けて、英知収集・意見交換・技術相談を行う場として研究会を運営しています。計算力学講演会では代替モデリングに関する企画セッションを主宰しています。また、2022年からは計算力学部門の運営委員会委員を務めるなど、計算力学部門への多大な貢献があります。

2006年 東北大学流体科学研究所博士研究員
 2009年 東北大学流体科学研究所助教授
 2014年 東北大学流体科学研究所准教授
 2023年 九州大学大学院工学研究院教授

只野裕一氏は、材料のマルチスケールモデリング、有限要素法やメッシュフリー法による種々の非線形問題の解析に関する研究を行っており、多くの独創的かつ有用な研究実績をあげています。

金属材料の数百nm～数百 μm オーダーのメゾスケール材料モデリングに関して、立方晶金属と比較して特異な挙動を示す六方晶金属のモデリングに着目し、マグネシウムやチタンなどの金属材料で特に重要な変形機構となる変形双晶に対して、結晶粒内における双晶の体積分率を考慮した材料モデルを提案しています。さらに、複数双晶系の活動を考慮できるように実用的なモデルへと拡張しました。開発したモデルを用いて、六方晶金属の塑性変形機構解明に対して重要な知見を独創的な観点から与えています。

次に、2スケールの漸近展開に基づく均質化理論を用いた結晶塑性均質化法により、上記のメゾスケール材料モデルを解析に適用しています。塑性加工解析においては、Marciniak-Kuczynskiモデルによる成形限界予測手法と結晶塑性均質化法を融合し、現実的な計算コストで、複雑な微視構造の応答を適切に反映した成形限界予測を可能とする手法を提案しました。この研究に対し、2014年に日本機械学会第26回計算力学

講演会優秀講演表彰を受けています。

ほかに、多結晶モデルの古典的な手法であるTaylorモデルは、結晶格子の回転を現実よりも課題に評価すると考えられてきましたが、只野氏はTaylorモデルに改めて着目して結晶塑性均質化法との詳細な定量的比較を実施した結果、Taylorモデルが実際には格子回転を過小評価していること、一方で適切に使用すれば面心立方金属に対しては十分に実用的な手法であることを示しました。これらの独創的な視点での一連の研究業績に対して、日本計算力学連合より2015年にJACM Young Investigator Awardが授与されています。

また、メッシュフリー法による高次勾配結晶塑性解析の高度化とキンク強化解析への適用においても顕著な成果をあげています。幾何学的に必要な転位（GN転位）の影響を導入した高次勾配結晶塑性モデルに関して、有限要素法を用いた解析した場合には不合理な解が得られることが知られていました。変位場とGN転位密度を連成して解析する際の近似場の不整合によるものと考えられるため、只野氏はこの問題解決のためにメッシュフリー法の一つであるReproducing Kernel Particle Method (RPKM)を用いた研究を実施しています。この研究に対して、2017年にJSME-KSME Joint Symposium Best Paper Awardを受賞されました。この解析手法を、高い強度を有する長周期積層（LPSO）構造を有するマグネシウム合金に適用し、強度発現に重要な役割をはたすキンクをメゾスケールにおけるすべり方向の空間的な変化ととらえ、格子欠陥による強化発現の影響が重要であるなどの新たな知見を示しています。

学会活動においては、日本機械学会計算力学部門 部門幹事、第26回計算力学講演会実行委員会幹事のほか、日本機械学会会員部会委員、出版センター委員会委員、技術ロードマップ委員会委員、九州支部学生会顧問をはじめ多くの委員をつとめてきました。ほかに日本計算工学会理事、日本計算力学連合事務局長の要職も歴任しています。国際交流活動においても、COMPSAFE 2020 (3rd International Conference on Computational Engineering and Science for Safety and Environmental Problems)などの運営に携わり、IACM (International Association for Computational Mechanics)のGeneral Councilメンバーに選出されています。以上のように、只野氏は、国内外で高く評価される研究業績と実績を有しています。

2002年 九州大学大学院工学研究院助手
 2005年 慶應義塾大学理工学部助手、助教
 2008年 佐賀大学理工学部機械システム工学科准教授
 2015年 カリフォルニア大学サンディエゴ校訪問研究員
 2018年 佐賀大学理工学部機械工学部門准教授
 2022年 佐賀大学理工学部機械工学部門教授

田中智行氏は、固体・構造解析に関する数値解析手法の研究に従事され、ウェーブレットガラーキン法・メッシュフリー法・粒子法・Peridynamicsに関する研究、溶接構造物の疲労強度評価に関する研究、シェル構造の破壊・座屈・塑性崩壊挙動に関する研究の3分野において多くの研究実績をあげています。いずれも、船舶や自動車などの輸送機器、リグ・ジャケット構造などの海洋

構造物といった鋼構造物を主たる対象として、波浪衝撃などさまざまな外力に対する動的応答ならびに最終強度・耐力の解明を行うとともに、よりよい設計に結びつける構造評価法の開発を行っています。

冒頭の新しい解析手法を駆使した非線形FEMやX-FEMを破壊力学の諸問題に展開した研究の中では、近似関数の修正や幾何学的境界条件の規定方法に対する新しい考察を行いました。破壊や疲労強度に関して、き裂を有する箱桁構造や補剛板構造の塑性崩壊挙動に対する新しい強度評価を提案したほか、円筒継手の疲労破面について新しい知見を得るなど、独創的な研究成果を得ています。

2011年から2012年には洋上風力発電設備などの海洋構造物に関する世界トップレベルの研究機関であるノルウェー科学技術大学において客員研究員として所属し研究活動を行っています。最近では、新船体構造規則策定のための溶接継手ホットスポット応力評価、Peridynamicsを用いたロケット燃料タンクの爆破解析、防撓パネルや円筒シェル構造の塑性座屈解析、自動車スポット溶接接手の破断強度評価などへと研究の範囲を広げています。

研究成果は、計算力学・破壊力学・疲労・海洋構造物の分野でのトップレベルの国際学術誌に100報を超える査読付論文として纏められている上に、そのH-index値も高く、田中氏が高いレベルで研究活動を継続してきたことを示しています。これらの研究実績が認められ、2014年に日本機械学会奨励賞（研究）が授与されました。

受賞後の2015年にも、日本機械学会論文集に「メッシュフリー法を用いた板構造物のモデル化に関する研究」、「完全陰解法に基づく損傷分割背応力弾塑性モデルの縮約積分法」と題した論文を發表されています。前者は、初期形状に一般的な形状を持つ組合せ構造の解析のため曲面座標系を導入した定式化と、面内回転成分を考慮したメッシュフリー法による離散化を行い、T字梁に適用しています。後者は自動車会社との共同研究で、極サイクル疲労損傷を表現するため、損傷を考慮した分割背応力モデルに関する研究を行っています。他学会においても、2014年にJACM Young Investigator Award、2015年に日本計算工学会論文賞、2022年にJACM Fellows Awardを受賞しています。

国際的活動として、APCOM2019およびWCCM-APCOM 2022でのMSの立ち上げ、アジアや欧米のトップレベル研究者との国際共同研究や外国人客員研究員受け入れを多数行っています。関連学界および社会への貢献として、日本溶接協会原子力研究委員会FDF II小委員会中立委員、日本計算力学連合企画委員、日本船舶海洋工学学会構造研究会委員、一般財団法人日本船舶技術研究協会超高精度船体構造デジタルツインの研究開発委員会委員などを兼務しています。

以上のように、田中氏は、計算固体力学分野において国内外で高く評価される研究業績と実績を有しています。

2007年 広島大学大学院工学研究科助教
 2018年 広島大学大学院工学研究科准教授
 2020年 広島大学学術院(先進理工系科学研究科)准教授



功績賞を受賞して

高木 周
東京大学・大学院工学系研究科・機械工学専攻

この度は、日本機械学会計算力学部門功績賞をいただき、大変光栄に存じます。様々な機会において、これまでお世話になった多くの皆様へ深く感謝申し上げます。今回、本原稿を執筆する機会を頂きましたので、計算力学に関連する私の経験と思うところについてお話をしたく存じます。

私がこの分野にのめり込むきっかけとなったのは、修士2年のときに取り組んだ研究テーマでした。その年、気泡力学の分野で著名な Johns Hopkins 大学の Andrea Prosperetti 教授がサバティカルで私たちの研究室に滞在していらっしゃいました。当時の私の指導教員であり、その後、長年にわたり研究室の上長として一緒に研究をさせて頂いた恩師の松本洋一郎先生のアドバイスにより、それまで行っていた修論の研究テーマを変更し、Prosperetti 先生の指導のもと、単一上昇気泡の数値シミュレーションに関する研究を行なうこととなりました。まず、最初にプログラムの検証を兼ねて、球形気泡に働く抗力の計算を行ったのですが、当時の私にとってはこのときの計算結果が衝撃的なものでした。液相をニュートン流体とし、抗力係数の Reynolds 数依存性を調べたのですが、Reynolds 数が高くなるにつれて、ポテンシャル流れから得られる Levich の抗力係数 (Landau & Lifshitz, *Fluid Mechanics*, 2nd Edition, Pergamon Press, p.182 にある演習問題) に数値計算解が漸近していく結果になりました。学部時代に中途半端にしか流体力学の勉強をしてこなかった私にとっては、「ポテンシャル流れ」は、非粘性流体のための理論で、実際の粘性流体の振る舞いを調べるには余役に立たない。特に、物体に働く抗力については、非粘性流体中に存在する物体では抗力が 0 となる「ダランベールのパラドックス」があるので、ポテンシャル流中の物体に働く抗力を議論するのは意味がないと思っておりました。そのため、ポテンシャル流に粘性を仮定して、粘性散逸理論から抗力をもとめている Landau & Lifshitz の演習問題に至っては、「なんだこの問題。答えはわかるが、意味あるのか。」ぐらいにしか思っていませんでした。ところが、コンピュータを使って Navier-Stokes 方程式の数値解をもとめると、気泡 Reynolds 数が 100 を超えてくると、見事にこの Levich の理論解に数値計算解が漸近していく結果が得られました。Reynolds 数が低い方の極限では Stokes 流れの解へ、高い方の極限は Levich の解へ、Navier-Stokes の数値解はその間を滑らかに結んでおり、そのグラフを得たときの感動を今でも覚えています。よく知られている通り、球形粒子の場合には、このような高 Reynolds 数での単純な理論解は存在せず、複雑な渦構造が物体後方に現れてきます。気泡の場合には、球形を仮定した場合には、気泡表面で生成される渦度が広く拡散せず、狭い境界層と後方の細い伴流域に閉じ込められ、剥離が生じないためこのような結果になります。さて、実際の気泡は、Reynolds 数の増加とともに変

形を伴ってきます。球形気泡の計算を行った後、いよいよ理論解が予測できない大きな変形を伴いながら上昇する気泡の計算を、境界適合格子を用いて行ったところ、これまた感動したのが、丁寧に基礎方程式を離散化し、厳密に境界条件を扱ってやると、実験結果と数値計算結果が驚くべき程一致した点でした。球形気泡の計算では得られなかった気泡後方の渦の構造も、変形を伴う計算を行なうときちっと出現し、界面の曲率が自由界面からの剥離現象には大変重要なものを感じ取ることができました。この一連の研究で、すっかり気泡の研究の虜になってしまい、Navier-Stokes 方程式の直接数値シミュレーションにより、理論解への漸近挙動をきちっと再現しつつ、理論からは予測できない非線形性の強い条件での解を得るということに興味を持つようになりました。

さて、抗力の次の興味の対象は揚力でした。特に気泡の場合には、変形を伴うことにより揚力の方向が変わるという興味深い現象がありましたので、益々のめり込んでいききっかけになりました。まずは、Navier-Stokes 方程式の数値計算解の理論解への漸近挙動の確認ということで、せん断流中の球形物体に働く揚力について解析を始めました。粘性のみに支配された Stokes 流れでは Kinematic Reversibility (運動学的可逆性) という性質があり、せん断流中の球形物体 (球形粒子、球形気泡 (液滴)) には、揚力が働きません。物体が球形を保ち、せん断流中で揚力を受けるためには、慣性の影響が必要で、この慣性の影響を取り入れて、低 Reynolds 数下で球形粒子に働く揚力を最初に理論的に見積もったのが、カリフォルニア工科大学の Phillip Saffman 教授の研究 (Saffman P.G., *J. Fluid Mech.*, **22**(1965).) でした。Saffman 力と呼ばれるこの揚力は、分散相 (粒子、微細気泡、液滴など) を含む流れのシミュレーションで、分散相の運動を記述するモデル方程式に、せん断流中で受ける揚力を表す項として多くの計算モデルで導入されました。私自身は、自分のプログラムの検証を兼ねて、Navier-Stokes 方程式の直接数値シミュレーションにより、この Saffman 力への漸近挙動を確認し、有限な Reynolds 数に対する揚力を調べようと考え研究を始めました。この粒子に働く揚力に関しては、すでに先行研究として、Dandy, D. S., & Dwyer, H. A. *J. Fluid Mech.*, **216**(1990) の数値計算があり、この論文の中で彼ら自身の計算結果の妥当性検証のため、Saffman 揚力との比較を行っており、非常に良好な一致を得ておりました。そこで、Dandy & Dwyer の論文の計算結果との比較によって、自分の計算結果の妥当性を確認することとしました。これからは、苦悩の始まりでした。私の計算結果は、Saffman 揚力を再現せず、Reynolds 数依存性に関しても、Dandy & Dwyer の計算と一致しない結果となり、プログラムのバグ探しから、離散化による誤差の蓄積まで様々な可能性を検討しました。特に (一様流)

+ (単純せん断流) を遠方で仮定しているため、遠方ではせん断から来る大きな速度成分を持つことになり、曲線座標系での解析でこの部分の誤差が蓄積しないための工夫などを詳細に検討し、2年ほどの月日を費やしましたが、彼らの結果を再現する結果は得られませんでした。悶々として悩んでいたときに、京都で開かれた混相流の国際会議でフランスのToulouse流体力学研究所のJohn Fabre 教授から、同じ研究所にいるJacques Magnaudet博士がこの問題をよく理解しているので連絡をとるといいと教えて下さり、Magnaudet先生とのやり取りを通して、Saffman揚力に対する自分の理解が浅かったこと、Dandy & Dwyerの論文の結果が怪しいということを知りました。これに関しては、その後、*Journal of Fluid Mechanics*, **368**(1998)に掲載されたLegendre & Magnaudetの論文を読んだ際の感動を良く覚えています。それまで、多くの研究者がなんとなくわかっているつもりであいまいにしてきた未解決問題に対して、この問題の難しさと多くの誤解について、非常にわかり易く説明されており、まさに目から鱗でした。また、すでに解決されているように見える基礎的問題の中にも、きちんと考えなおすと未解決な問題、わかった気になっているだけの問題が多数存在しているのを強く感じました。2年にわたり苦悩の期間でしたが、この経験がこの後の研究でも活かされ、さらにのめり込んでいく新たな研究テーマへと繋がりました。気泡に働く抗力、揚力の研究は、その後、微量な表面活性剤が気泡の揚力に与える影響、さらには気泡流全体のマルチスケール構造に与える影響に関する研究へと繋がりました。気泡流中にごく微量の表面活性剤を添加し、その濃度を変化させることにより、気泡クラスターを形成させたり、消滅させたり、さらには気泡クラスター生成時のみ乱流構造が劇的に変化し、大規模渦構造が消失するなど、実用上も熱物質輸送などに関連する重要な成果となりますが、それ以上に実験を見てのだけでも手品のような面白さがある研究です(Takagi & Matsumoto, *Annual Review of Fluid Mechanics*, **43** (2011)). この研究には研究室メンバーとともに、すっからはまりました。ここでは何より興味深い実験結果が先にありましたが、この際も常に実験結果を理解するための数値実験としての精緻なシミュレーションが重要な役割を果たしてきました。

さて、計算力学のSocietyに対する関わりという観点から特に貴重な経験だったのは2008年から3年間の理化学研究所への出向でした。スーパーコンピュータ「京」の開発と関連してグランドチャレンジプログラムであった「次世代計算科学研究開発プログラム(2008-2012)」において「臓器全身スケール研究開発チーム」のチームリーダーとして、東京大学から理化学研究所へ3年間出向という形をとり、プロジェクトに参画させて頂き、その後も「京」のプロジェクトには関わらせて頂きました。ちょうど理化学研究所に出向中に、蓮舫議員による「2位じゃダメなんです

か?」の発言で有名な事業仕分けがあり、危うくプロジェクトが途中で打ち切りになる危機もありました。何しろ世界一の成果をきっちりアピールしなくてはというプレッシャーもあり、日本機械学会でも活躍しており、現在、大阪大学に所属している杉山和靖教授と、東京都立大学の伊井仁志准教授が当時私たちのチームにおり、彼らの多大な貢献により、2011年当時世界最速の性能を出した流体構造連成手法の開発に成功しました。(杉山和靖ら、ながれ(日本流体力学会誌), **32** (2013).) 事業仕分けの後、一般向けや子供向けの講演会を含めて、プロジェクトの成果の説明をする機会が一挙に増え、忙しい日々を過ごしましたが、誰のための何のための計算科学かという観点から非常に貴重な経験をさせて頂きました。

話は変わりますが、最近、特に感銘を受けているのは、私の恩師の一人である大橋秀雄先生の生き抜く姿勢です。私が修士のときには、指導教員の松本先生が助教授で、研究室には大橋秀雄先生が教授としていらっしゃいました。現在、92歳ですが、毎年開かれる研究室の同窓会を兼ねたシンポジウムに参加して下さり、90歳の卒寿のお祝いの年には、大橋先生自らが研究発表をしてくださいました。日本流体力学会の出している雑誌「ながれ」の中の【談話室】(2021年12月号)に「高齢層に注目を」という題目で記事を書かれており、この内容に関する発表をしてくださいました。プログラミング言語のPythonを85歳を超えてから学びはじめ、自分でプログラムを書いて、円柱周りの流れに関して、流体粒子をLagrange的に追跡した際の移動時間に関する大変興味深い議論をしております。発表もユーモアを交えながら、わかり易く説明して下さり、ただただ感動し、大橋先生のような年齢の重ね方をしたいと切に思いました。<http://hideo3.on.coocan.jp/> に大橋先生のホームページがあり、研究の話だけでなく、日々生活している中で考えたこと調べたことについて、心に響くメッセージの数々がございますので、ぜひご覧頂ければと思います。

最後になりますが、今回このような栄誉ある賞を頂き、本原稿を書きつつ皆様に感謝するとともに、次の世代に何を残せるかを考えるきっかけとなっております。昨今、機械学習を始めとした情報分野の研究が大変盛んで、力学分野との融合も重要なテーマとなっております。デジタルツインといった言葉も様々なところで使われておりますが、コンピュータ上で真に私たちの身の回りの事象を再現し、現象を予測していくためには、力学の更なる発展が不可欠だと考えております。そこに少しでも貢献できればと思っておりますので、今後とも、ご指導ご鞭撻のほど、よろしくお願い申し上げます。今後の計算力学分野および日本機械学会計算力学部門の益々の発展を祈念して、受賞のご挨拶とさせて頂きたいと思っております。この度は、どうもありがとうございました。



業績賞を受賞して

下山 幸治
九州大学大学院工学研究院機械工学部門

この度は、日本機械学会計算力学部門業績賞を頂戴し、誠に光栄に思います。本賞にご推薦いただきました大林茂先生（東北大学）をはじめ、これまで私の研究にご協力・ご支援いただきましたすべての方々に深く感謝いたします。

私が研究の世界に入ったのは、2000年4月に東京大学工学部機械工学科の4年生になった時の研究室配属でした。その時私が選んだのが、松本洋一郎先生（現 外務大臣科学技術顧問）・高木周先生の研究室でした。はじめに与えられた卒業論文のテーマは希薄気体力学の実験でしたが、実験装置の不具合や、そもそも私自身の不慣れもあって研究がうまく進まなかったため、2000年10月に急遽テーマを数値計算（DSMC法）に変更されました。それまでの私は、プログラミングに苦手意識がありましたが、先輩・同期のサポートのおかげで、最後は自力でプログラムを編集し、数値計算を実行して結果を分析・考察できるようになりました。

大学院に進学する際、私は生来の希望を捨てきれず、機械工学から航空宇宙工学に転専攻しました。研究室を変えることへの後ろめたさを感じて、事前に指導教員の松本先生にも相談せず、大学院入試当日までそのことを伏せていました。今思いますと、大変失礼なことをしたと深く反省しております。この紙面を借りて、反省とともに、松本・高木研究室での経験が現在に至る長い長い計算力学研究への誘いとなったことへの感謝を、松本先生と高木先生にお伝えいたします。また、この度の私の業績賞と同じタイミングで、高木先生が功績賞を受賞されたことに、不思議なご縁を感じております。

2001年4月からは、東京大学大学院工学系研究科航空宇宙工学専攻を兼務されていた、文部科学省宇宙科学研究所（現 宇宙航空研究開発機構宇宙科学研究所）の藤井孝藏先生（現 東京理科大学）の研究室を選び、連続体としての流体力学の数値計算（CFD）の世界に入りました。航空宇宙系CFDの大家である藤井先生から与えられた修士論文のテーマは、二段式宇宙往還機の統合設計最適化でした。当時の藤井研究室には、勾配法・遺伝的アルゴリズム（GA）などの最適化手法に関わる者が私以外におらず、一から勉強する必要もあって大変でした。そのため、他の同期に比べて研究の進捗が遅く、なかなか学会発表の機会を得られないという歯がゆい思いもしました。そんな中、藤井先生のご紹介で、空力設計最適化の大家である東北大学の大林茂先生の研究室に3日間だけお世話になり、GAのイロハを体得することができました。そのおかげで、GAのプログラムを自分で組んで最適化計算を実行できるようになり、学会発表を経て、修士論文を無事に提出することができました。この経験により少し自信が付いて、2003年4月からの博士論文では、実世界に存在する不確かさ（形状ばらつき、環境ゆらぎなど）に対して強靱な設計を目指す「ロバスト最適化」というテーマを自分で設定しました。ロバスト最適化を一種の多目的問題として解く新手法を開発した結果、その独創性と有用性が認められて、特許登録に至りました。さらに、

当時藤井研究室が推進していた火星探査航空機の開発において、本最適化手法とCFDを併用して翼の空力設計を行った内容を取りまとめて、博士論文を提出することができました。「最適化」というこの度の業績賞に至るテーマを与えて下さり、不出来な私を根気強くご指導いただきました藤井先生と、博士課程の途中から藤井研究室の助手として着任されて私の最適化研究をサポートして下さいました大山聖先生に深く感謝いたします。

博士号を取得した後、2006年4月より東北大学流体科学研究所の大林茂先生の研究室のポスドクに着任しました。博士論文までに取り組んだ最適化計算では、探索されるすべての最適解候補についてCFDを実施して目的関数を評価するため、計算時間が長大になっていました。そこで、大林先生と大林研究室の助手であった鄭信圭先生（現 韓国慶熙大学校）のご助言のもと、高価な目的関数の評価を安価な近似式に置き換える「サロゲートモデル」を導入し、計算時間の短縮を図りました。ただし、近似式は必ず誤差を伴うため、近似誤差をガウス型確率分布として付加されたサロゲートモデルである「ガウス過程」を用いて、モデル上で大域的最適解の在処を確率論的に探ることで、高価な目的関数評価計算を必要最小限に適合的に行う手法（最近では「ベイズ最適化」という名前で広く浸透しています）に着手しました。ここで、最適解の在処を指標（獲得関数）化する必要があり、過去に単目的最適化のための獲得関数が提案されていましたが、私は多目的最適化および不確かさ解析（ロバスト最適化に必要）のための獲得関数を新たに考案し、従来のものに比べて高い最適解探索性能を実現できました。また、数々の企業との共同研究のもと、航空機・自動車・ターボ機械などの流体機械の設計や、構造設計・材料設計・制御などの対象にも応用し、本最適化手法を実証しました。さらに現在では、ベイズ最適化に限らず、機械学習をはじめとしたデータ科学技術の設計応用にも取り組んでいます。これらの私の成果は、今流行りの「データ駆動型」設計の先駆けであると自負しております。ここに、学外から私をポスドクとして受け入れていただき、私の研究とキャリアアップにご尽力いただきました大林先生と鄭先生に深く感謝いたします。また、私は2009年10月から助教、2014年4月から准教授として学生の研究指導を務めてきましたが、学生諸氏の頑張りが私の研究の裾野を拡げてくれたおかげで、本賞に繋がったことにも感謝したいと思います。

この度ご縁がありまして、2023年4月より九州大学大学院工学研究院機械工学部門の教授に着任しました。今までの経歴を見てお分かりいただけますように、私は機械と航空宇宙の両分野を行ったり来たりしていますが、これまでの研究は解析・設計に関わるあらゆる分野に役立つものであることを暗示しているように思われます。これから新天地におきましても、分野の枠にとらわれることなく、工学発展のための研究を推進していきたいと思っておりますので、引き続きご指導ご鞭撻のほどよろしくごお願い申し上げます。



業績賞を受賞して

只野 裕一
佐賀大学 理工学部 機械工学部門

このたびは、日本機械学会計算力学部門業績賞という大変
栄誉ある賞を頂き、誠に光栄に存じます。本賞を過去に受賞
された方々のお名前を見ると、その末席に加えて頂くにはま
だまだ未熟であり、嬉しさよりも恐縮する気持ちが勝っており
ますが、まずはこれまでお世話になった多くの皆様に心より
感謝申し上げます。

本賞を頂いた2022年11月開催の第35回計算力学講演会
は、新型コロナウイルス感染症の影響によりオンライン開催
となりましたが、本来であれば鹿児島大学で開催される予定
でした。後述するように、20年前に同じく鹿児島大学で開催
された第15回計算力学講演会は、私が初めて計算力学部門
の業務に携わった講演会です。今回、私は実行委員の一人と
して部門表彰式当日は鹿児島大学で講演会運営に従事して
おり、思い出の地である鹿児島大学で本賞を受賞できたこと
は、忘れ得ぬ思い出となりました。2022年は私が大学教員と
なっただろうと20年、また自分のキャリアのほぼ折り返し点と
もいえる節目の年でもありました。そのようなタイミングで本
賞を頂いたことは、大いに励みになるとともに、気持ちも新た
に過ぎの20年に臨まねばと気の引き締まる思いです。

計算力学部門業績賞といえば、2005年11月に筑波大学で
開催された第18回計算力学講演会のことが思い出されます。
私の恩師である故野口裕久先生（慶應義塾大学）は、大学
ではもちろん、国内外の講演会などでもポロシャツやトレー
ナーにジーンズ、スニーカーというカジュアルな出で立ちがト
レードマークで、おおよそネクタイ姿が想像できない先生で
した。実際、研究室の学生の間では、「野口先生のネクタイ姿
を人生のうちで3回見たら幸せになれる」という冗談があっ
たほどです。しかしこのとき、野口先生がネクタイ姿で講演会
会場に現れ、一体何事かといぶかしく思う一幕がありました。そ
の日の部門表彰式において野口先生が業績賞を受賞され、
そこで合点がいくと同時に、嬉しそうに壇上に立つ野口先生
をみて、それだけ栄誉ある賞を受賞されたのだと駆け出しの
研究者ながらに感じたことを覚えています。あれから17年が
たち、奇しくも当時の野口先生と同一年になった私が同じ賞
を頂いたことは望外の喜びです。「お前には10年早いな」と
笑う野口先生のお顔が脳裏に浮かびますが、この受賞を野
口先生にもご報告したいと思います。

1999年4月、学部4年生だった私は慶應義塾大学理工学部
システムデザイン工学科の野口先生の研究室の門を叩きま
した。当時は計算力学という言葉も知らず、野口先生の気さ
くなキャラクターに惹かれて研究室を選んだのですが、結果と
してこの選択が私と計算力学部門のつながりを決定づける
こととなります。野口先生は非線形有限要素法の専門家であ
ると同時に、当時国内外で盛り上がりを見せていたメッシュフ

リー法の研究にも力を入れられていました。野口研究室にお
いて、私は材料非線形性を考慮した大変形有限要素解析に
関する研究をテーマとすることになり、このときに非線形有限
要素法の基礎をしっかりと叩き込まれたこと、さらに研究者と
しての心構えを野口先生から直々に教えられたことが、その
後研究活動の礎となっています。また、早いうちから国内外の
講演会等に積極的に連れて行ってくださり、その中で黒田充
紀先生（山形大学）、桑原利彦先生（東京農工大学）をはじめ
とするたくさんの先生方と交流をもつことができました。

修士課程修了直後の2002年4月、九州大学大学院工学研
究院化学工学部門の宮崎則幸先生の研究室に助手として採
用頂いたことは、のちの人生の方向を決めることになる大き
な幸運でした。このとき宮崎先生は計算力学部門の副部門長
を務められており（翌2003年に部門長）、また同年11月に鹿
児島大学で開催された第15回計算力学講演会の実行委員
長でもありました。このため、助手として着任後すぐに第15回
計算力学講演会の運営に携わることになり、これが私の計算
力学部門での初めての仕事となります。実行委員会の幹事
であった岡田裕先生（鹿児島大学、現東京理科大学）、池田徹
先生（九州大学、現鹿児島大学）、萩原世也先生（佐賀大学）
をはじめとする先生方とともに講演会運営に奔走した日々
は、貴重な経験であったと同時に、懐かしい思い出として今も
鮮明に覚えています。

2005年4月には母校である慶應義塾大学理工学部機械工
学科に職を得ることができ、志澤一之先生の下で助手（2007
年4月からは助教）として3年間勤務することとなりました。現
在の研究テーマの重要な基盤のひとつである結晶塑性論を
はじめ、マルチスケール材料モデリングについて集中的に勉
強できたこの3年間になければ、現在の研究は全く異なるも
のになっていたでしょう。現在同大学の教員である村松眞由
先生が、志澤研究室の学部生として研究室に入ってきたのも
このときです。村松先生とはその後、研究に関する交流のみ
ならず、2019年からは計算力学部門の総務委員会でも2年間
ご一緒することになるのですが、当時はそんなことを夢想だ
にしませんでした。

そして2008年4月、現所属である佐賀大学理工学部に着任
しました。研究者として第一歩を踏み出した九州の地に再び
教員として赴任し、本当に嬉しい気持ちだったことが思い出
されます。萩原世也先生には大変お世話になりつつ、独立し
た研究室を立ち上げる環境を与えて頂き、これまで私の研究
室に所属してくれたたくさんの学生の皆さんとともに、現在に
至るまで研究と教育を続けています。着任1年目の2008年11
月には第21回計算力学講演会が琉球大学で開催され、実行
委員として再び計算力学講演会運営に携わりました。さらに、

2013年に第26回計算力学講演会が佐賀大学で開催され、実行委員会幹事を拝命しました。大変なことも多い講演会運営でしたが、参加者の方からはとても楽しい講演会だったという声を頂き、苦勞が報われると同時に、佐賀大学や計算力学部門にも少しは恩返しのできたのではないかと胸をなで下ろしました。

2015年4月から1年間は、佐賀大学の長期海外派遣事業により、カリフォルニア大学サンディエゴ校のJiun-Shyan Chen先生の研究室を訪問しました。Chen先生はメッシュフリー法の研究者として野口先生とも懇意であった先生です。私自身は、野口先生とは同じことをしても仕方がないと、それまでメッシュフリー法には手を出さずに研究をしてきましたが、野口先生が他界されて7年が経ち、またこの時期にChen先生のもとで勉強できることも何かのご縁だと、新たにメッシュフリー法に関する研究に着手しました。Chen先生との出会いは2001年12月10日まで遡ります。この日、慶應義塾大学で特別講演をするためChen先生が初来日されました。当時私はまだ修士課程2年生でしたが、講演会が始まるまでの数時間、Chen先生を横浜観光にお連れしたことが、その後長年の交流をもつきっかけとなりました。実はこの日の講演会では、

のちに佐賀大学でお世話になる萩原先生とも初めてお目にかかっています。今思えば、私のその後の20年間のキャリアは、このとき決定づけられたのかも知れません。そんなChen先生の研究室での1年間を終え帰国した後は、2019年度に松本敏郎部門長（名古屋大学）の下で部門副幹事、2020年度には高木周部門長（東京大学）の下で部門幹事を仰せつかり、計算力学部門の運営にも微力ながら貢献することができたのではないかと思います。

振り返ってみれば、本当にたくさんの幸運、そして多くの方のご縁に恵まれた20年間でした。ここに全てに皆様のお名前を挙げることは到底叶いませんが、多くの先生方や先輩方、共同研究者や研究室の学生の皆様のお力添えなくしては、そしてなにより、家族の支えと応援なくしては、ここまで研究を継続することはできず、本賞の受賞もあり得ませんでした。この場を借りて、心からの謝意を表します。一方で、今回の受賞はこれからも続く研究者としてのキャリアの、あくまでひとつの通過点であるとも肝に銘じております。これに奢ることなく、これからも計算力学部門の発展に貢献できるよう精進していく所存ですので、引き続きご指導・ご鞭撻の程をよろしくお願い申し上げます。



業績賞を受賞して

田中 智行
広島大学大学院先進理工系科学研究科

このたびは大変栄誉ある賞を頂き心から感謝いたしております。過去に受賞された先生方のお名前を拝見し、身の引き締まる思いです。これまで指導くださった先生方、同僚、友人、そして研究室の学生、卒業生に感謝いたします。今後さらに計算力学に関する研究に邁進し、国内外で活躍できる人材になるとともに、日本機械学会はじめ計算力学部門へ貢献すべく努めます。

私が初めて当部門に関わらせていただいたのは2002年に鹿児島大学で開催されました第15回計算力学講演会でした。計算力学とは多少異なる分野の研究室で修士課程学生であった私は現地の学生アルバイトとして講演室のタイムキーパーを担当しておりました。全国の著名な大学の研究者が地方に一齐に集う講演会を当時めずらしく感じました。担当していた講演室でも若手から中堅と思われる研究者が発表や質疑応答をスマートにこなしていることに刺激を受けるとともに、活発な意見交換がなされている会場を見て当部門の活気を感じたことを記憶しています。

私自身、もともと博士課程への進学を希望しておりましたが、修士課程終了時、当時の指導教員が栄転されるとのことで、別研究室で博士取得を目指すことにしました。そのとき新しい指導教員として推薦いただきましたのが当時鹿児島大学で助教授をされておりました岡田裕先生（現 東京理科大学・教授）でした。修士では混相流の実験的研究を主に行っておりましたので、博士課程から全く異なる研究分野での再出発になりました。

岡田先生にいただいた研究テーマは、周波数応答解析や画像処理等で用いられるウェーブレット関数を近似関数に用いた固体力学解析に関するものでした。この方法はボクセル法のように固定直交格子をベースにウェーブレット関数で空間解像度を制御し、応力集中部などを効率的に解析する方法です。当時、ウェーブレット関数を用いた固体力学解析に関する研究は世界的に見てもあまり多くなく、数値解析上の問題点や課題を一つずつ解決していくのが主な研究内容でした。

ちょうどその時代、エレメントフリーガラーキン法、Reproducing Kernel Particle Method、X-FEMと固体や構造物に対する新しい数値解析手法が欧米を中心に次々と提案され世界的な盛り上がりを見せていました。我々の提案する解析法は高解像度の関数を空間上に配置するだけで高精度な解析が可能です。メッシュ再分割のような作業も不要で解析モデル生成のコストを削減できる方法と考えることができます。そのことから講演会ではメッシュフリー法に関するセッションで発表する機会が多くありました。

国内ではこの分野でも故 野口裕久先生（慶応義塾大学・教授）が大活躍されていた時代でした。野口研でも過去に類似の研究に取り組まれていたこともあり我々の研究に興味を持っていただきました。研究を立ち上げて間もない時期だっ

たと思いますが、講演会で初めて野口先生に質問をいただいたときには身動きひとつできず何も答えられなかったことを記憶しています。研究が進むにつれて野口先生には講演会やメールを通して様々な助言をいただきました。さらに博士終了時には研究の本質に関わる宿題を頂き、その宿題に対して一生懸命準備しメールの返答を考え、最後に合格をいただけた際にはホッとするとともに非常に嬉しかったことを覚えています。結果、修士取得後、四年をかけて博士取得に至りました。

博士取得が見込まれたため就職活動を行っていましたところ、計算力学関連の複数の企業や研究機関および先生方から声をかけていただきました。その当時のことは今でも感謝しております。その一つに現在所属する大学の公募があり現在に至ります。着任した研究室には准教授として岡澤重信先生（現 山梨大学・教授）がいらっしゃいました。岡澤先生には非線形有限要素法から始まり、動的解析、座屈解析、オイラー型有限要素法と私にとって初めての研究テーマについて多く学ばせていただきました。当時の学生と一緒に切磋琢磨して勉強したことが自分の研究の幅を広げることになっています。また初めての教育職で、岡澤先生には学部や大学院教育に対する姿勢、研究室学生の指導ノウハウ、研究室運営の基礎を学ばせていただきました。

現在は計算力学の研究を行うとともに、鋼構造や溶接構造物の強度評価に関する研究テーマを多く扱っています。具体的には補剛板構造の圧壊解析の高精度化、圧力容器や海洋構造物で用いられる溶接継手の疲労破壊評価などです。対象物は非常に大きく載荷試験や耐久試験を行うことは簡単ではありません。数値解析だけで全てを解決できるわけではありませんが、まさしく実験や理論を補完する第三のツールとして計算力学で学んだ技術や知識が大いに役立っていると実感しています。

固体や構造に関する数値解析手法に関する研究も継続して行っております。解析対象を点や粒子で離散化する手法が多く、いわゆるメッシュフリー法や粒子法と呼ばれる研究領域になります。現在興味を持っている二つの手法を紹介します。一つは2000年に Silling¹⁾により提案された Peridynamics と呼ばれる方法です。この方法は物体を粒子で表現し、粒子間の相互作用力を用いて解析する方法です。脆性材料の破壊など物体がバラバラになるような解析を得意としますが、連続体としての解析精度や解析結果の粒子配置依存性など解決すべき問題も多く残っています。もう一つは、機械学習の一種である Deep Neural Network (DNN) を用いた構造解析です。2020年に Samaniego²⁾により提案されました。この手法も解析対象を点（学習点）で離散化し、弱形式をもとにDNNを用いて解を得る方法です。近年の機械学習研究および解析ツールの発展で解析の高速化や超大規模解析などに期待が持てる手法と思っています。どちら

の方法も世界中で精力的に研究が行われており今後の動向に注目しています。

デジタルものづくり, AIの普及, DXと設計や構造解析分野においても, ますます計算力学が必要とされている時代が来ていると思います。私自身ようやく研究者らしいことができるようになってきたと感じております。今後も, これまでの計算力学の枠組みにとらわれず, 時代に合った切り口で地に足を付けた研究や教育活動を行って参りたいと思っております。引き続き, ご指導ご鞭撻よろしくお願いたします。

- 1) S.A. Silling, Reformulation of elasticity theory for discontinuities and long-range forces, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 48 (2000), 175-209.
- 2) E. Samaniego, et al., An energy approach to the solution of partial differential equations in computational mechanics via machine learning: Concepts, implementation and applications, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 362 (2020), 112790.

特集：粒子法の進展



特集にあたって 「粒子法の進展」

柴田 和也
東京大学大学院工学系研究科

粒子法は、粒子と呼ばれる計算点の集合を用いて連続体や非連続体を離散化して計算する計算手法であり、機械工学、土木工学、船舶海洋工学、化学工学など様々な分野で活用が進み、数多くの論文⁽¹⁻⁵⁾が出版されている。書籍についても、MPS法の開発者の越塚先生の著書⁽⁶⁾や、粒子法の入門書⁽⁷⁾、近年に開発されたより高度な技術も含まれた粒子法の専門書^{(8),(9)}、さらにはMPS法の洋書⁽¹⁰⁾も出版されているなど充実してきた。

学術会議においても、例えば日本機械学会の計算力学講演会(CMD)において、粒子法に関するセッションが多く開かれており、研究発表が活発になされている。今年も日本機械学会 第36回計算力学講演会(CMD2023)⁽¹¹⁾が愛知県豊橋市で10月25日(水)～27日(金)の日程で開催予定であり、萩原世也先生(佐賀大学)、越塚誠一先生(東京大学)、浅井光輝先生(九州大学)がオーガナイザーの「粒子法/メッシュフリー法とその関連技術」というオーガナイズドセッションが予定されている。また、民間企業主催の粒子法に関する会議⁽¹²⁾も毎年開催されている。国際会議での研究発表と議論も活発であり、Particlesという粒子法の国際会議が開かれており、前回は2年前にParticles 2021⁽¹³⁾がドイツのハンブルクで開催された。今年もParticles 2023⁽¹⁴⁾がイタリアのミラノで開催される予定である。国際会議World Congress on Computational Mechanics (WCCM)においても多くの研究発表があり、WCCM 2022⁽¹⁵⁾では、粒子法に関するオーガナイズドセッションが10セッション開かれた。ヨーロッパではSPHERIC⁽¹⁶⁾というグループにおいて粒子法の1つであるSPH(Smoothed Particle Hydrodynamics)に関するワークショップが多く開催されている。

粒子法のシミュレーションプログラムも広く利用可能な状況であり、例えばMPS法のプログラムのソースコードは前述の書籍^{(6),(7),(10)}の付録として配布されている。また民間企業によりMPS法の商用コード⁽¹⁷⁾が販売されている。SPHのプログラムのソースコードはSPHERICのグループのホームページ⁽¹⁶⁾で配布されている。

今回の特集「粒子法の進展」では、粒子法に関して第一線で研究開発されている研究者の皆様が執筆いただいた。執筆者の所属は、大学、国立研究開発法人、産業界と様々であり、様々な視点から粒子法の進展について論じていただいた。ここで各記事の筆頭著者の皆様を僭越ながら紹介したい。まず、九州大学の浅井光輝先生は日本機械学会の計算力学講演会(CMD)において粒子法に関する多くのセッションを企画し、粒子法の専門書⁽⁸⁾を執筆されている方である。次に、JAXAの根岸秀世様は、航空宇宙における潤滑問題において粒子法を活用した研究を非常に活発にされている。(株)デンソーの服部豪様は、粒子法に

よる濡れ計算モデルを開発し、液滴が壁面を滑落する現象を高精度に計算可能にした。また、粒子法に関する研究で博士号を取得されている。産業技術総合研究所の近藤雅裕様は、物理的健全性をもったMPH (Moving Particle Hydrodynamics)という新しい粒子法を開発した。また粒子法の表面張力モデルなどの多くの粒子法に関する研究論文を発表している。筑波大学の三目直登先生は、粒子法の高精度な壁面モデルや、粒子法の領域分割型並列計算手法、座標変換を用いた境界適合な粒子法を開発した方である。東京大学の松永拓也先生は移動サーフェスマッシュを用いた粒子法など、高精度な粒子法の計算手法と境界条件に関する多くの論文を発表している。

本特集記事にあたり、執筆者の皆様、日本機械学会計算力学部門の皆様、佐賀大学の萩原世也先生にご尽力いただいたことに感謝申し上げます。ありがとうございました。

参考文献

- (1) M. Sakai, et al., "Recent progress on mesh-free particle methods for simulations of multi-phase flows: A Review", KONA Powder and Particle Journal, Vol. 37, p. 132-144 (2020)
- (2) Gen Li, et al., "A review on MPS method developments and applications in nuclear engineering", Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Vol. 367 (2020)
- (3) Vacondio R., et al., "Grand challenges for smoothed particle hydrodynamics numerical schemes", Comp. Part. Mech., Vol. 8, p. 575-588 (2021).
- (4) Ting Ye, et al., "Smoothed particle hydrodynamics (SPH) for complex fluid flows: Recent developments in methodology and applications", Physics of Fluids, Vol. 31, 011301 (2019)
- (5) Paul Groenenboom, et al., "Recent features and industrial applications of the hybrid SPH-FE method", International Journal of Computational Fluid Dynamics, Vol.35:1-2, p. 106-128 (2021)
- (6) 越塚誠一, "粒子法 (計算力学レクチャーシリーズ)", 丸善出版 (2005)
- (7) 越塚誠一, 柴田和也, 室谷浩平, "粒子法入門", 丸善出版 (2014)
- (8) 浅井光輝, "明解 粒子法SPH, MPS, DEMの理論と実践", 丸善出版 (2022)
- (9) 後藤 仁志, "粒子法:連続体・混相流・粒状体のための計算科学", 森北出版 (2020)

-
- (10) S. Koshizuka, K. Shibata, M. Kondo and T. Matsunaga, "Moving Particle Semi-implicit Method, A Meshfree Particle Method for Fluid Dynamics", Academic Press (2018)
 - (11) 日本機械学会 第36回計算力学講演会 (CMD2023) <https://www.jsme.or.jp/conference/cmdconf23/>
 - (12) Prometech Simulation Conference, <https://www.prometech-sc.com/>
 - (13) Particles 2021, <https://particles2021.cimne.com/>
 - (14) Particles 2023, <https://particles2023.cimne.com/>
 - (15) World Congress on Computational Mechanics (WCCM) 2022, <https://www.wccm2022.org/>
 - (16) SPHERIC, <https://www.spheric-sph.org/>
 - (17) Particleworks, <https://www.particleworks.com/index.html>



粒子法による流体・固体・粉体、それらの統合解析に向けた現状

浅井 光輝
九州大学大学院・工学研究院社会基盤部門

1. はじめに

著者は、もともと有限要素法 (Finite Element Method: FEM) をベースとしたコンクリートの破壊/き裂進展解析法の開発を中心とした計算力学の研究者であった。当時 (2000年代初頭)、特にき裂の三次元進展時におけるき裂の三次元幾何を“面 (メッシュ)”として表現することに限界を感じ、粒子法あるいはメッシュレス法に興味を抱いていた。その後、特に2011年の東日本大震災を契機に、自然の力による構造物の破壊・崩壊現象を表現し、災害の被害規模を想定できる新たなシミュレータを作成することを志し、流体-構造 (固体)、そして今回の記事の中心となる地盤を含んだマルチフィジックス粒子法の開発に注力してきた。つまり、経歴としては、固体力学の数値計算屋さん、固体の破壊現象を含んだ流体と構造の連成解析を目指し、流体解析を始めた。そして、流体解析としては垂流な粒子法に手をだした。恐らく、いまでは粒子法を使って流体解析を行っている研究者として認知していただいた?と自負している。研究歴の紹介はここまでとし、粒子法による研究成果をまとめ、2022年に丸善から「明解・粒子法 ~ SPH, MPS, DEMの理論と実践~」を出版した。ここでは、著書で伝えたかった内容である、固体計算をベースとした研究者の視点からみた粒子法の特徴をコンパクトにまとめて紹介する。

2. 粒子法の空間離散化の考え方 (なぜ流体解析では成功?)

連続体モデリングを基礎とする粒子法 (SPHおよびMPS) は、FEMと同様に、計算機上での仮想的な点を使って連続体の変形を記述する。FEMでは、ラグランジュ記述により記述する連続体の変形をそのままメッシュ (要素) の変形として表現する。つまり、メッシュを構成する点は、物体内部に配置するラグランジュ表記される仮想な点であり、ここではラグランジュ節点と呼ぶことにする。メッシュがあることで伸びる・歪むといった変形状態を直接的に表現できるといった利点がある一方で、大変形時にはメッシュがねじれてしまい計算精度が悪化する、あるいは要素内部で発生するき裂はそのままでは表現できないとの問題が残る。そこで、メッシュという存在を捨て、ラグランジュ節点のみを使った手法が粒子法である (FEM/粒子法の違いは支配方程式の弱形式化の有/無にもあるが、ここでは詳細な説明は割愛)。ただしSPH・MPSなどの粒子法も、連続体として物体をモデル化する方針であることには変わりなく、実験よりモデル化した経験的な構成則により応力を評価する。つまり、固体であればひずみ (変形の空間勾配)、流体であれば速度勾配 (流速の空間勾配) を評価しなければならない。そこでSPHでは、近傍の粒子を定義し、自身と近傍の粒子を使って勾配などの微分オペレータを近似することで空間離散化する。一般的なSPH法では、スカラー関数 ϕ またはベクトル関数 $\boldsymbol{\phi}$ に対する勾配、発散、ラプラシアンには、以下の離散微分モデルが用いられる。

$$\langle \nabla \phi \rangle_i := \sum_j V_j \phi_{ij} \nabla w_{ij} \tag{1}$$

$$\langle \nabla \cdot \boldsymbol{\phi} \rangle_i := \sum_j V_j \boldsymbol{\phi}_{ij} \cdot \nabla w_{ij} \tag{2}$$

$$\langle \nabla^2 \phi \rangle_i := 2 \sum_j V_j \phi_{ij} \frac{\mathbf{x}_{ij} \cdot \nabla w_{ij}}{|\mathbf{x}_{ij}|^2} \tag{3}$$

ここで $\phi_{ij} = \phi_j - \phi_i$ である。また、 w_{ij} は粒子 $i - j$ の距離に依存する規定の重み関数である。SPHではユニティ条件を満たすように調整したスプライン関数などが選択されることが多い。

SPHだけでなくMPSを含む標準的な粒子法では、規程のカーネル (重み関数の定義域) と規定の重み関数を使うため、粒子が規則的かつ等間隔に配置されている場合にのみ計算精度が保証され、変形に伴い粒子配置が乱れることで必然的に精度が悪化する。また領域袖部では、ユニティ条件を満たすことができなくなるため、流体解析では壁粒子を配置することが必須となる。そこで最近の粒子法、特に流体解析においては、粒子の再配置を行いながら解析を行う粒子再配置法 (シフティング) を併用することが常套手段になってきている。このシフティングとは、物理的な物質点ではなく、計算のため設定した仮想的な点の位置を変更していることから、一種のALE記述 (ラグランジュ記述とオイラー記述の中間のような存在) として考えてよい。それではなぜ、そもそも固体の破壊解析を含む一般的な解析手法として期待した粒子法が、そのほとんどが流体の解析に留まってしまっているのか、疑問が残る。

3. 粒子法の空間離散化の考え方 (なぜ固体解析では苦戦?)

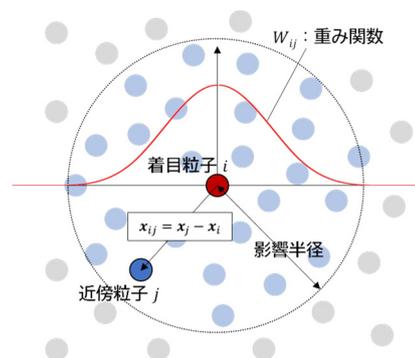


図-1 SPHにおける円形カーネルで定義される重み関数

前述のシフティングを固体解析へ適用することを考えてみよう。可逆的な弾性体であれば、シフティングの直接的な応用が可能であろう。しかし、履歴依存する不可逆的な挙動を示す弾塑性体においては、さらなる工夫が必要となる。弾塑性体においては、変形履歴がその後の応力評価に影響を与えるため、好き勝手に計算点の位置を変更してはいけない。そこで、速度型の構成則を使った亜弾塑性型の弾塑性モデルにより、シフティングを

回避した計算事例²⁾もある。このとき、人工粘性、人工応力等による安定化と併用しなければならないようであり、まだ一般的な弾塑性解析手法としては改良の余地が残されている。シフティング以外に、粒子が乱れた状態でも勾配を高精度に評価する方法として、従来通りの固定したカーネル関数を使うのではなく、その場に応じたテイラーメードの重み関数を使用する技法も整備されつつある^{3), 4)}。この種の微分オペレータの高精度化が今後、弾塑性解析にも有効になるものと期待している。

ここで、一般的なSPHおよびMPSでは、ラグランジュ節点から一定の範囲内の影響半径にある近傍粒子を使って、両者の距離に応じた既定の重み関数を使うのに対して、ここで紹介したテイラーメードの重み関数とは、近傍粒子の分散状況をみて、配置に応じた重み関数を粒子毎に設定する。これには、移動最小自乗近似を使い既定の重み関数に補正を加えるモデル³⁾、あるいはSPHの微分モデルを1階と2階微分に分離し両者の離散微分モデルがテイラー展開の高次項を含むように定式化する方法⁴⁾などがあり得る。いずれにせよ、これらは物質点の移動に伴い動くラグランジュ節点から、変形を考慮しない不変な(オイラー的)カーネル内で重み関数を設定していることになる。越塚はCMDニュースレター No.65の記事において、これをオイラーカーネルと呼んでいる。この呼称に従えば、「テイラーメードの重み関数は、ラグランジュ節点の各時点での分散状況を加味し、高精度なオイラー重み関数をアダプティブに設定する方法」と位置づけできる。

一方で、FEMにより固体変形を解くには、解析モデルを作成した際に、ラグランジュ節点の配置と同時に節点の接続情報をコネクティビティと呼び要素を設定する。ラグランジュ節点は変形と伴に移動するため、必然的に要素も変形する。つまり、要素内の近似関数を設定する空間にも歪みが生じるはずである。これをこれまでの議論で説明してきた重み関数の考え方で説明すると、「FEMはラグランジュ節点の移動に併せて、変形を考慮したラグランジュ重み関数を設定する方法」と考えてよい。FEMと同様に、ラグランジュ重み関数の概念を使い、粒子法で固体の大変形解析に成功した手法が最近登場している。これが、Total Lagrange SPH法⁵⁾(以降、TL-SPHと略記)である。TL-SPHでは、解析前にラグランジュ節点をできるだけ均等に分配させ、固体の変形開始前の状態を使い、近傍粒子ペアを固定する。この粒子のコネクティビティは、固体変形中は更新しない。このままラグランジュ記述に従って計算をすれば、変形に併せて重み関数を定義するカーネルを回転楕円体として定義し、その中でラグランジュ重み関数が設定できるであろう(図-2参照)。ただし、この

回転楕円体内で定義するラグランジュ重み関数の更新が少々面倒であるため、TL-SPHでは、全体ラグランジュ記述で固体を解くことを採用した。固体の変形を定義する参照配置を変形前状態に固定し、各時刻での現配置の固体状態をラグランジュ節点で記述する。そして、現在の応力を変形前の状態に投影した第1ピオラーキルヒホッフ応力を使い、固体のつり合い状態を評価している。つまり、「TL-SPHでは全体ラグランジュ記述と少し変わった応力を定義することで、変形を陽に再現したラグランジュカーネルを使わずにそれと等価なオペレーションを実現」している。ただし、賢明な読者なら気が付くように、不可逆性が重要な特性となる弾塑性体への直接的な拡張は容易ではなく、今後は現配置でのつり合いを評価する更新ラグランジュ記述に従う大変形固体用の粒子法も必要となると予想する(図-2参照)。

粒子法は、物質点の移動に伴いラグランジュ節点のみを使う方法であり、流体だけでなく、固体の大変形も解く可能性を秘めていることは理解していただけたのではないだろうか。流体と固体の違いは、応力を与える仕組み(構成則)であり、瞬間の流速が必要なのか、それとも初期状態からの変形が重要なかが一番の違いである(図-3参照)。それに併せて、オイラー重み関数を使うのか、ラグランジュ重み関数を使うべきなのか理解できる。以降では、ラグランジュ節点を使った粒子法独自の解析例を2つ紹介する。

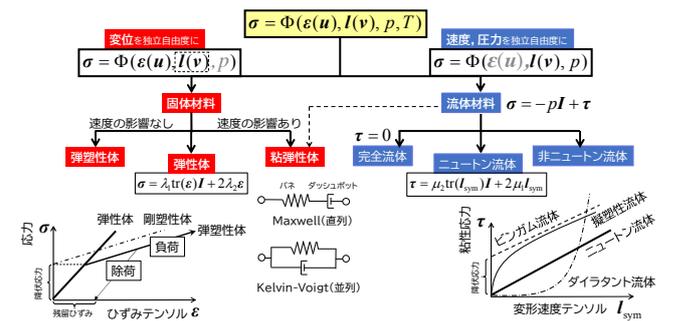


図-3 固体および流体における材料構成則の役割と分類

4. 固体から粘性流体への変相変化(状態変化)

はじめの例題は斜面崩壊の解析例である。たとえば、粒状体地盤に適した粘性流体としては $\mu(I)$ レオロジーといった非ニュートン流体モデルが知られている。それ以外にも、ビンガムモデルといった単純な非ニュートン流体で地盤の流動をモデル化する事例も多い。この際、いつ・どこで・どの程度の規模の地盤が流動化するかを事前に知らなければならない。

そこで著者らが実施したのが、固体・粘性流体の相変化解析⁶⁾である。大変形前の弾塑性状態をSPH法により解析し、流動化後の挙動のみを非ニュートン流体モデルによる流体解析へと相変化した。現状では、相変化の基準として塑性ひずみを使用した単純な基準を採用しており再検討する余地があるものの、熊本地震時の地すべり現象などの再現性に優れていることを示した。このとき、流動化した地盤に対応した流体解析では、固体状態の粒子は変形速度が流体粒子と比べて十分に小さいため、固定壁粒子として扱っている。すべり面上の流動化した地盤が液体ベアリングとして作用することで、その上層部にある安定化した地盤はほぼ剛体的に移動していく過程が表現できている(図-4参照)。

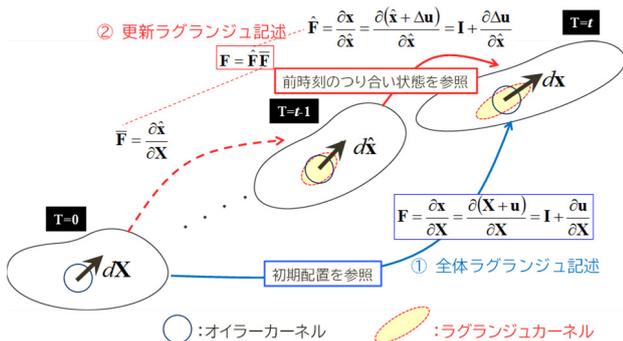


図-2 大変形固体解析におけるラグランジュ記述およびカーネルの相違

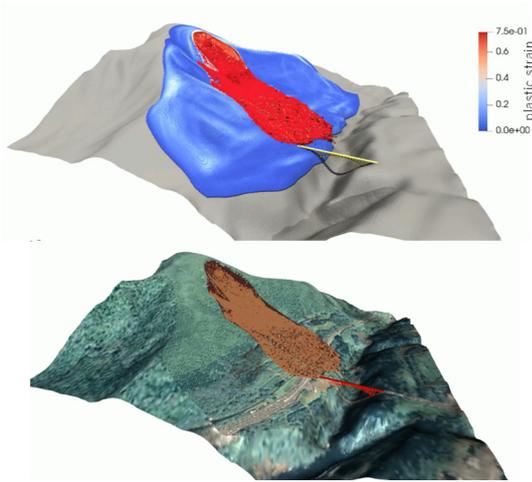


図-4 相変化型SPHによる熊本地震時の阿蘇の斜面災害の再現シミュレーション⁶⁾

以上、相変化の過程を粒子法によりシームレスに解くことができたのは、流体状態の地盤もラグランジュ記述で解いたからである。その恩恵を受け、ある一定の体積を代表する粒子が変形量だけでなく、固体/流体などの変形履歴を保有でき、各状態に対応した材料構成則を適用することで相変化解析が実行できた。

5. 流体と地盤（粉体）の連成解析

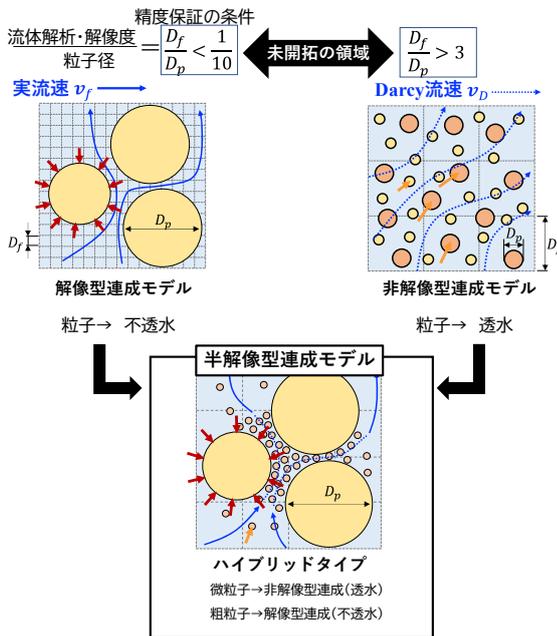


図-5 土粒子と流体の連成解析の分類

地すべり・土砂崩壊などの広範な領域は上記の連続体近似をしない限り、効率的な解析は困難である。一方で、河川堤防・防波堤などの一部であれば、地盤を離散体解析用の粒子法である個別要素法（DEM）でモデル化し、浸透流を含む流体をSPH法で解く流体-地盤の連成解析が「実施」できる。ただし、浸透流を解くには、土粒子と流体の連成方法の違いを理解し、土粒子の運動をどの程度正しく再現できるモデルを採用しているのかを把握することが高精度計算への近道である。ここでは、図-5で分類したように、解像型連成、非解像型連成、そしてその両者の

中間的な存在であるハイブリッドタイプの半解像型連成モデルを整理する。

(1) 解像型連成モデル

DEMの最大の利点は、粒子間の単純な相互作用モデルのみを使用し、複雑な地盤内での素過程を表現できることにある。粒子混相流を対象とし、DEM粒子の動きを移動境界として設定し、DEM粒子の形をそのまま解像させた流体解析を行えば、粒子を解像した混相流の解析が行える。これが「解像型連成モデル」である。つまり、土粒子に作用する圧力分布を的確に表現できるだけの空間解像度を有していれば、経験則を用いることなく、圧力を土粒子表面での表面積分を施すことで流体力（抗力および揚力を含むすべての力）が計算できる。この際、粒子の形を再現することがDEMに求められるため、球形DEM粒子をクラスター状にすることで任意形状の粒子を再現することがある。図-6では、SPHとクラスター状の球DEMを連成させた解像型連成モデルの解析例⁷⁾を示す。解像型連成モデルによる解析では、球体であれば粒子径の1/10程度以下の空間解像度が必要とされており、計算コストが膨大となることが問題となることが多い。

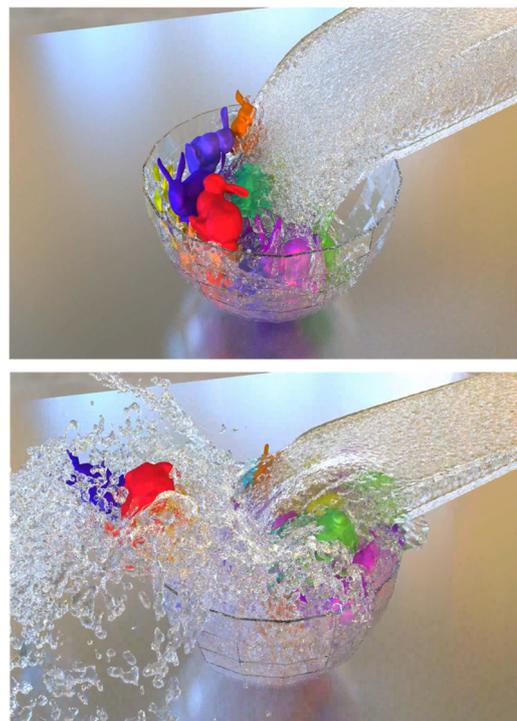


図-6 解像型連成モデルによる流体-剛体連成解析例

(2) 非解像型連成モデル

地盤内の流体の平均的な動きに着目すれば、前述の解像型連成モデルのように土粒子の影響を数値解析のみで直接評価しなくても、ダルシー則などの経験則を介することで効率的に評価できるであろう。このダルシー則（あるいは拡張ダルシー則）をそのまま非定常な問題に拡張し、一般的な流体の支配方程式であるNavier-Stokesと統合させたDarcy-Brinkman方程式を使った解析を行うのが「非解像型連成モデル」である。粒子群に作用する流体から抗力を経験的に評価し、その反作用を流体に作用する外力として作用させるモデルが非解像型連成モデルである。この連成解法の基礎方程式は、一般的な数値流体シミュ

レーションとDEMとの連成だけでなく、今回の記事で取り扱った粒子法であるSPH（流体）とDEM（地盤）の連成⁸⁾にも適用できる。ここで問題となるのが、経験則である抗力モデルの選択である。一般的には、土粒子の間隙率の関数として表現され、多数のモデルが提案されている。著者らはすべてのモデルを試し、その優劣を評価したことはない。ただ、粉体工学の分野でWen-Yuら⁹⁾が指摘しているように、粒子群が土骨格を形成した状態と粒子が離散的に分布している状態など、土粒子の凝集あるいは分布状態に応じて抗力モデルを使い分けるべきであろう。

辻ら⁸⁾が非解像型連成モデルによるSPH-DEM解析で防波堤マウンドのパイピング破壊現象を解いたところ、標準的な抗力モデル（あるいは浸透モデルと考えてもよい）ではパイピング現象で見られるような吹き出し、後退侵食などの激しい現象の再現までには至らなかった。そこで、パイピング現象の巨視的な破壊判断基準としてしばしば参照されるテルツァギーの限界導水勾配を導入した改良モデルにより、実験と整合した予測を可能とした（図-7参照）。つまり、ダルシー則が基礎となる浸透流モデルは土骨格を成す粒子が自立して安定している状態で計測された経験則であり、土粒子が流れる状態までを包含できるだけの一般性・汎用性がない可能性を指摘した。経験則に頼る以上、その限界を知ったうえでその範囲内で適切に利用すべきとの教訓を得た。

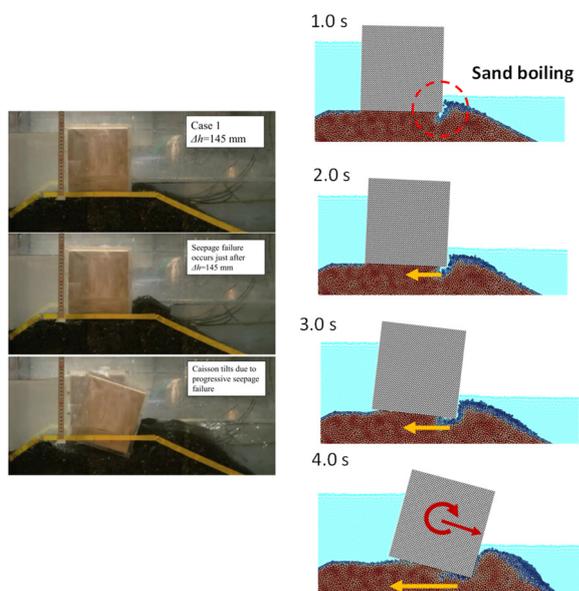


図-7 防波堤のパイピング破壊実験と非解像型連成モデルによる再現解析例⁸⁾

(3) 半解像型連成モデル

地盤は、粒度分布を制御することで、特性をガラリと変化させることができる材料である。一方で、非解像型連成モデルで使用する地盤の抗力モデル（透水係数モデル）では平均粒径と間隙率が主なパラメータとなった式が大半であり、経験的に熟知されている粒度分布の影響が加味されていないといった矛盾が残されている。この経験知を反映できるモデルとして期待しているのが、解像型と非解像型の両者を組み合わせた半解像型モデルである。これは、まだ世界的にも研究が始まった段階であり、今後、流体-地盤（あるいは粉体）の連成解析を行う上での新たなブレークスルーを与える可能

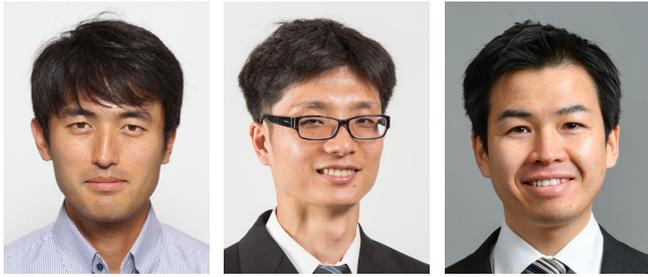
性があるテーマであると考えている。

6. おわりに

今回の記事を通して、連続体の解析手法としての粒子法を使い、流体・固体・粉体、そしてそれらを統合した解析に向けた現状について、主に著者らの最新の研究実績に沿って解説した。現状の粒子法を正しく把握して運用すれば、特に流体のみであれば、ほかの数値解析技術と同程度に現象を事前予測するまでのツールとして使用できるところまで、発展してきている。そして粒子法は、流体だけでなく、複数の物体が混在したマルチフィジクス解析で活躍する手法と考えている。本解説が粒子法のさらなる発展に少しでも寄与できれば幸いである。

参考文献

- 1) 浅井光輝：明解・粒子法～ SPH, MPS, DEMの理論と実践～, 丸善, 226p., 2022.
- 2) Ma, G., Bui, H. H., Lian, Y., Tran, K. M. and Nguyen, G. D. : A five-phase approach, SPH framework and applications for predictions of seepage-induced internal erosion and failure in unsaturated/saturated porous media, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 401, 115614, 2022
- 3) Matsunaga, T. and Koshizuka, S. (2022). Stabilized LSMPS method for complex free-surface flow simulation. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 389, 114416
- 4) 藤岡秀二郎, 辻勲平, 浅井光輝: 高精度SPH法 ～空間2次精度の勾配・ラプラシアン・混合微分～, *土木学会論文集*, Vol. 79, No. 15, 22-15019, 2023.
- 5) Morikawa, D. S., and Asai, M.. Coupling total Lagrangian SPH-EISPH for fluid-structure interaction with large deformed hyperelastic solid bodies. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 381, 113832, 2021.
- 6) Morikawa, D. S. and Asai, M. : A phase-change approach to landslide simulations: Coupling finite strain elastoplastic TLSPH with non-Newtonian IISPH, *Computers and Geotechnics*, Vol. 148, 104815, 2022.
- 7) Asai, M., Li, Y., Chandra, B. and Takase, S. : Fluid-rigid-body interaction simulations and validations using a coupled stabilized ISPH-DEM incorporated with the energy-tracking impulse method for multiple-body contacts, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 377, 113681, 2021.
- 8) Tsuji, K., Asai, M. and Kasama, K. : Seepage failure prediction of breakwater using an unresolved ISPH-DEM coupling method enriched with Terzaghi's critical hydraulic gradient, *Advanced Modeling and Simulation in Engineering Sciences*, Vol. 10, Article 1, 2023.
- 9) Wen, C. Y. and Yu, Y. H. : A generalized method for predicting the minimum fluidization velocity, *AIChE Journal*, Vol. 12(3), pp. 610-612, 1966



粒子法の流体潤滑問題への応用

根岸 秀世 宇宙航空研究開発機構 (左)
 近藤 雅裕 産業技術総合研究所 (中)
 柴田 和也 東京大学 (右)

1. はじめに

Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) 法^[1,2]やMoving Particle Simulation (MPS) 法^[3]に代表される粒子法は、メッシュフリーのラグランジュ法であり、格子法と比べて移動境界問題の扱いに優れている。また、流体に限らず、剛体や弾塑性体等の固体についても同様の計算原理が適用可能で、マルチフィジックスの計算に向いている利点もある。そのため粒子法の研究は、大変形を伴う自由表面流れ、混相流、流体-剛体連成、流体-構造連成問題等を対象に盛んに行われている。近年では、原子力工学、土木工学、船舶海洋工学、機械工学などの多岐にわたる分野において格子法では困難であった計算が可能となっており、産業利用が拡大している^[4-9]。

機械工学分野に関しては、特に流体潤滑問題への適用がブレークスルーとなっている。Ji et al.^[10]はギアボックス内の潤滑油挙動をSPH法で再現し、内部流動場を明らかにしている。武藤ら^[11]は簡易ギアボックス内の低回転時におけるオイル攪拌抵抗値をMPS法により評価している。Yuhashi et al.^[12]は回転するカムシャフトの攪拌抵抗をMPS法で予測し、実験結果を良好に再現している。油橋ら^[13]は往復動ポンプクランクケース内のオイル飛散挙動をMPS法で評価し、クランクケース形状の工夫により潤滑性能が改善することを示している。これらは複雑形状を有する機械要素内自由表面流れのマクロスケール解析であり、粒子法の利点を活かしたものである。

流体潤滑の肝である摺動部(固体壁同士が潤滑膜を介して接触する部分)近傍に着目したミクロスケールの解析も近年取り組まれている。Kyle and Terrell^[14]は傾斜平面軸受を対象に非定常な流体潤滑特性の評価をSPH法で行い、解析解や格子法の計算結果との比較を通して妥当性を議論している。田中ら^[15]もKyleらと同様の傾斜平面軸受を対象にSPH法の解析を行い、圧力分布を再現できることを示している。Tanaka et al.^[16]は線接触流体潤滑問題を対象にSPH法に表面張力モデルを組み合わせ、摺動部出口メナスカスと圧力分布をおおよそ再現している。Paggi et al.^[17]はスライダ軸受を対象にSPH法をベースとした流体-剛体連成解析手法を構築し、摺動部で発生する圧力分布について解析解とおおよそ一致する結果を得ている。また表面粗さを直接的に考慮した形状モデルを用いた流体潤滑解析も可能であることを示している。畠中ら^[18]は、同心ジャーナル軸受の内側隙間油膜を対象に、膜厚方向に縮退したNavier-Stokes方程式にLSMPS法^[19]を適用し、駆動トルクを理論解と同様に予測できることを示している。しかしながら、これらの研究を俯瞰すると、格子法^[20-25]に比べて全般的に粒子法のミクロスケールの解析適用は遅れており、解析対象も単純な系に終始し、適用可能性に関する議論は十分ではない状況となっている。

以上の状況を踏まえ、JSPS科研費(17K06137, 21K03847)

による助成のもと、著者らも2017年より粒子法の流体潤滑問題への応用研究を進めてきた^[26-39]。粒子法の利点を活かし、機械要素内のマクロ・ミクロの流体潤滑問題を統一的に解析し、現象理解と潤滑特性評価を可能とする解析技術の獲得を目指している。本報では、研究背景と課題、これまでの取り組みを概説し、今後の展望について紹介する。

2. 研究背景と課題

ほとんどの産業機械が回転機構を有しており、これを支えている重要機構部品が転がり軸受である。図1に転がり軸受の概要図と関連する物理現象を示す。図1に示すように、転がり軸受は内輪、外輪、転動体(玉やころ)、保持器で構成され、これらの部品の固体壁同士が直接接触しないように、十分な厚みの流体膜(潤滑膜と呼ばれ、通常は油またはグリースを使用する)で隔てて動作させることで低摩擦を実現する。近年では、カーボンニュートラルなどの省資源/省エネルギー化に向けた社会的要請に伴い、低摩擦化、小型軽量化、長寿命化等への要求が高度化している^[40-42]。これらの要求に対しては、摺動部における潤滑膜のミクロな挙動だけでなく、転がり軸受全体におけるマクロな潤滑膜挙動と、内輪、外輪、転動体、保持器等の相互干渉も考慮し、潤滑膜分布や摩擦損失等を把握し制御する必要がある。転がり軸受全体におけるミクロ・マクロの潤滑膜挙動の把握は、計測手段の制約から実験では難しく、近年ではComputational Fluid Dynamics (CFD) への期待が高まっている^[43]。

転がり軸受内部では、図1に示すように種々の物理現象が内在する。ミクロな現象については、転動体-内輪もしくは転動体-外輪間の隙間は非常に薄く(通常 $0.1 \mu\text{m}$ オーダー)、潤滑膜内にはGPaオーダーの高圧が発生し、潤滑部では固体壁面に弾性変形が生じることが特徴である(流体潤滑の中でも弾性流体潤滑と呼ばれる)^[44]。高圧部では、粘性係数や密度が圧力に依存して変化し、非ニュートン性や粘弾性が顕在化する(潤滑剤にグリースを用いる場合は、そもそも非ニュートン性を伴う)。潤滑

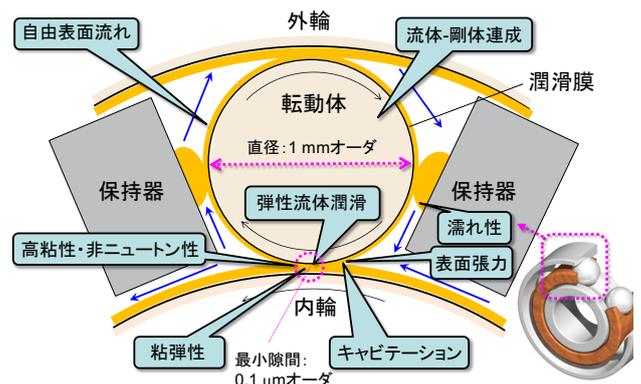


図1 転がり軸受の概要図と関連する物理現象

部下流では、末広がり形状に伴い周囲圧力より圧力が低下する負圧が発生し、潤滑剤の飽和蒸気圧を下回るとキャビテーションが発生する^[45]。潤滑部近傍や固体壁上では表面張力や濡れ性も無視できない。軸受内部のマクロ流れとしては、潤滑膜が自由表面流れとして分布しており、転動体は潤滑膜を介して各部から力を受けるため流体—剛体間の干渉を受けながら、内輪と外輪の間で転がり運動を行う（条件によっては滑りも生じる）。なお、実際は熱的な問題も伴うが、本稿では対象外とする。以上述べた様に、転がり軸受内は流体—剛体連成、流体—構造連成を伴うマルチフィジックス環境であり、転がり軸受全体におけるマイクロ・マクロの潤滑膜挙動をCFDで解析評価するためには、これらの物理現象を考慮したマルチフィジックス解析が必要となる。

3. 粒子法の適用検討

3-1. 転がり軸受内のマクロ流れ解析^[27,28]

研究開始当初、まずは粒子法の得意技とも言える複雑形状におけるマクロ流れ解析の有用性や、流体潤滑問題への適用に向けた課題抽出を目的として、転がり玉軸受全周を対象にした解析を試行した。粒子法にはMPS法を採用し、拡散数による時間刻み制約を緩和するため、粘性項と圧力項ともに陰解法で計算した。

解析対象は、図2に示すような内輪内径15 mmの宇宙機用アンギュラ玉軸受とし、内輪、外輪、転動体（10個）、保持器で構成される。なお計算負荷低減のため実物の1/10サイズとした。この場合、転動体直径は約0.6 mm、内輪内径は1.5 mm、外輪外径は3.2 mmである。最小隙間となる転動体と内輪および外輪の摺動部は、通常1 μm程度のところを10 μmに拡大した。本解析では、外輪を静止座標系に固定し、内輪を回転軸周りに100 rpm一定の回転数を与えて自転させた。この内輪の自転に伴い、転動体、保持器の自転や公転も一定の回転数を与えて考慮した。潤滑剤

（作動流体）はグリースとその基油（グリースに含まれる油成分）の2ケースとし、基油は粘性係数一定、グリースは非ニュートン特性として粘性係数のせん断速度依存性を考慮した。

初期のグリースは、図3に示すように初期粒子間距離2.5 μmで内輪壁面上に約20粒子層分（厚みで50 μm）配置した。この時、転動体と内輪および外輪の最小隙間は4粒子で解像され、計算領域全体の流体粒子数は約1600万粒子であった。計算では固体壁をポリゴン壁モデルで与え、滑りなしとした。内輪等の回転部の自転と公転は強制変位として与え、流体—剛体間の相互作用は考慮しなかった。また、本計算では重力加速度や表面張力も単純化のため考慮しなかった。計算の時間刻みは $\Delta t = 1.0 \times 10^{-5}$ sとした。MPIにより252コアの並列計算を実行し、実時間1 s間の計算に要する時間は約14日であった。

図4に回転開始から1秒後のグリースおよび基油分布を示す。解析結果から、グリースのマクロな挙動としては、転動体による攪拌効果が支配的であり、初期のグリース膜が転動体に付着ないし攪拌され、グリース分布が形成されていく様子が確認された。特に玉軸受内部の3次元形状の影響と非ニュートン性により、グリースでは基油に対して初期の膜厚から薄くなる場所と逆に厚くなる場所が顕著に現れる結果が得られた。

本解析を通して、粒子法の流体潤滑問題適用に向けて3つの課題を認識した。1つ目は、計算コストである。本検討では、計算負荷低減のため実物の1/10サイズとし、最小隙間は通常の10倍に拡大した。実物の計算を実施する場合、最小隙間1 μmに今回同様4粒子入れるとしたときの粒子間距離は0.25 μmで現状の1/10、粒子数は10³倍が必要となる。また、軸受の空間サイズは各方向10倍となるため体積では10³倍となり、単純に見積ると現状1600万粒子の10⁶倍の粒子数、すなわち10兆オーダーの粒子が必要となり、非現実的な計算コストとなる。この課題については、粒子解像度を場所により変更することなどが有効であると考え

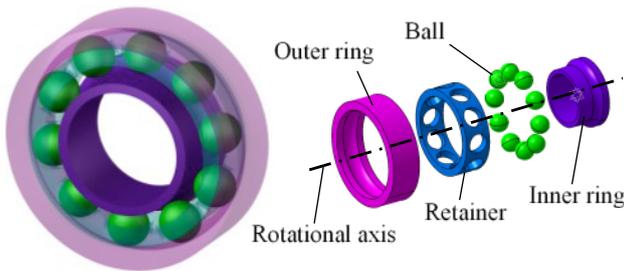


図2 転がり玉軸受マクロ流れ解析の形状モデル^[28]

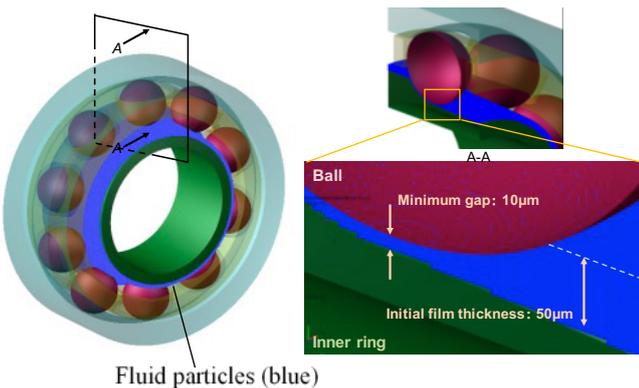
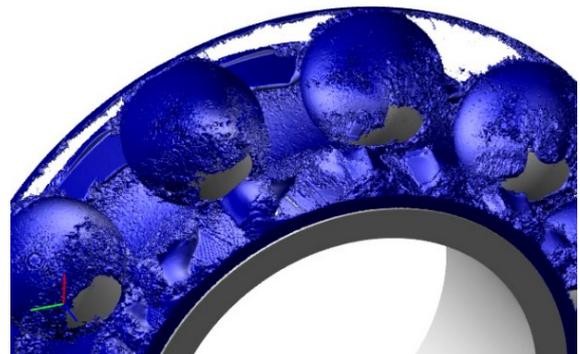
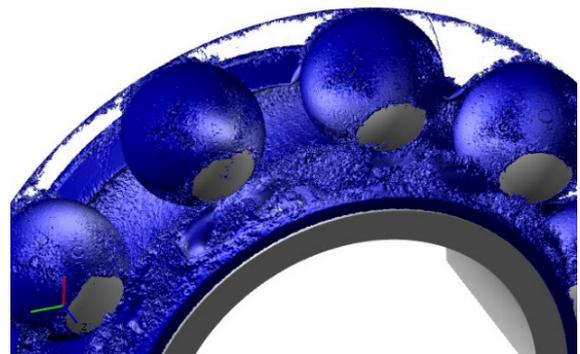


図3 流体粒子の初期配置^[28]



(a) グリースの場合



(b) 基油の場合

図4 回転開始から1 s後のグリースおよび基油分布^[28]

られる。2つ目の課題は、各種物理モデルの構築・整備である。本検討では、図1の自由表面流れの解析を実施したに過ぎず、表面張力や各種連成問題、さらには潤滑メカニズムである弾性流体潤滑に係る物理モデルを組み合わせたマルチフィジクス解析を実現する必要がある。3つ目の課題は計算結果の検証である。図4で得られたような計算結果の検証には実験データが不可欠であり、さらに定量的な検証をどのように実現するかが大きな課題である。

3-2. 流体潤滑の基本メカニズムへの適用と検証^[29,32,34]

実際の流体潤滑問題に対する粒子法の適用に向けては、基礎的な流体潤滑メカニズムである“くさび膜効果”と“絞り膜効果”^[144,46]を再現できる必要がある。ここではこれら基礎的な流体潤滑問題にMPS法を適用し、理論解と比較検証した結果を紹介する。

図5は、円弧軸受を対象にした油膜における純滑り条件でのくさび膜効果（最小油膜厚さ400 μm）の計算結果である。出口隙間（最小隙間部）が入口隙間よりも小さいために、流出流量の方が流入流量よりも小さくなり、隙間内では上流から流体粒子が押し込まれてくることで粒子数密度が増加し隙間内に圧力分布が発生している。これはすなわち、くさび膜効果が再現できていると言える。図6は、MPS法による種々の初期粒子間距離 l_0 での計算結果とReynolds方程式による理論解との圧力分布比較結果である。図から明らかなように、MPS法の結果では $l_0 = 50 \mu\text{m}$ 以下でほぼ理論解を再現しており、粒子解像度に依らず同等の収束解が得られることが確認された。本検討では、最小油膜厚さは400 μmであるため、解像度に依らない解析結果を得るには、最小油膜厚さに対して最低でも8粒子は必要であることが確認された。さらに既報^[34]では、類似の円弧軸受を対象に可変解像度手法の一つである重合粒子法^[47]を適用し、圧力分布を再現した。潤滑部に

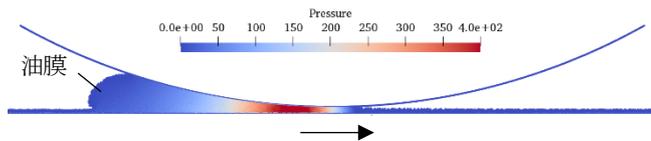


図5 くさび膜効果の検証結果: 油膜形状と圧力分布^[32]

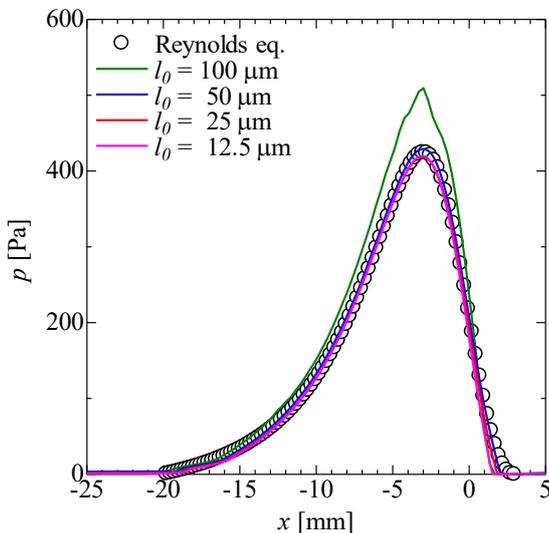


図6 くさび膜効果の圧力分布比較^[32]

は解像度確保のため小さい粒子を、それ以外の場所は計算コスト低減のため大きな粒子を使う様に、場所により粒子解像度を変更し、1:8程度の解像度比でも圧力分布を良好に再現し、計算コストは2次元計算において最大で約7割低減できることを確認した。

図7は、同じく円弧軸受を対象にした油膜（初期油膜厚さ1 mm）における絞り膜効果の計算結果である。円筒が降下することで中央部に存在した油膜が押しつけられ周囲に流出していく過程において、油膜が圧縮されて圧力が発生する、すなわち絞り膜効果が再現できている。図8は半径方向圧力分布の時刻歴であるが、Reynolds方程式による理論解をおおよそ再現できており、MPS法で絞り膜効果も定量的に再現できることが確認された。

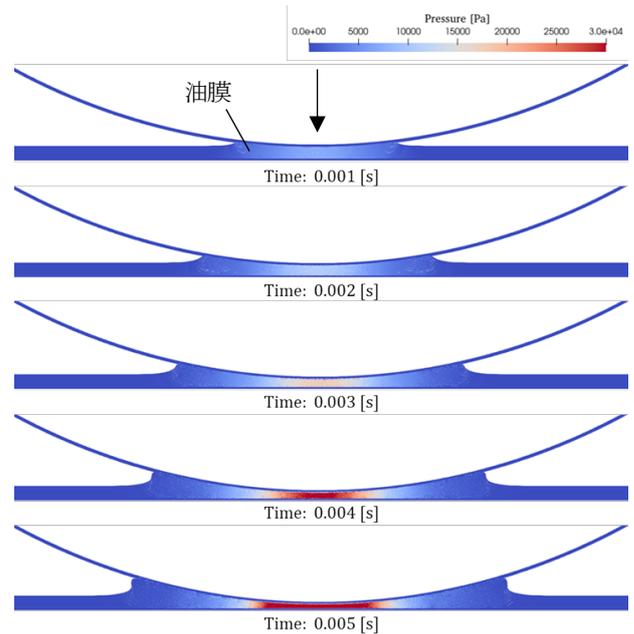


図7 絞り膜効果の検証結果: 油膜形状と圧力分布

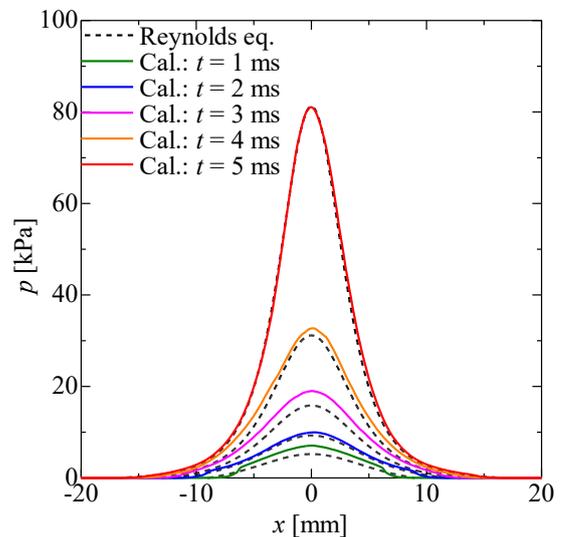


図8 絞り膜効果の圧力分布比較

3-3. 負圧の計算^[37]

ミクロスケールの流体潤滑解析では、表面張力の影響が無視できなくなり、また摺動部下流の末広がり形状に生じる負圧の再現が重要となる^[45]。一般的に粒子法で負圧を再現する際は、粒子間に引力が働くことになる。その場合、粒子配置にむらや重なりが生じることとなり、数値的に不安定になることが知られている^[7,48,49]。これを回避する手法としては、ゼロ圧力リミッターの導入^[50]、人工斥力の導入^[7,48]、衝突モデルの導入^[51]、Particle shiftingの導入^[48]など種々の方法が提案されているが、運動量や角運動量保存の不成立や経験的モデルパラメータの導入、アルゴリズムが複雑になるなどの課題がある。これに対し近藤ら^[52-54]は、運動量・角運動量保存則、熱力学的第二法則を満たし（物理的健全性と呼ぶ）、経験的モデルパラメータなどに頼ることなく安定に負圧の計算も可能なMoving Particle Hydrodynamics (MPH) 法を提案した。ここでは、MPH法の流体潤滑問題への適用可能性、特に負圧予測精度の評価を目的として、円弧軸受のくさび膜と2次元平板の絞り膜それぞれで発生する負圧についての検証結果を紹介する。

図9は円弧軸受のくさび膜（最小油膜厚さ400 μm）における純滑り条件での計算結果である。計算では、負圧の計算が可能な

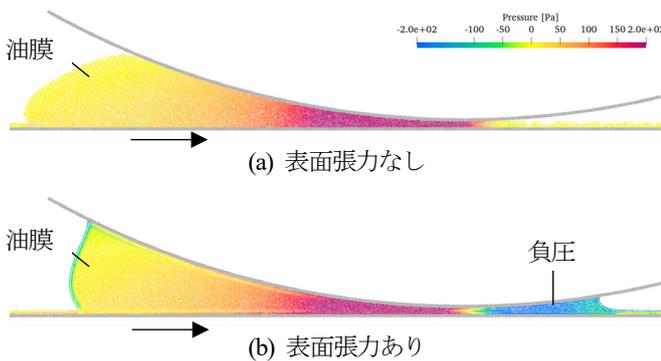


図9 負圧を伴う円弧軸受くさび膜の油膜形状と圧力分布^[37]

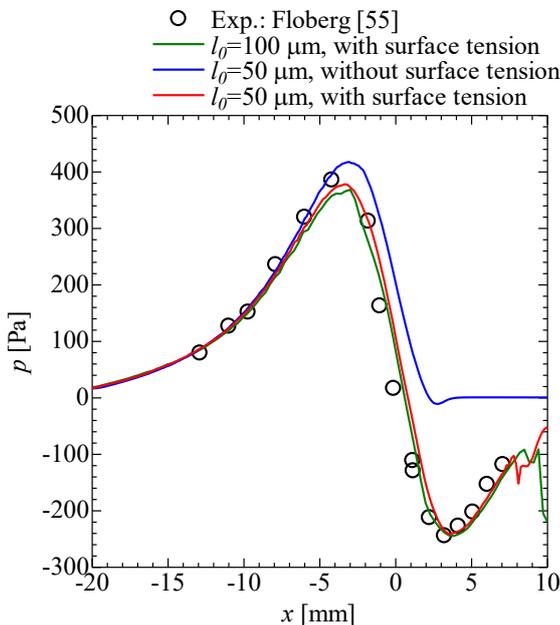


図10 円弧軸受くさび膜の負圧検証結果^[37]

Two-potential (Cohesive pressure potential and density gradient potential) 表面張力モデル^[54]を使用した。表面張力ありの場合、表面張力と濡れ性により、摺動部入口および出口部でメニスカスが形成され、油膜内では摺動部付近でくさび膜効果により高い圧力が発生している。また摺動部出口部では、末広がり形状に伴う負圧の発生が見られる。図10は、Flobergの実験結果^[55]との圧力分布比較である。表面張力を考慮することで、実験結果で見られる負圧を良好に再現した。

図11は、鉛直方向に正弦波振動する移動板と平板で挟まれた二次元絞り膜（初期油膜厚さ1 mm）の計算結果である。表面張力ありの場合、移動壁が下降して膜厚が低下する場合 ($0 < t < 0.5$ s) に正圧が発生し、上昇して膜厚が増加する場合 ($0.5 < t$) に負圧が発生する様子を再現している。表面張力なしの場合、平板が上昇する際の負圧が再現されていない。これは、平板上昇時に油膜が移動壁から剥がれてしまい、油膜内に張力が発生しないためである。図12は油膜中央位置での圧力時刻歴である。初期粒子間距離 $l_0 = 50 \mu\text{m}$ でReynolds方程式による理論解を良好に再現した。

3-4. 転がり円筒の流体潤滑解析^[38]

軸受内の転動体等機構部品の6自由度運動と潤滑膜挙動の相互干渉の考慮を目的として、潤滑面が剛体面の場合の流体-剛体連成解析手法の検討を実施した。解析対象は、簡単化のため油膜上を転がる円筒とし、検証実験と合わせて解析を実施した。

既報^[33]では、MPS法にPassively Moving Solid (PMS) モデル^[7]を導入した弱連成の流体-剛体連成解析手法を構築したが、角運動量保存が厳密に満たされない本質的な課題があった^[56]。そこで本研究では、物理的健全性を有するMPH法^[52-54]とPMSモデル^[7]を組み合わせることで前述の課題解決を図った。また潤滑問題における表面張力や濡れ性の影響を考慮するため、Two-potential表面張力モデル^[54]も導入した。剛体の支配方

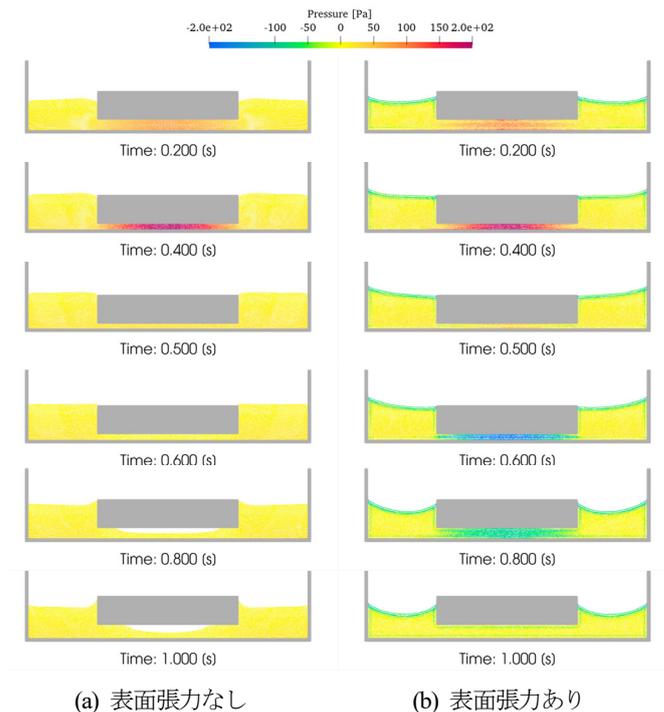


図11 負圧を伴う絞り膜の油膜形状と圧力分布^[37]

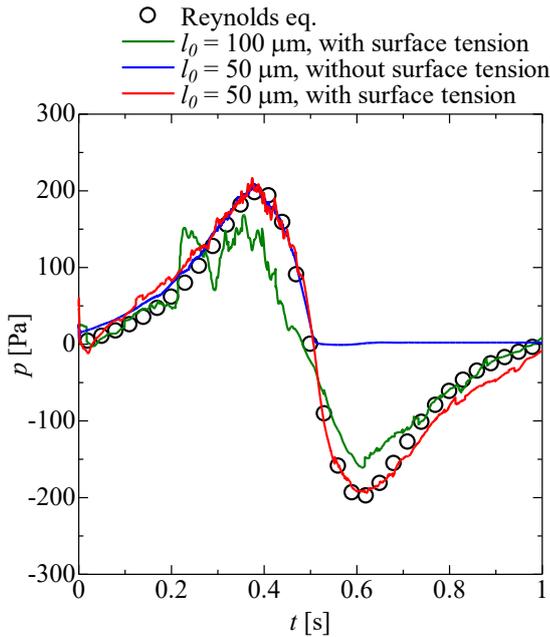


図12 絞り膜の油膜中央部の圧力履歴^[37]

程式は、回転運動方程式と剛体姿勢を表現するクォータニオンの時間発展式とし、4段のRunge-Kutta法で時間積分した。

図13に油膜上の円筒挙動の比較を示す。実験では、外径25 mm、厚さ5 mmの円筒を傾斜5度の斜面から転がし、水平方向並進速度 $U_0 = 0.475$ m/s、角速度 $\omega_0 = 38$ rad/sで厚さ1 mmの油膜に突入させた。その後、円筒は転がりながら油膜との干渉で減速を開始し、時刻 $t = 0.3$ s過ぎには完全停止した。計算でも同様に円筒の減速・停止挙動を定性的に再現している。特に、実験では時刻 $t = 0.10$ s以降で円筒に付着する油膜の形成と円筒前方に油膜の堆積が見られるが、計算でもその傾向を再現している。図14は円筒重心の水平方向位置履歴と角速度履歴である。図から明らかなように、計算結果は実験結果を定量的にも良好に再現した。

4. おわりに

本稿では、機械工学分野でブレークスルーをもたらしている粒子法の流体潤滑問題（特に転がり軸受）への応用に関して、最新の研究動向と著者らの代表的な研究成果を紹介した。転がり軸受内は流体-剛体連成、流体-構造連成を伴うマルチフィジックス環境であり、粒子法研究として非常にチャレンジングな解析対象である。これまでに負圧を含めた流体潤滑の基本メカニズム（くさび膜効果と絞り膜効果）や転がり円筒の流体潤滑問題の再現、また紙面の都合上割愛したが、流体-構造連成を伴う弾性流体潤滑の解析^[36,39]も可能となりつつある。計算コストの更なる低減、弾性流体潤滑解析実現のための密度変化考慮、キャビテーションや粘弾性の考慮等まだまだ課題は少なくないが、粒子法の更なる発展と省資源/省エネルギーな社会の実現のために、引き続き本研究を進めていく所存である。

謝辞

本研究は、JSPS科研費（17K06137, 21K03847）の助成を受けている。本稿で紹介した研究成果は、京都大学の黒瀬良一教授、東京大学の山田大輔博士、東京都立大学（現：プリヂストン

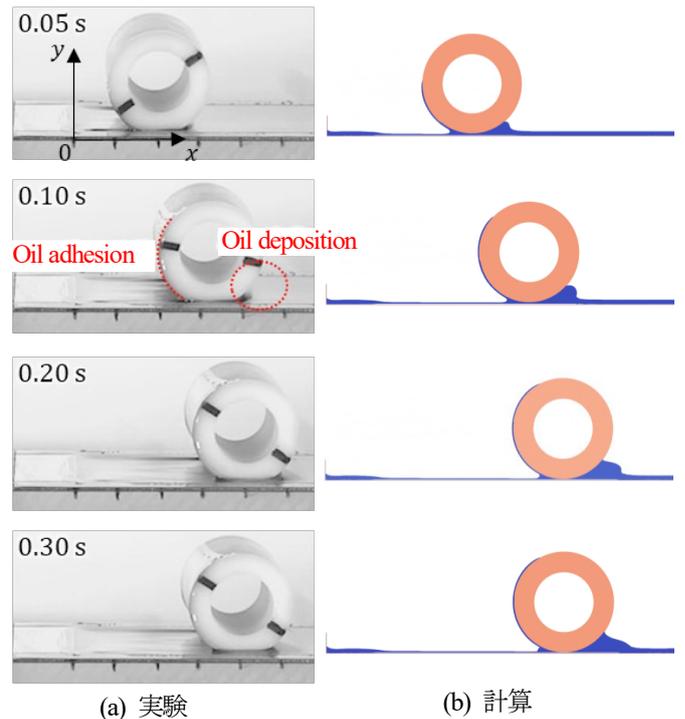
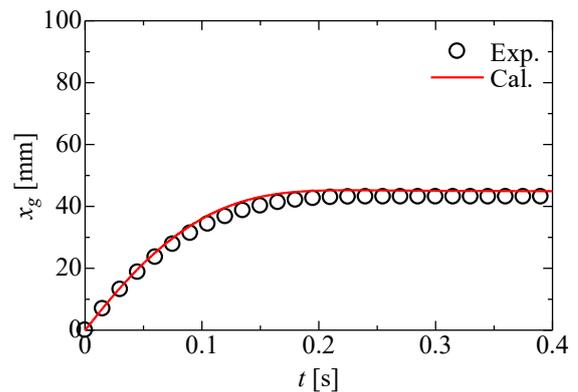
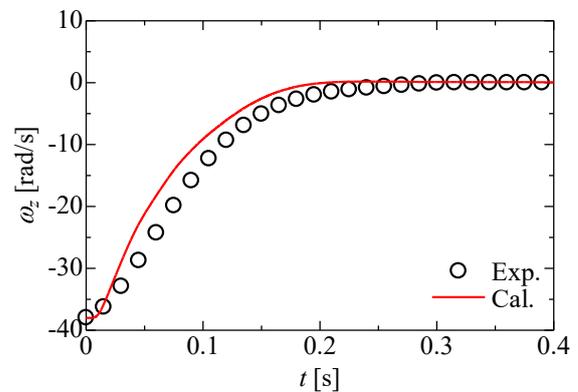


図13 転がり円筒挙動の比較^[38]



(a) 円筒重心の水平方向位置履歴



(b) 円筒回転軸周りの角速度履歴

図14 転がり円筒重心の位置及び角速度履歴^[38]

(株)の高橋秀尚氏、JAXAの小原新吾博士、間庭和聡博士、雨川洋章博士らとの共同研究成果である。また掲載した計算結果は、JAXA Supercomputer System Generation 3 (JSS3) を用いて得たものである。ここに記し、著者らの謝意を表す。

参考文献

- [1] L. B. Lucy, *The Astronomical Journal* 82 (1977) 1013-1024.
- [2] R. A. Gingold, J. J. Monaghan, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 181 (1977) 375-389.
- [3] S. Koshizuka, Y. Oka, *Nuclear Science and Engineering* 123 (1996) 421-434.
- [4] S. Koshizuka, *Journal of Nuclear Science and Technology* 48(2) (2011) 155-168.
- [5] H. Gotoh, A. Khayyer, *Journal of Ocean Engineering and Marine Engery* 2 (2016) 251-278.
- [6] D. Violeau, B. D. Rogers, *Journal of Hydraulic Research* 54(1) (2016) 1-26.
- [7] S. Koshizuka, K. Shibata, M. Kondo, T. Matsunaga, *Moving Particle Semi-implicit Method: A Meshfree Particle Method for Fluid Dynamics*, Academic Press (2018).
- [8] T. Ye, D. Pan, C. Huang, M. Liu, *Physics of Fluid* 31 (2019) 011301.
- [9] G. Li, J. Gao, P. Wen, Q. Zhao, J. Wang, J. Yan, A. Yamaji, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 367 (2020) 113166.
- [10] Z. Ji, M. Stanic, E. A. Hartono, V. Chernoray, *Tribology International* 127 (2018) 47-58.
- [11] 武藤一夫, 酒井勇, 尾崎直人, *自動車技術会論文集*41(1) (2010) 147-151.
- [12] N. Yuhashi, I. Matsuda, S. Koshizuka, *Journal of Fluid Science and Technology* 11(3) (2016) 16-00326.
- [13] 油橋信宏, 越塚誠一, *日本機械学会論文集* 86(881) (2020) 19-00343.
- [14] J. P. Kyle, E. J. Terrell, *Journal of Tribology* 135 (2013) 041705-3.
- [15] 田中健太郎, 岩本勝美, *トライボロジスト* 66(2) (2021) 98-103.
- [16] K. Tanaka, T. Fujino, N. Fillot, P. Vergne, K. Iwamoto, *Abstract Book of 46th Leeds-Lyon Sympo. on Tribology* (2019) 21.
- [17] M. Paggi, A. Amicarelli, P. Lenarda, *Computational Particle Mechanics* 8 (2021) 665-679.
- [18] 畠中清史, 寺床海登, *トライボロジスト* 67(4) (2022) 299-312.
- [19] 松永拓也, 越塚誠一, *日本機械学会論文集* 87(895) (2021) 20-00437.
- [20] A. Hajishafiee, A. Kadiric, S. Ioannides, D. Dini, *Tribology International* 109 (2017) 258-273.
- [21] M. Hartinger, T. Reddyhoff, *Tribology International* 126 (2018) 144-152.
- [22] D. Fischer, S. V. Goeldel, G. Jacobs, A. Stratmann, *Tribology International* 157 (2021) 106858.
- [23] W. Peterson, T. Russell, F. Sadeghi, M. T. Berhan, *Tribology International* 161 (2021) 107106.
- [24] H. Chen, W. Wang, H. Liang, X. Ge, *Tribology International* 174 (2022) 107731.
- [25] W. Peterson, K. Singh, F. Sadeghi, *ASME Journal of Tribology* 144 (2022) 11601.
- [26] 根岸秀世, 雨川洋章, 間庭和聡, 小原新吾, 羽山誠, 董大明, 第31回数值流体力学シンポジウム講演予稿集 (2017) A10-3.
- [27] 根岸秀世, 間庭和聡, 小原新吾, 柴田和也, 政家一誠, 第32回数值流体力学シンポジウム講演予稿集 (2018) A08-2.
- [28] 根岸秀世, 間庭和聡, 小原新吾, 柴田和也, 政家一誠, *トライボロジー会議2019春(東京)予稿集* (2019) B14.
- [29] 高橋秀尚, 根岸秀世, 間庭和聡, 小原新吾, *トライボロジー会議2019春(東京)予稿集* (2019) B16.
- [30] 根岸秀世, 藤原大典, 高橋秀尚, 柴田和也, 間庭和聡, 小原新吾, 第33回数值流体力学シンポジウム講演予稿集 (2019) E08-3.
- [31] 根岸秀世, 雨川洋章, 間庭和聡, 小原新吾, 羽山誠, 董大明, *日本機械学会論文集* 85(875) (2019) 19-00086.
- [32] 根岸秀世, 藤原大典, 高橋秀尚, 柴田和也, 間庭和聡, 小原新吾, *日本機械学会論文集* 86(890) (2020) 20-00241.
- [33] 高橋秀尚, 根岸秀世, 小原新吾, 第34回数值流体力学シンポジウム講演予稿集 (2020) F03-2.
- [34] D. Yamada, T. Imatani, K. Shibata, K. Maniwa, S. Obara, H. Negishi, *Computational Particle Mechanics* 9 (2021) 421-441.
- [35] 根岸秀世, 近藤雅裕, 小原新吾, 黒瀬良一, 第35回数值流体力学シンポジウム講演予稿集 (2021) D07-1.
- [36] 山田大輔, 柴田和也, 根岸秀世, 小原新吾, 第35回数值流体力学シンポジウム講演予稿集 (2021) D07-2.
- [37] H. Negishi, M. Kondo, H. Amakawa, S. Obara, R. Kurose, *Computational Particle Mechanics* (2023).
- [38] 根岸秀世, 近藤雅裕, 雨川洋章, 小原新吾, 黒瀬良一, *ながれ*42 (2023) (in press).
- [39] 根岸秀世, 近藤雅裕, 雨川洋章, 小原新吾, 黒瀬良一, 第28回計算工学講演会論文集 (2023) (in press).
- [40] 野口昭治, *日本機械学会論文集(C編)* 70 (2011) 2805-2813.
- [41] 林田一徳, 松山博樹, *トライボロジスト* 61 (2016) 734-741.
- [42] T. Sada, *Tribology Online* 12(3) (2017) 94-98.
- [43] A. I. Vakis et al., *Tribology International* 125 (2018) 169-199.
- [44] B. J. Hamrock, S. R. Schmid, B. O. Jacobson, *Fundamentals of Fluid Film Lubrication*, CRC Press (2004).
- [45] D. Dowson, C. M. Taylor, *Annual Review of Fluid Mechanics* 11 (1979) 35-65.
- [46] Y. Hori, *Hydrodynamic Lubrication*, Springer (2016).
- [47] K. Shibata, S. Koshizuka, T. Matsunaga, I. Masaie, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 325 (2017) 434-462.
- [48] 後藤仁志, *粒子法: 連続体・混相流・粒状体のための計算科学*, 森北出版 (2018).
- [49] J. J. Monaghan, *Journal of Computational Physics* 159 (2000) 290-311.
- [50] M. Kondo, S. Koshizuka, *International Journal of for Numerical Methods in Fluids* 65 (2011) 638-654.
- [51] B. H. Lee, J. C. Park, M. H. Kim, S. C. Hwang, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 200 (2011) 1113-1125.
- [52] M. Kondo, *Computational Particle Mechanics* 8 (2021) 69-86.
- [53] M. Kondo, T. Fujiwara, I. Masaie, J. Matsumoto, *Computational Particle Mechanics* 9 (2022) 265-276.
- [54] M. Kondo, J. Matsumoto, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 385 (2021) 114072.
- [55] L. Floberg, ed. *Royal Swedish Acad. of Engineering Sciences Acta Poly. Scan Mech. Eng.* 19 (1965) 3-35.
- [56] M. Asai, Y. Li, B. Chandra, S. Takase, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 377 (2021) 113681.



物理的健全性がある新しい粒子法 (MPH法) の紹介

近藤 雅裕
産業技術総合研究所 機能材料コンピューテーショナルデザイン研究センター

本稿では、物理的健全性という性質に着目して構築した粒子法 (Moving Particle Hydrodynamic (MPH) 法) を紹介する。

1. 物理的健全性がある粒子法

粒子法は、粒子 (計算点) の運動によって、構造物や流体の運動をシミュレーションする計算手法のことで、一般に自由表面の大変形や合体分裂を伴う問題に強いとされている。物体の運動と計算点の運動が一致していて、これらの複雑な運動を自然と表現できるためである。

代表的な粒子法としてSmoothed Particle Hydrodynamics (SPH) 法[1]、Moving Particle Semi-implicit (MPS)法[2]があるが、両者の基本的な考え方は同じである。どちらも、ナビエ-ストークス方程式などの支配方程式をもとにして、偏微分演算子を粒子間相互作用モデル (スキーム) で置き換えることにより粒子の運動方程式を定式化し、時間を追って粒子の運動を計算することによって、流体の複雑な運動をシミュレーションする。ただし、粒子間相互作用モデルはあくまで近似であるため、様々な定式化が考えられ、その選択には任意性がある。実際、SPH法とMPS法とは、異なる粒子間相互作用モデルが用いられており、また、これまでの粒子法研究で、様々な粒子間相互作用モデルが提案されている。

たとえば、支配方程式に含まれる偏微分演算子の近似精度を向上する粒子間相互作用モデル[3]が提案されている。テーラー展開した際に何次の項まで一致しているかという点に着目して構築された高次精度な粒子間相互作用モデルである。なお、もともとのSPH法[1]やMPS法[2]の粒子間相互作用モデルは、テーラー展開の1次の項すら一致しておらず、ゼロ次精度などと呼ばれている。このため、1次精度の粒子間相互作用モデルを適用すれば、粒子径や時間刻み幅を小さくして空間解像度や時間解像度を上げた際に、偏微分方程式の厳密解に収束することがいえず、数学的に健全な手法が構築できる。厳密解への収束をよくすることが粒子間相互作用モデルの高精度化を進める利点であり、粒子法研究の中で1つの流れを形作っている。

一方、本稿では、収束などの数学的な性質ではなく、物理的な性質に着目して構築した粒子法[4-7]を紹介する。具体的には、粒子法の計算を多体系の計算とみなし、その多体系で質量保存則、運動量保存則、熱力学第二法則などの基本的な物理法則を満たすように粒子間相互作用モデルなどの定式化を行う粒子法である。粒子法は、多体系の時系列を計算するという点で分子動力学と共通している。分子動力学ではポテンシャルエネルギーが与えられ、それをもとに解析力学的に粒子の運動方程式

を導くことで、基本的な物理法則を満たした計算が可能となる。粒子法においても、多体系が基本的な物理法則を満たすように定式化を行うためには、解析力学が便利である。実際、粒子法の運動方程式が解析力学的枠組みにあてはまるとき、多体系が基本的な物理法則を満たした計算が可能となり、ここでは、こういった性質をもつ粒子法のことを物理的健全性がある粒子法と呼んでいる。

物理的健全性と数学的健全性は全く別の概念であり、それぞれの性質を得るためのアプローチも異なっている。高精度化が収束性などの数学的健全性を達成するためのものであるのに対し、本稿で紹介する解析力学的枠組みにあてはめる方法は、物理的健全性を達成するためのものである。しかし、両者は基本的に相反するものではない。なぜなら、ナビエ-ストークス方程式などの偏微分方程式は、もともと質量、運動量、エネルギーに関する基本的な物理法則を満たすように作られているため、与えられた偏微分方程式を数学的に厳密に解くことができれば、物理的健全性が自然と達成されるはずだからである。しかし、高精度化を行っても離散化誤差が完全になくなるわけではないため、空間離散化を伴う実際の計算では、両者はやはり別物となる。現状では、数学的健全性と物理的健全性の両方を保持するような粒子間相互作用モデルを定式化することは難しく、結果、問題の性質を考慮してどちらかを選択せざるをえない場合が多い。

有限体積法や差分法などのメッシュを用いる方法であれば、計算点が動くことはないので、計算点の動きを制御することは考える必要がなく、収束性などの数学的健全性が達成されていれば十分に実用的な数値計算法が得られる。一方、粒子法の場合には、計算点である粒子の運動にも注意する必要がある。数学的健全性が保証されていても、粒子の配置や運動が不安定になってしまえば、そもそも計算結果が得られないという事態になりかねないからである。なお、もともとのSPH法[1]やMPS法[2]には物理的健全性がなく、質量保存、運動量保存、熱力学第二法則のような基本的な物理法則が厳密には満たされていない。実際、SPH法やMPS法で計算を進めた結果、粒子が飛び散って結果が得られないといった場合がしばしば発生するが、このような場合には熱力学第二法則に反して運動エネルギーが非物理的に増大していると考えられる。逆に、物理的健全性がある手法では、熱力学第二法則により力学的エネルギーの単調減少が保証され、運動エネルギーが増大しつづけるような事態はあり得ない。したがって、物理的健全性は、粒子の飛び散りのような力学的不安定を抑制しつつ、計算結果を得るために、とても重要な概念である。

物理的健全性がある粒子法では、粒子が力学的に安定に運動し、物理的に無矛盾な結果が得られることが保証される。この意義は、複雑な問題でこそ大きい。物理的健全性がない粒子法では、粒子の動きを安定に制御するため多くの緩和が用いられているが、これらの緩和はたいてい経験的であり、問題が複雑化した際にも有効かどうかはわからないからである。粒子法は、自由表面を伴う大変形問題を扱うことに対する利点から、様々な現象が交錯する複雑問題への応用が多く考えられている。物理的健全性のある粒子法は、そういった複雑問題に適用する上で有利であり、今後、様々な分野に応用されることが期待される。

2. 物理的健全性がある流体の計算モデル (MPH法) [4,5]

MPH法は、流体解析のための粒子法であり、ナビエ-ストークス方程式

$$\rho_0 \frac{d\mathbf{u}}{dt} = -\nabla P + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \rho \mathbf{g} \tag{1}$$

および 圧力計算式

$$P = -\lambda \nabla \cdot \mathbf{u} + \kappa \frac{\Delta \rho}{\rho_0} \tag{2}$$

を支配方程式としている。物理的健全性がある粒子法を構築するにあたっては、解析力学的枠組みにあてはまるような粒子の運動方程式を定式化する必要がある。一方で、SPH法やMPS法などの粒子間相互作用モデルの考え方を踏襲しつつ、ナビエ-ストークス方程式を空間離散化した運動方程式となっていることも要求される。これらの両方の要求を満たす定式化を見つけるためには、先にラグランジアンなどの解析力学的関数を記述する方が簡便である。ただし、保存系のみでは異なり、流体には粘性などの散逸力が含まれるため、ラグランジアンのみならず散逸関数も含めた解析力学を用いる必要がある。詳細は省略するが、MPH法のラグランジアンおよび散逸関数は、それぞれ

$$L = \sum_i \left(\frac{1}{2} m |\mathbf{u}_i|^2 - \frac{\kappa}{2} (n_i - n_0)^2 \Delta V + m \mathbf{g} \cdot \mathbf{x}_i \right) \tag{3}$$

および

$$D = \sum_i \left(\frac{\lambda}{2} \left(\sum_j (\mathbf{u}_{ij} \cdot \mathbf{e}_{ij}) w_{ij}' \right)^2 \Delta V - \sum_j \frac{\mu}{2} (d+2) (\mathbf{u}_{ij} \cdot \mathbf{e}_{ij})^2 \frac{w_{ij}''}{|\mathbf{r}_{ij}|} \Delta V \right) \tag{4}$$

などと記述できる。式(3)および式(4)をもとに、散逸を考慮した拡張ラグランジュ方程式

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \mathbf{u}_i} \right) - \left(\frac{\partial L}{\partial \mathbf{x}_i} \right) + \left(\frac{\partial D}{\partial \mathbf{u}_i} \right) = \mathbf{0} \tag{5}$$

に従い、粒子の運動方程式を導出すれば、空間離散化したナビエ-ストークス方程式および圧力方程式が

$$\rho_0 \frac{d\mathbf{u}_i}{dt} = \sum_j (P_j + P_i) \mathbf{e}_{ij} w_{ij}' - 2\mu(d+2) \sum_j (\mathbf{u}_{ij} \cdot \mathbf{e}_{ij}) \mathbf{e}_{ij} \frac{w_{ij}''}{|\mathbf{r}_{ij}|} + \rho_0 \mathbf{g} \tag{6}$$

および

$$P_i = \lambda \sum_j (\mathbf{u}_{ij} \cdot \mathbf{e}_{ij}) w_{ij}' + \kappa (n_i - n_0) \tag{7}$$

と得られ、物理的健全性のある計算手法が構築できる。ここで、

式(6)および式(7)には、SPH法およびMPS法の粒子間相互作用モデルとよく似た定式化があらわれており、MPH法がこれらの粒子法の考え方を踏襲し、SPH法およびMPS法の一つと解釈し得ることが確認できる。なお、式(6)、式(7)に用いられている粒子間相互作用モデルは、もともとのSPH法[1]およびMPS法[2]と同様にゼロ次精度である。つまり、空間解像度および時間解像度を上げた際の厳密解への収束性は保証されておらず、この手法に数学的健全性はない。

ところで、式(6)の圧力項に現れる粒子間相互作用モデルには、近傍粒子のもつ圧力との和 ($P_j + P_i$) が含まれている。これにより、多体系の運動量保存を保証しており、ラグランジアンから導かれた物理的健全性がある粒子法では、大抵このような定式化があらわれる。一方、1次精度以上の精度を持つ粒子間相互作用モデルでは、近傍粒子のもつ圧力との差 ($P_j - P_i$) の形があらわれる。これは、解析力学から得た粒子間相互作用モデルの定式化と、高精度化のための粒子間相互作用モデルの定式化が、相反する形となることを意味しており、物理的健全性と数学的健全性の両方の性質をもつ手法を構築することの難しさをあらわしている。

図1は、SPH法、MPS法、MPH法を用いて静水圧問題を計算した際の圧力および系全体の運動エネルギーの変化を示したものの[4]である。SPH法では、質量保存則が成立しないため、圧力が理論値を外れている。また、MPS法では、非物理的な粒子の振動が続き、熱力学第二法則に反した不自然な運動エネルギーがあらわれている。これは、物理的健全性がない粒子法では、単純な静水圧問題ですら、まともに計算できない場合があることを示している。一方、MPH法では、物理法則をきちんと満たしつつ、妥当な結果が得られており、物理的健全性をもつことの有効性を示している。

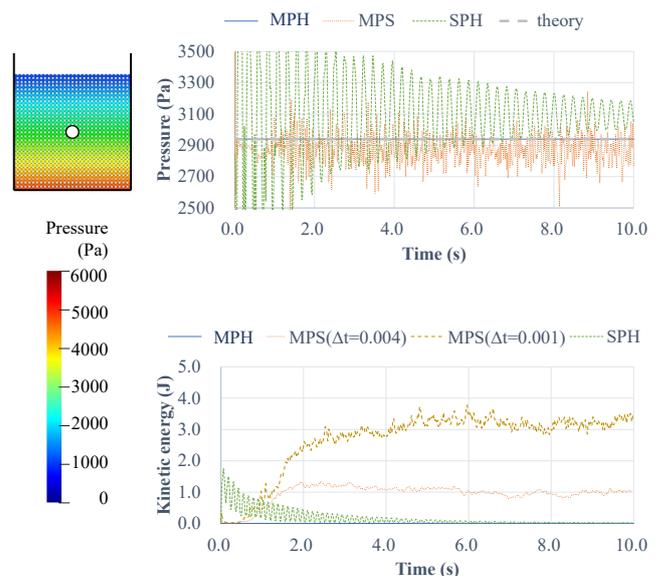


図1 SPH法、MPS法、MPH法による静水圧計算[4]

また、図2は、MPH法を用いて、ダム崩壊問題を計算した例[4]である。水塊が崩れて壁にぶつかり跳ね上がる様子が計算され、従来の粒子法であるSPH法やMPS法と同様に、合体分裂を伴う流れが計算できることが確認できる。

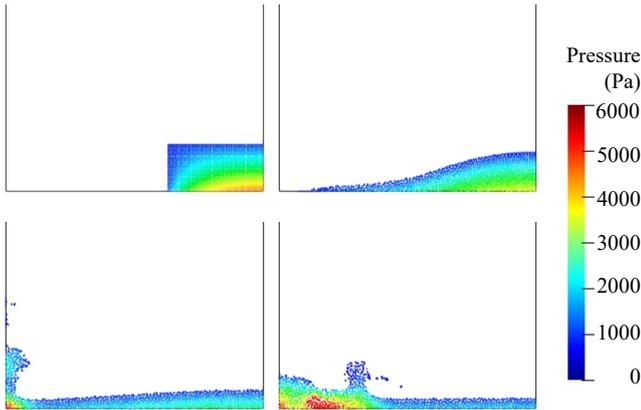


図2 MPH法によるダム崩壊計算[4]

図3は、MPH法を用いて、高粘性の流体を計算した例[5]である。自由表面を伴う高粘性の流体の場合には、回転的な挙動が現れる場合が少なくなく、MPH法を用いると、そういった挙動も捉えられることを示している。回転挙動を捉えるには、粒子系が角運動量保存則を満たすことが重要であり、式(6)の粘性項の粒子間相互作用モデルに角運動量保存性のある定式化を採用しているため、このような挙動を計算できる。

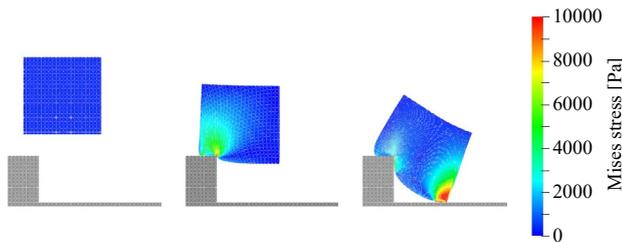


図3 MPH法による高粘度物体の落下計算[5]

3. 物理的健全性がある表面張力の計算モデル[6]

有限体積法や差分法などで、表面張力計算を行う際には、Continuum Surface Force (CSF)モデルという表面の法線と曲率を用いて体積力を与える数理モデルを用いることが一般的であり、粒子法の表面張力モデルも大半はCSFモデルに基づくものである。しかし、物理的健全性という観点で考えると、CSFモデルは不都合が大きい。なぜなら、対応するポテンシャルエネルギーを記述しづらく、解析力学との対応がつきにくいからである。一方、粒子法では、粒子間に引力ポテンシャルを導入することで表面張力計算をする方法も提案されており、この方法であれば解析力学との対応はつきやすい。しかし、粒子間ポテンシャルは液滴内部にも存在し、強い引力により流体のスムーズな流れを阻害してしまうなどの問題があった。物理的健全性がある粒子法(MPH法)にとって、表面張力の導入によって物理的健全性が崩れてしまえば、その価値が半減してしまうため、ポテンシャルベースで流れへの影響が小さい表面張力モデルを考える必要がある。表面張力係数は表面エネルギーと等価であることが知られているため、表面にのみ存在するようなポテンシャルエネルギーをうまく記述し、それをもとにラグランジアンを構成し、粒子の運動方程式を導出すれば、表面のみで作用し、物理的健全性を維持できる表面張力モデルが得られるはずである。この観点から提案されたのが、Cohesive Pressure Potential (CPP)と

Density Gradient Potential (DGP)を組み合わせたポテンシャルモデル[5]である。詳細な説明は省略するが、ポテンシャルの定式化は、粒子数密度 n と偏心ベクトル χ を用いて、

$$V = a \left(\sum_i \frac{1}{2} (n_i^a - n_0^a)^2 + \sum_i \frac{k^2}{2} |\chi_i|^2 \right) \Delta A$$

$$n_i^a = \sum_j w_{ij}^a$$

$$\chi_i = h_s \nabla \rho = h_s \sum_j \mathbf{r}_{ij} w_{ij}^g \tag{7}$$

と記述される。右辺括弧内の第1項がCPP、第2項がDGPである。また、ポテンシャルより導出された、粒子間相互作用力は、

$$\mathbf{F}_i^s = a \sum_j \left((n_j^a - n_0^a) + (n_i^a - n_0^a) \right) \mathbf{e}_{ij} w_{ij}^a \Delta A$$

$$- ak^2 h_s \sum_j (\chi_j - \chi_i) w_{ij}^g \Delta A - ak^2 h_s \sum_j \left((\chi_j - \chi_i) \cdot \mathbf{r}_{ij} \right) \mathbf{e}_{ij} w_{ij}^g \Delta A \tag{8}$$

であり、3つの項が存在している。偏微分方程式から得られた粒子間相互作用モデルと異なり、各項の偏微分方程式との対応関係は不明であるが、これらの項により表面張力が計算できることが確認されている。また、CPP+DGPモデルを、ヤングの式に代入することにより接触角を与えた計算も可能である。

図5は、MPH法にCPP+DGP表面張力モデルを導入した液架橋の計算[6]であり、与えた接触角が得られていること、液架橋内部の負圧が計算できていることが確認できる。

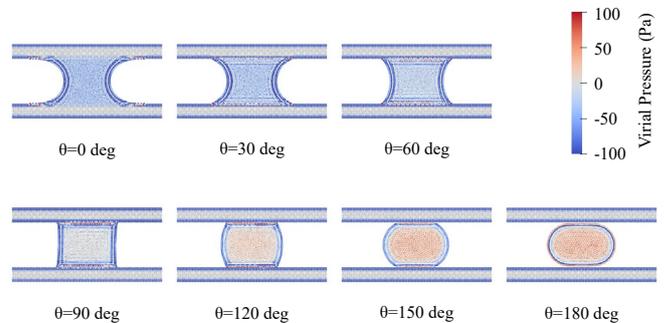


図5 CPP+DGP表面張力モデルによる液架橋の計算[6]

図6は、CPP+DGP表面張力モデルによりPlateau-Rayleigh不安定性を計算[6]したもので、3次元の液柱の分裂を計算できていることが確認できる。

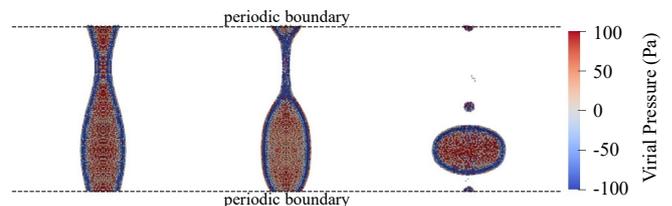


図6 CPP+DGPモデルによるPlateau-Rayleigh不安定性の計算[6]

4. 物理的健全性がある弾性体の計算モデル[7]

弾性体は保存系であり、ラグランジュ力学やハミルトン力学などの保存系の解析力学がそのまま適用できるため、物理的健全性を意識した研究が早くから行われてきた。実際、ここで紹介する物理的健全性がある弾性体の計算モデルは、MPH法よりもだいぶ前に提案されたものであるが、物理的健全性だけでなく厳密解への収束性もあることがわかっており、今後の物理的健全性と数学的健全性の両立に向けたヒントを与えてくれると思われる。弾性体の運動を表す支配方程式は、変形勾配テンソル \mathbf{F} および第2 Piola-Kirchhoff応力テンソル \mathbf{S} を用いて

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \nabla \cdot \mathbf{FS} \tag{9}$$

とあらわされる。この支配方程式と対応しつつも、解析力学的な枠組みに当てはまる粒子間相互作用モデルが定式化できれば、物理的健全性がある計算モデルを構築できる。これは、流体の計算モデル (MPH法) を構築した際と同様である。一方で、弾性体の場合、保存系の解析力学を適用できるので、弾性ポテンシャルエネルギーを定式化すれば、ラグランジュ力学やハミルトン力学などの枠組みにしたがって、粒子の運動方程式を導出することが可能である。なお、ここで示す弾性体モデルでは、近傍粒子との重みを固定している。弾性体を計算する際には、元の形状に相当する近傍粒子との相対関係を記憶しておく必要があり、これに伴い近傍粒子との重みも固定する方が自然だからである。

Green-Lagrange ひずみ $\boldsymbol{\epsilon}$ および第2 Piola-Kirchhoff 応力 \mathbf{S} を用いて、弾性ひずみポテンシャル V を記述すると、

$$V = \sum_i \frac{1}{2} \boldsymbol{\epsilon}_i : \mathbf{S}_i \tag{10}$$

となり、このポテンシャルから粒子の運動方程式を導くと、

$$\rho \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \sum_j (\mathbf{F}_i \mathbf{S}_i \mathbf{A}_i^{-1} + \mathbf{F}_j \mathbf{S}_j \mathbf{A}_j^{-1}) \mathbf{r}_{ij}^0 w_{ij}^0 \tag{11}$$

となる。ここで、 \mathbf{A} は、変形勾配テンソル \mathbf{F} を近似する際に1次精度の粒子間相互作用モデルを適用したことに伴いあらわれた規格化のためのテンソルである。式(9)と式(11)は対応しており、式(11)は式(9)に粒子間相互作用モデルを適用して空間離散化した形になっている。

図7は、式(11)であらわされる物理的健全性のある粒子法弾性体解析手法を用いて、片持ち梁の計算を行った例である。粒子径を小さくするにつれて理論解への収束が得られていることが確認できる。ここで、式(11)の発散演算子に相当する粒子間相互作用モデルは、1次精度の粒子間相互作用モデルとは異なるが、数学的健全性を示唆する収束性が得られている。このことは、支配方程式の偏微分演算子に用いる粒子間相互作用モデルの高精度化は数学的健全性のための必須条件ではなく、ラグランジアンなどの解析力学的関数を精度よく近似することによっても数学的健全性が得られる可能性を示している。このアプローチは、解析力学との相性がよく、物理的健全性と数学的健全性の両方をあわせもつ手法を構築する上で有効であると期待される。

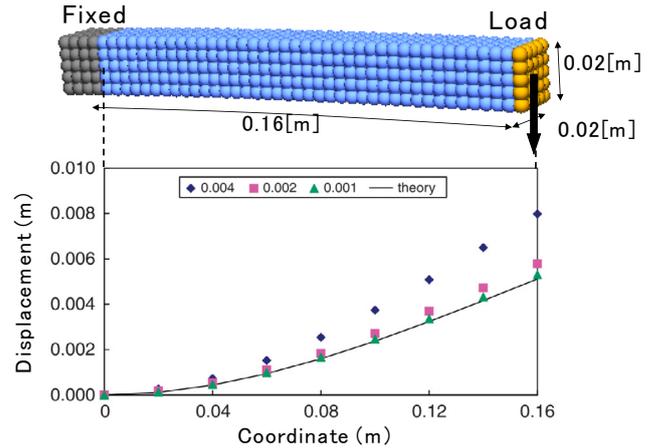


図7 物理的健全性のある弾性体モデルによる片持ち梁の計算 [7]

5. まとめ

本稿では、近年新しく提唱した粒子法の物理的健全性という性質について解説するとともに、物理的健全性のある粒子法についての紹介を行った。物理的健全性があると、粒子の運動が力学的に安定し、物理的に無矛盾な解が得られることが保証される。粒子法が対象とすることが多い複雑な問題において、この利点は大きく、様々な問題への応用展開で役立つと期待される。なお、本稿で紹介した物理的健全性のある粒子法 [4-7] は、GPLv3ライセンスで公開 [8] しているの、興味があればお試しいただけると幸いです。

参考文献

- [1] J.J. Monaghan, Journal of Computational Physics 110 (1994) 399-406
<https://doi.org/10.1006/jcph.1994.1034>
- [2] S. Koshizuka, Y. Oka, Nuclear Science and Engineering 123 (1996) 421-434
<https://doi.org/10.13182/NSE96-A24205>
- [3] T. Tamai, S. Koshizuka, Computational Particle Mechanics 1 (2014) 277-305
<https://doi.org/10.1007/s40571-014-0027-2>
- [4] M. Kondo, Computational Particle Mechanics 8 (2021) 69-86
<https://doi.org/10.1007/s40571-020-00313-w>
- [5] M. Kondo, T. Fujiwara, I. Masaie, J. Matsumoto, Computational Particle Mechanics 9 (2022) 265-276
<https://doi.org/10.1007/s40571-021-00408-y>
- [6] M. Kondo, J. Matsumoto, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 385 (2021) 114072
<https://doi.org/10.1016/j.cma.2021.114072>
- [7] M. Kondo, Y. Suzuki and S. Koshizuka, International Journal for Numerical Methods in Engineering 81 (2010) 1514-1528
<https://doi.org/10.1002/nme.2744>
- [8] <https://github.com/Masahiro-Kondo-AIST/>



MPS法におけるポリゴン壁面上での濡れ計算モデルの開発

服部 豪
株式会社デンソー

1. はじめに

最新のデジタル技術でビジネス変革を狙う「DX (Digital Transformation)」が近年注目され世間に浸透しつつあるが、ものづくり産業界においては特にコンピュータを用いた技術計算・数値シミュレーションによる仮想設計、すなわちCAE (Computer Aided Engineering) の活用・適用拡大が企業の競争力向上の鍵となっている。製品開発が競争を増す中、流体解析 (CFD) の分野においては混相流などの複雑・緻密な流れを高速に解析したい要求が高まっている。空間中の液体流れである自由表面流れにおいては格子法の一種であるVOF (Volume of Fraction) [1]を用いた計算が広く用いられるが、時間経過に伴って界面が激しく変化するような流れに対しては、数値拡散を避けかつ界面を詳細に捉えるための緻密な計算格子が必要であり、結果として計算時間が多大となる場合が多い。本特集にて取り上げられている粒子法は従来の格子法とは異なり計算点自体を移動させる解析手法であり、空間上に計算格子を必要とせず、液塊や飛沫を計算粒子の集合で直接表現するため界面変化の激しい自由表面流れを高速に解析することができ、産業界にて有用な解析手法の1つとして活用が広がっている。粒子法の1つであるMoving Particle Semi-implicit (MPS) 法[2]は、粒子数密度一定という非圧縮の条件を計算中に適用し続けるため非圧縮性流れを得意としており、固体表面上を重力作用等により自由に流動する液体の挙動解析に適している。液体界面を詳細かつ高速に解析可能な粒子法・MPS法の産業活用拡大の期待は高い。

ものづくり産業界においては様々な自由表面流れの解析課題があるが、著者が所属する株式会社デンソーにおける自由表面流れの詳細解析課題の一つとして、カーエアコンの熱交換器であるエバポレータにおける凝縮水の挙動予測が挙げられる。本稿では、エバポレータにおける凝縮水の挙動予測に用いるための要素解析モデル開発として著者らが取り組んだ、MPS法におけるポリゴン壁面上での濡れ計算モデルの開発[3-5]について紹介する。従来のMPS法のポリゴン壁面境界における表面張力・濡れ性モデルでは、壁面上を滑落する液滴を正確に再現することは困難であったが、本研究ではポリゴン壁面から液滴に作用する力の与え方を見直して新たな濡れ計算モデルを開発し、斜面上の液滴の滑落を対象とした計算により開発モデルの妥当性を検証し有効性を確認した。本稿では開発したモデルの内容および計算実施と検証について、また、産業界での実用例として熱交換器の凝縮水の挙動予測への応用について紹介する。

2. 研究の背景と目的

カーエアコンの熱交換器であるエバポレータにおいて、運転時に空気との熱交換により凝縮水が発生する。微細なフィン間に凝縮水が滞留・閉塞した場合、熱交換性能の低下やカビ発生による悪臭などの元となるため、速やかな除去が必要である。

微細なフィン間にて凝縮水を閉塞させず速やかに排水するための設計検討を試作実験で行うことは多大な期間や費用を要するためCAEの活用が期待される。凝縮水の挙動は非圧縮性の自由表面流れとなるため、MPS法による微細空間上での自由表面流れのシミュレーション技術の確立が望まれる。

熱交換器の凝縮水挙動のようなミリメートルオーダーのスケールの微小空間における流れは表面張力・濡れ性が支配的となるが、MPS法での表面張力・濡れ性を考慮した詳細な解析には実用化に向けた課題が存在する。既存のMPS法の代表的な壁面境界モデルである原田ら[6]のポリゴン壁モデルと、既存の表面張力モデルである近藤ら[7]のポテンシャルモデルの併用時の濡れの再現性の問題である。壁境界に原田ら[6]のポリゴン壁モデルを用いることで複雑な製品形状においても計算規模の抑制が実現でき、また、表面張力計算にて各流体粒子間に引き合う力を与える近藤ら[7]のポテンシャルモデルを用いることで粒子が飛び散ることなく液滴の界面が安定的に再現されることが期待できる。しかしながら、斜面上を滑落する液滴をこれらのモデルを用いて解析すると、液滴挙動の再現が不十分となる。実現象としては、図1に示すように、平板上に静置された液滴に対し、平板の傾斜角を徐々に増していくと、低傾斜時には液滴は壁面上に保持され、ある傾斜角になると滑落し始める。この時の斜面の傾斜角度を滑落角という。また、滑落時には液滴が前傾しながら下方に移動するが、この時形成される接触角を動的接触角という。既存のMPS法の壁面境界モデルでは、このような低傾斜角での斜面上の液滴保持、すなわち滑落角が再現できないに加え、高傾斜時の液滴滑落の速度および液滴形状、すなわち動的接触角が十分再現できない。その結果として、熱交換器の微細なフィン間の凝縮水の保持あるいは排水が解析で再現できない課題があった。

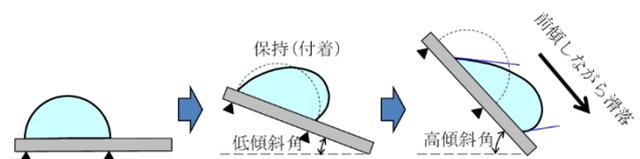


図1 斜面上の液滴の保持・滑落の概要

本研究では、エバポレータの凝縮水の挙動のような、微小空間における表面張力・濡れ性が支配的となる自由表面流れを詳細に解析するための要素技術として、MPS法による液滴の静的濡れおよび動的挙動の計算モデルを開発した。斜面上の液滴保持および下方への滑落を再現させるため、液滴に働く力の詳細を考慮した表面張力・濡れ性モデルの開発を行い、異なる傾斜角条件での液滴の滑落/保持の計算を実施し実験との比較検証を行った。また、実製品形状への応用解析として、熱交換器であるエバポレータのフィン間における凝縮水の滞留及び排水挙動の解析を行い、開発技術の有効性を確認した。

3. 液滴滑落モデルの開発[3, 5]

本章では、MPS 法におけるポリゴン壁境界において、液滴が斜面を滑落する挙動の高精度予測に向け、従来のモデルでは考慮されていなかった壁面粗さなどの壁面の表面性状に起因する壁面から流体への作用力をモデル化した計算モデルについて紹介する。前述のとおり、MPS 法で斜面上の液滴滑落挙動を再現しようとする際に、従来の原田ら[6]のポリゴン壁モデルおよび近藤らのポテンシャルモデル[7]を併用した場合に、液滴の滑落角・滑落速度および動的接触角を再現できない問題がある。これらの原因は、既存の原田ら[6]のポリゴン壁面は平面が滑らかと仮定されたモデルであり、粗さなどの表面性状が考慮されておらず、液滴を保持させるための力が働かないためと考えられる。その結果、滑落角や動的接触角が十分に再現されず、高速に滑落する結果を生じてしまう。そこで、本研究では、流体と壁面間の境界条件に新たな式を適用し、液滴にかかる抵抗力を表現するモデルを開発した。

開発モデルでは、粘性項を計算するための壁面境界条件において、流体の粘性によって引き起こされる滑りなし条件に加えて付加的な力を加えるために、抵抗力の強さを調整するためのパラメータ k を導入し粘性項計算の定式化を行い、表面形状からの抵抗力を再現させた。モデルの概要を図2に示す。この開発モデルを動摩擦モデル (Dynamic friction model) と呼ぶ。また、重力の壁面に平行な成分がある閾値以下に留まる間に、液滴がその位置に留まるようにするためのモデルを開発した。概要を図3に示す通り、流体粒子に作用する重力の壁面に平行な成分の大きさ f_i に着目し、この値が臨界値 f_c を超えると流体粒子は滑落し始めるモデルとした。本モデルでは $f_i \leq f_c$ となる場合に粒子速度の壁面に平行な成分を強制的にゼロにするモデルとした。この開発モデルを静止摩擦モデル (Static friction model) と呼び、この静止摩擦モデルに加えてさらに $f_i > f_c$ の場合には前述の動摩擦モデルを適用するモデルを静止-動摩擦モデル (Static-Dynamic friction model) と呼ぶ。なお、このような液滴の斜面上の保持・滑落現象は、固体力学における傾斜面上の固体に作用する静止摩擦力・動摩擦力に類似した現象として理解でき、本計算モデルは固体の静止摩擦・動摩擦の物理に着想を得て開発したため、このようなモデル名としている。

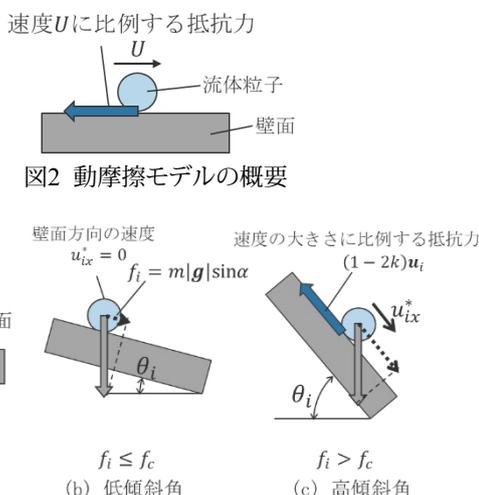


図3 低傾斜角および高傾斜角における重力作用と静止-動摩擦モデルによる力のモデル概要

図4に、既存の原田ら[6]および近藤ら[7]のモデルと開発した動摩擦モデルによる2次元での液滴滑落計算での滑落時の液滴位置および液滴形状の時間推移の様子を示す。原田ら[6]および近藤ら[7]のモデルでは液滴が高速で滑落する一方で、開発した動摩擦モデルでは原田ら[6]および近藤ら[7]のモデルより低速に滑落するとともに、液滴の前傾、すなわち動的接触角の形成が確認できる。図5に斜面の傾斜角が 20° および 50° における既存モデルおよび開発した静止-動摩擦モデル (Static-Dynamic friction model) での計算結果の液滴の様子を示す。既存モデルでは、斜面の傾斜角が 20° 、 50° のいずれの場合においても液滴は斜面上に静止せず滑落する。一方で、開発した静止-動摩擦モデルでは、 50° という高傾斜角では既存モデル同様に液滴が滑落するが、傾斜角が 20° の場合には、液滴が滑落せずに斜面上に保持されるという実現象と同じ挙動が再現できた。図6に、斜面の傾斜角に対する液滴滑落の終端速度の Puthenveetil et al. [8]による実験値と既存モデルおよび開発した静止-動摩擦モデル (Static-Dynamic friction model) の計算結果との比較を示す。液滴の滑落速度が今回開発した静止-動摩擦モデルでの計算で再現され、実験結果と良く一致した。

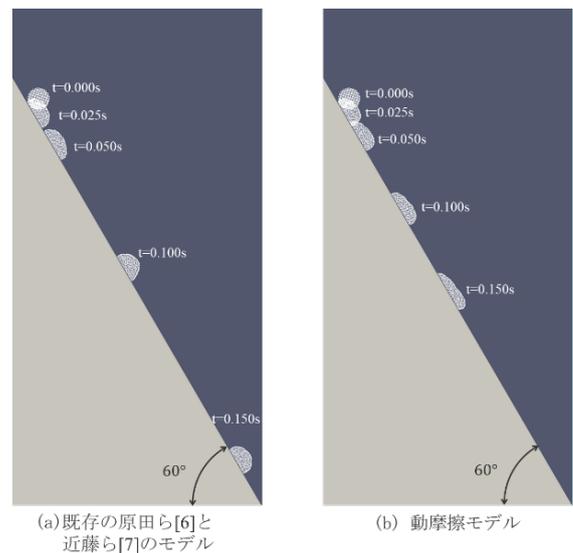


図4 (a)既存のモデルと(b)開発モデルによる液滴滑落の計算結果(時間推移)[3, 5]

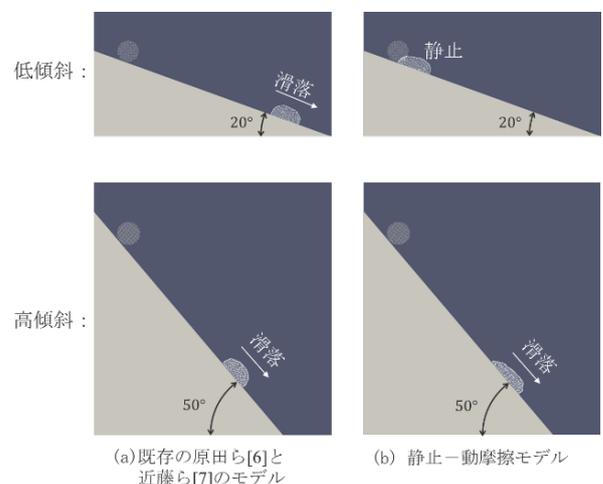


図5 低傾斜面および高傾斜面における(a)既存のモデルと(b)開発モデルによる計算結果[3, 5]

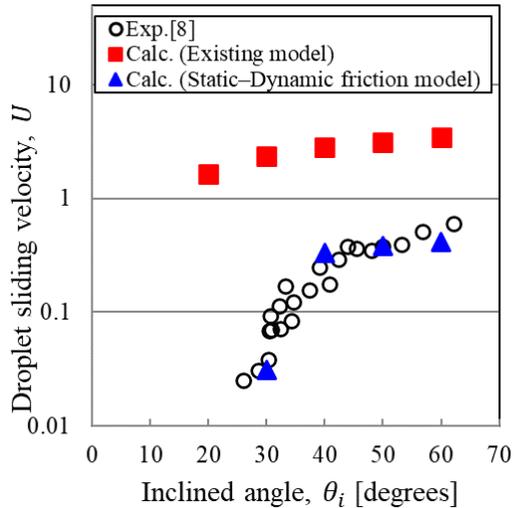


図6 液滴滑落速度の計算結果[3, 5]

4. 液滴滑落モデルの改良[4, 5]

前章で紹介した開発モデルにより、斜面上に付着した液滴が特定の傾斜角度で滑落し始める液滴の現象、すなわち滑落角を良好に再現し、また、液滴が壁を滑落するときの液滴の前方傾斜および滑落速度を良好に再現した。しかしながら、これらのモデルは2次元場での単一の液滴についてのみ評価されたものである。加えて、このモデルでは異なる体積の液滴挙動が正しく計算できないという問題がある。自然界では、大きな液滴は小さな液滴よりも低い傾斜角度で滑落し始めるが、前章で示した動摩擦モデルおよび静止摩擦モデルではこの現象を再現できない。さらにこれらのモデルを用いて液滴滑落の解析を行った場合、液滴の前方傾斜は実際の現象よりも小さく再現される課題もあった。

本章では、以上に述べた問題を解決するために、壁から液滴に作用する力の詳細を考慮することにより、前章で紹介したモデルの動摩擦モデルおよび静止摩擦モデルをさらに改良した壁境界モデルについて紹介する。モデル改良の要点としては、液滴と壁面および空気の3つの境界となる曲線、すなわち、「接触線」に作用する力をより詳細に考慮すること、および、動摩擦モデルおよび静止摩擦モデルの2つのモデルを切り替え、液滴の滑落速度と滑落角の両方を3次元シミュレーションにより再現するためにハイブリッド形式とすることの2点である。

液滴の底面すなわち液滴が壁面に接する部分において、既存のモデルでは図7(a)に示すように付加的な力は作用しない。また、前章で紹介した開発モデルは図7(b)に示すように、液滴が壁面に接する部分の全面に渡って抵抗力が作用する。本章で紹介する改良モデルでは、図7(c)に示すように、抵抗力は接触線上に集中して作用し、また、壁面の面方向かつ接触線に垂直な方向に作用すると仮定し、壁面の面方向において接触線に垂直な速度ベクトル成分を抽出し、法線方向の速度に比例する抵抗力を反対方向に与えるモデルとした。また、図8に示すように、形成された接触角 θ と静的接触角 θ_s との差がある閾値内にある場合、液滴を付着させたままにするための抵抗力が液滴に作用するモデルとした。この2つのモデルをそれぞれ、改良動摩擦モデル (Improved Dynamic friction model)、改良静止摩擦モデル (Improved Static friction model) と呼ぶ。

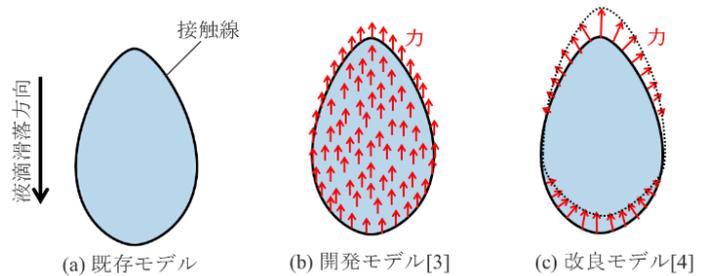


図7 液滴底面に作用する力のモデル概要

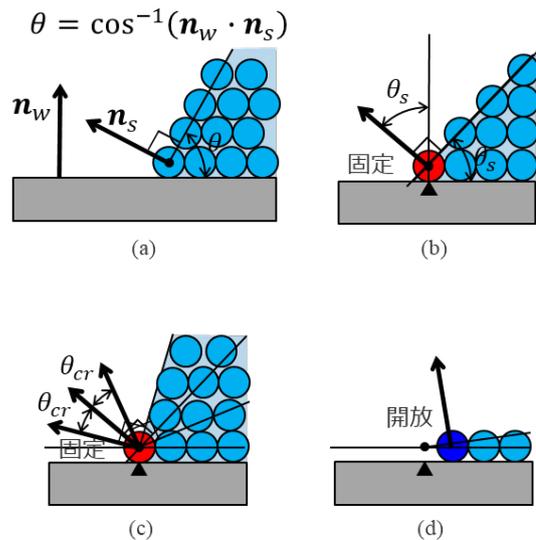


図8 改良静止摩擦モデルの概要

図9は、平面上に大きさの異なる液滴を図の手前から小さい順に並べ、斜面の傾斜角を水平から次第に大きくしていった条件での計算結果を示す。図9(a)に示す通り、静止摩擦モデルでは平板の傾斜が小さい範囲内では液滴は壁面に付着したまま維持され、平板がある傾斜角に達すると、異なる体積の全ての液滴は同時に動き始める結果となる。一方で、改良静止摩擦モデルを用いると、図9(b)に示す通り液滴はある傾斜角まで付着したまま維持されるが、最大体積の液滴はある傾斜角度で最初に滑り落ち始める。さらに傾斜角が増加すると、より体積の小さい液滴が順次滑り落ち始める。これらの結果は実際に実現現象として自然界にて発生する現象と一致している。図10にそれぞれ、(a)既存の原田ら[6]および近藤ら[7]のモデル、(b)静止-動摩擦モデル、および (c)改良静止摩擦モデルと改良動摩擦モデルを組み合わせたハイブリッドモデルを使用して、Puthenveettil et al. [8]の実験と同等の条件で計算し、傾斜角 50°において得られた液滴形状を示す。原田ら[6]および近藤ら[7]のモデルでは、液滴の傾きは見られなかった。静止-動摩擦モデルでは、わずかな傾きが見られるが、その傾きの大きさは、実験で見られる傾きよりもはるかに小さい。一方でハイブリッドモデルでは、大きな液滴傾斜が見られ、これは実験結果に近い結果である。図11は既存モデルおよびハイブリッドモデルによる液滴滑落速度の結果である。ハイブリッドモデルにより、実験で計測された液滴滑落速度を定量的に良好に再現できている。

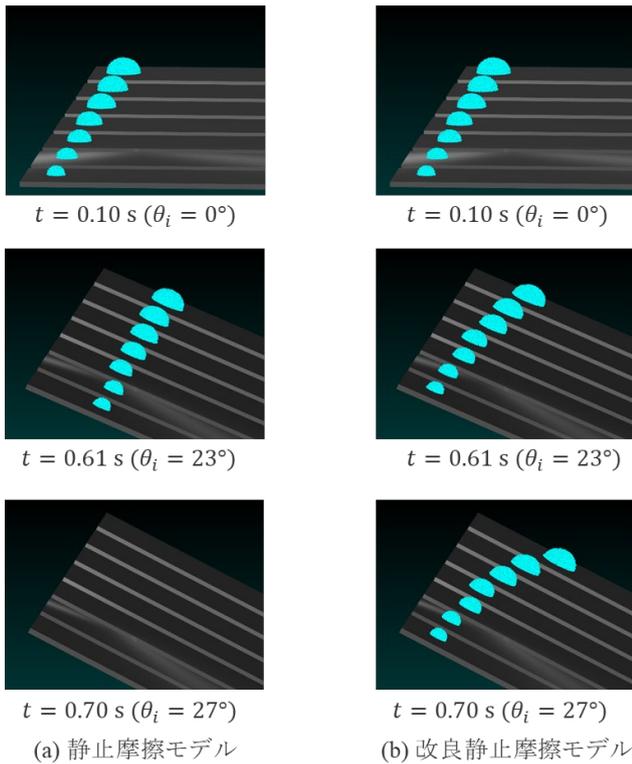


図9 (a)静止摩擦モデルと(b)改良静止摩擦モデルによる傾斜角拡大時の液滴保持および滑落の計算結果[4, 5]

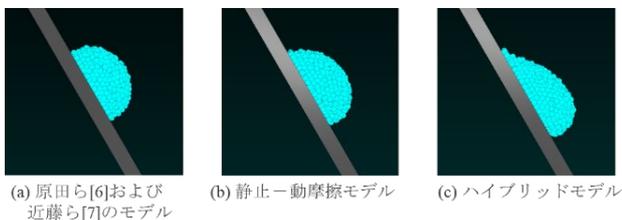


図10 (a)既存モデル、(b)静止-動摩擦摩擦モデル、(c)ハイブリッドモデルによる液滴滑落計算時の形状比較[4, 5]

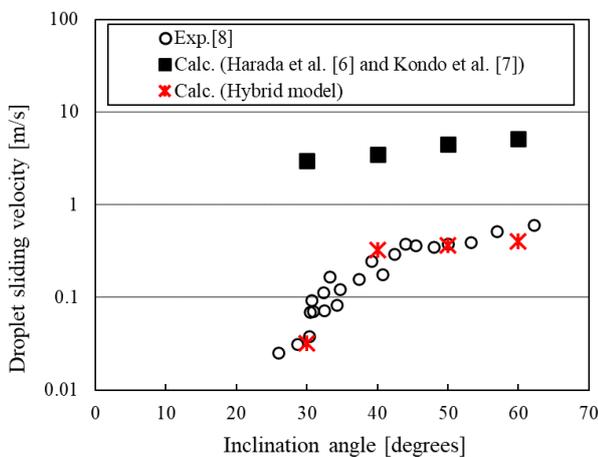


図11 既存モデルおよびハイブリッドモデルによる液滴滑落計算時の滑落速度[4, 5]

5. 実製品への応用の解析事例[5]

開発した壁境界モデルを用いて、自動車用熱交換器であるエバポレータ製品の具体的な形状を用いてMPS法による凝縮水挙動の解析を実施し、開発したシミュレーション技術の実製品への応用の可能性について評価した。本研究の計算対象領域としては、図12に示すように、エバポレータの下部の一部を切り出したCAD形状を用意して流体解析した。計算は汎用MPS法ソフトウェアParticleworks 6.1.2を用い、本研究での開発モデルをParticleworks SDK (Software Development Kit) を用いてカスタマイズ実装して解析した。なお、本研究での計算は、凝縮水の発生自体は計算せず、フィンの隙間に一定量の流体粒子を初期配置して、フィンの隙間寸法に応じて水が保水/排水されるかを解析した。

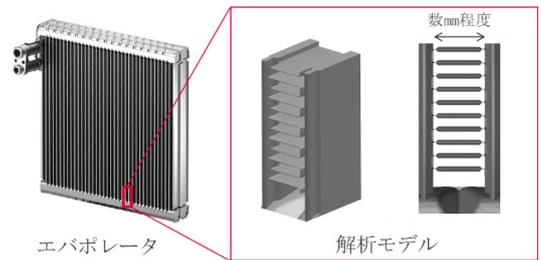


図12 エバポレータ形状(外観)と解析対象モデル

図13に、凝縮水の保持有無についての解析結果の例を示す。図13(a)に示すように、既存の原田ら[6]のポリゴン壁モデルと近藤ら[7]のポテンシャルモデルでは常に排水され水は下方に流れ落ちる結果となる。一方で図13(b)に示すように、開発したハイブリッドモデルを用いた場合の計算では、フィンの隙間が狭い仕様の形状では水が閉塞して保持され、フィンの隙間が広い仕様では水が排水される様子が確認でき、これは実験と同様の挙動であり、開発モデルの有効性が確認できた。空間が狭い場合は液架橋を形成する等、表面張力および濡れ性により液体を保持させる力が大きく影響するが、空間が広くなると重力作用の影響が相対的に大きくなり、水は保持されずに流れ落ちてしまう。本結果はこの事象を定性的に再現できている。厳密な妥当性の評価としては実験との定量的な比較による妥当性確認が必要であるが、実験や試作を行う前の仮想検討に十分活用可能であると考えられる。

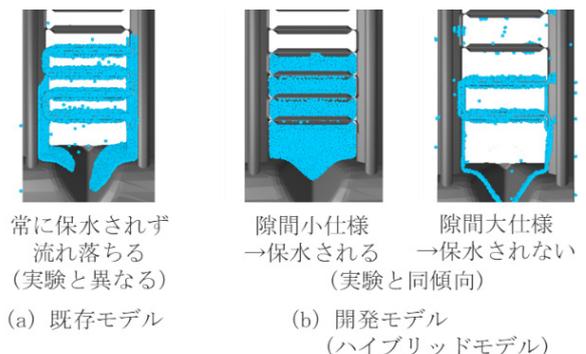


図13 フィン間の凝縮水の保水/排水の計算例[5]

6. おわりに

本稿では、従来のMPS法の表面張力・濡れ性モデルでは再現困難であった、壁面上を滑落する液滴の詳細を解析するために著者らが新たにモデル開発した取り組みについて紹介した。ポリゴン壁面から液滴に作用する力の詳細に着目した新たな濡れ計算モデルを開発し、開発モデルの妥当性を検証し有効性を確認した。本研究における今後の課題としては、液滴滑落挙動として開発した各種の新たな摩擦モデルについては、モデルパラメータが複数含まれ、実験に合うように都度調整する必要がある、理論的あるいは実験から導出された定式化が望まれる。エバポレータの凝縮水の挙動予測への応用については、実現象をより厳密に再現するためには、凝縮の現象自体を考慮し凝縮水発生自体も解析で再現させる計算手法が必要である。

本解析技術はエバポレータの凝縮水挙動の予測に限らず、様々な産業応用の流体解析に活用可能と考えられる。例えば、製品の防水・耐被水性検討のための水のかかり方の予測や製品内部への水の侵入予測などの被水シミュレーション等が考えられる。ものづくり産業界において、製品は複雑化し、より詳細・緻密な解析が求められることも多く、小さなスケールでの流体挙動は表面張力や濡れ性が支配的となり、本開発技術は様々な産業応用の自由表面流れの詳細解析で広く活躍の場を持つことが期待される。

最後に、ものづくり産業界に身を置く著者の視点で、粒子法に関する今後の期待について述べる。粒子法の産業応用拡大に向けては高精度モデル、物理モデルの充実、可変解像度モデルの3つが特に強く期待されると考える。ものづくり産業界がCAEに期待する最終的な姿は、コンピュータ上での完全な仮想設計・試作レスを実現し、実際にものをつくるよりも圧倒的な短期間・低コストで製品開発を進めることである。その実現のためには実際の実験や試作に遜色ない忠実性の高いシミュレーションを高速で実行できることが望まれる。忠実性を高めることについては流体流動挙動自体の再現精度の向上に加え、相変化・熱伝達などの自然界に見られる複合物理事象への対応が重要となる。また、高速性については、現状は細かな隙間を含む形状や複雑流路の場合には粒子解像度を細かくせざるを得ず、計算コストが大きくなりメッシュフリーによる高速解析という粒子法の利点を打ち消してしまい実用の障壁になる場合も多い。計算機能力には限界があるため、現在学術研究が進められている可変解像度モデルの実用化の期待も非常に高い。粒子法の産業応用拡大に向けては、学術界での計算モデル開発に頼るのみではなく、産業界側での実問題への応用トライによる課題抽出や実製品・

実条件での実験・実測との比較等の検証と妥当性確認 (V&V) を進めていくことも重要である。産・学が密に連携しながら粒子法の技術進展・活用拡大を進め、CAEの活用によるものづくりの高度化を推進していきたい。

謝辞

本研究内容は、東京大学大学院工学系研究科システム創成学専攻 越塚誠一教授との共同研究による成果です。また、本稿の執筆に際し、越塚誠一教授にご協力・ご支援をいただきました。ここに改めて謝意を表します。

参考文献

- [1] C. W. Hirt and B. D. Nichols, Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries, *Journal of Computational Physics*, Vol. 39, pp.201–225, 1981.
- [2] S. Koshizuka and Y. Oka, Moving-particle semi-implicit method for fragmentation of incompressible fluid, *Nuclear Science and Engineering*, Vol. 123, pp. 421–434, 1996.
- [3] T. Hattori, M. Sakai, S. Akaike and S. Koshizuka, Numerical simulation of droplet sliding on an inclined surface using moving particle semi-implicit method, *Computational Particle Mechanics*, Vol. 5, No. 4, pp.477–491, 2018.
- [4] T. Hattori and S. Koshizuka, Numerical simulation of droplet behavior on an inclined plate using the Moving Particle Semi-implicit method, *Mechanical Engineering Journal*, Vol. 6, No. 5, p.19-00204, 2019.
- [5] 服部豪, Moving Particle Semi-implicit法による液滴の詳細解析手法の開発と熱交換器凝縮水挙動の予測, 東京大学博士論文, 2022.
- [6] 原田隆宏, 越塚誠一, 島崎克教, MPS法における壁境界計算モデルの改良, 日本計算工学会論文集, Vol. 2008, No. 20080006, 2008.
- [7] 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, Vol. 2007, No. 20070021, 2007.
- [8] B. A. Puthenveetil, V. K. Senthilkumar and E. J. Hopfinger, Motion of drops on inclined surfaces in the inertial regime, *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 726, pp.26–61, 2013.



非Lagrange型の粒子法に関して

三目 直登 (左), 田中 克治 (右)
筑波大学

粒子法, moving particle semi-implicit/simulation, Euler 記述, 分散メモリ型並列環境, 幾何学的領域分割

1. はじめに

「粒子法」という用語は多義的に運用されており, それ指す明確な範囲は研究者によって差異がある. 本報ではまず, 以下の特徴を満たすものを「狭義の粒子法」と考え, この手法群の立ち位置を俯瞰で議論してみようと思う.

- A) 何らかの連続な場 (熱, 流体など) を記述する偏微分方程式に対し, 離散化を行う
- B) 強形式の偏微分方程式を対象とする
- C) 計算点 (粒子) は Lagrange 記述により, 速度場に従って移動する

上記の条件を満たす代表的な粒子法が, smoothed particle hydrodynamics (SPH) [1] や moving particle semi-implicit/simulation (MPS) [2] であり, 主に, 自由表面を含む非圧縮流れ解析などに利用されている.

まず (A) に関しては, 広義には個別要素法も粒子法に含まれる. しかし, 個別要素法は基本的に, 粒状の物質を粒子として直接的に表現し, その間の衝突等の相互作用をバネなどによってモデル化して計算するという点で, (A) の条件に該当しない. しかしながら, 個別要素法を用いた (主に, 粒子離散化による破壊表現の柔軟性に着目した) 固体解析なども試みられ, 実験結果から適切なバネ定数を同定するもの [3] のほか, 有限要素法の数値からボトムアップ的に粒子表現に繋げるもの [4] などが提案されており, 上記の分類の境界に位置する興味深い方法論が展開されている.

(B) に関しては, 弱形式の方程式を用いることで有名な有限要素法からメッシュを取り除いた element-free Galerkin 法 [5] や, SPH を高精度かつ弱形式の形態へと進化させた reproducing particle kernel method [6] などが存在する. 数理的には, 弱形式とすることで積分を要するが, 格子を用いずに点のみで高精度の積分演算することが難しいという点などが難点と考えられるが, 弱形式化により Neumann 境界条件が自然に取り扱えることや, Galerkin 法等の変分法の近似解法に基づくことで, 有限要素法やその周辺分野の既存の知見を導入できることが利点といえる.

(C) は一般的に, 狭義の粒子法における最大のアイデンティティの一つである, と認識されていると思うが, 一方で, 近年の高精度粒子法 [7, 8, 9] においては, Lagrange 記述と Euler 記述を包括した一般的な記述方法である arbitrary Lagrangian-Eulerian (ALE) 記述が目ざされている. これもまた, 上記のシ

ブルな分類から見ると, カテゴリの境界上の方法論といえる. この流れを多少の数理的厳密さを犠牲にしつつ, 端的に説明すると, 以下のようなフローになる.

- (i) Taylor 展開等を基にした厳密な微分作用素の粒子近似モデルでは, モーメントマトリクスという行列の逆行列演算が存在する
- (ii) (i) の逆行列の妥当性 (ここでは可逆性含め, 多義的な意味) は粒子配置の均等さに大きく左右される
- (iii) 高精度計算において, 数値安定的に計算するためには, 粒子配置を均等に保つ必要があり, 粒子配置均等化のための種々の particle shifting が使用される
- (iv) (iii) の particle shifting で位置補正された粒子は, その程度にもよるが, Lagrange 的に正しい位置からずれており, そのずれが原因となる誤差 (場合によっては, 数値粘性に相当) が発生する
- (v) (iv) の "誤差" は, 対象方程式を ALE 記述にすることで, ALE 記述における「移流項」として明確に定式化できるため, この項を正しく計算することで精度を担保できる

上記の議論は極めて興味深い. (v) により, Euler型メッシュベース法と同様に, 形式的には, 移流項の不安定性解消を要するようになるが, 定式化上は, particle shifting による移動を最小化できるとこの項はゼロに近づくため, 粒子補正と移流計算との間のトレードオフが存在する, ともいえる. 少し余談ではあるが, 著者は粒子法のみならず, 有限要素法等のメッシュベース法の研究にも従事しているので, 「移流項を計算するくらいなら, 境界面捕捉法を採用した構造格子系の手法で良いのでは?」とも思うが, このような境界上の方法論の特徴を理解することは学術的にも興味深く, また, 手法を構築する要素の分解と理解を促進するという点で, 実用上も重要な意義を持つと考えられる.

上記にて, 「狭義の粒子法」に関する概観について述べたが, 本報では (C) の境界の越えた一つの極論として, 完全 Euler 型 (完全固定粒子) の粒子法 [10] を紹介する. この方法は, 境界適合的な粒子生成がメッシュ生成よりも低コストかつ柔軟である点に着目し, トポロジー最適問題など, 多様な境界形状を計算する問題への適用を前提としている. また, 将来的にはこの研究を ALE記述に一般化することで, メッシュベース法の境界面追跡法において行われている「メッシュ制御」[11] ならぬ, 「粒子制御」が可能となる. 微分演算には, 境界付近においても任意次数の収束性を有する least squares MPS (LSMPS) 法 [12] を採用し, Euler型に伴う数値不安定性の安定化のため, LSMPS法の空間離散化スキームに風上化の効果を与えた風上化スキームを提案する. 加えて, 分散メモリ型並列計算環境を利用した高

速な解析を実現するため、Euler型LSMPS法に対する領域分割法を用いた分散メモリ型並列化手法を提案する。本並列化手法は、粒子の相互作用関係から解析モデルをグラフ構造化し、グラフ構造に対して領域分割することで負荷分散を行うものである。領域分割にはグラフの最小カット問題を求めるMETIS [13] を用い、分割領域の粒子数を均等にするとともに、領域間の通信量を最小化する分割を行う。

2. Euler 型 LSMPS 法
風上化に関して

LSMPSスキームは一般化された高次精度差分スキームであり、中心差分法の持つ性質を有する。そのため、Euler型LSMPSスキームでは、移流の卓越する移流拡散問題において、中心差分法と同様に数値振動が生じる。中心差分法では、数値振動を安定化する方法として風上化が有効であることが一般に知られている。中心差分と等価なGalerkin法においても同様に、数値振動の安定化に風上化が有効である。したがって、LSMPSスキームにおいても数値振動の安定化に風上化が有効と考えられる。

提案する風上化スキームは、LSMPSスキームの重み関数に風上化を施すための重み関数を乗じたスキームである。図1のように、重み関数を流速方向に直行する面で二分し、その前後を係数 α により重み付けすることで、風上化を施す。詳しくは、文献[10]を参考されたい。文献中では、移流拡散方程式に対して創成解を用いて精度検証と最適な α の値を考察している。

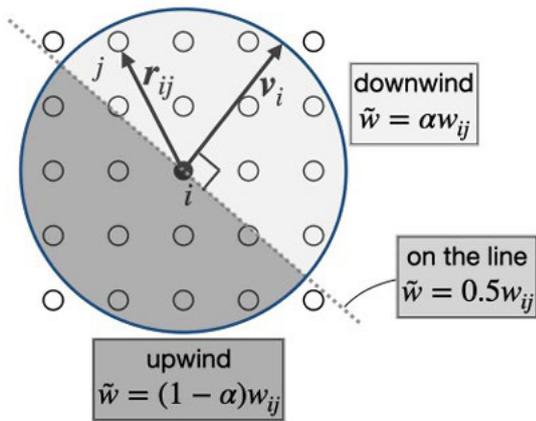


図1 風上化のための重み関数の概略図

非圧縮流れ解析への適用と妥当性検証

時間方向の離散化は、差分法において一般的な方法であり、MPS法などの粒子法にも非圧縮性流れ解析で一般に使用されるフラクショナルステップ法 [14] に基づいて行う。フラクショナルステップ法は、Navier–Stokes 方程式を時間方向に離散化した後、連続方程式を用いて速度と圧力を分離し、段階的に圧力と速度を求める手法である。

提案手法の解析例として、三次元キャビティ流れ問題を紹介する。対象領域は $0 \leq x \leq 1, 0 \leq y \leq 1, 0 \leq z \leq 1$ の三次元の立方体領域とする。図2に粒子解析モデルを示す。速度の境界条件は、上面 ($z=1$) に速度 $\mathbf{v} = [1, 0, 0]$ ，その他境界にはノンスリップ条件のDirichlet境界条件を設定する。圧力の境界条件は、底面中央に $p=0$ のDirichlet境界条件を設定し、その他壁面は圧力勾配ゼロのNeumann境界条件を設定する。参照解にはWong et al.の計算結果 [15] を用いる。 $x=0.5, y=0.5$ におけるx軸方向の速度を

測定し、参照解との比較を行う。Reynolds 数が1,000のケースにおいて、解析領域の分割数を各軸につき25,50,100と変化させて計算した結果を図3に示す。ただし、縦軸はy軸の座標、横軸は速度のx軸方向の成分を表す。図3より、空間解像度の向上に伴い数値解は参照解へ近づき、解の収束性を示す結果となった。解析領域の分割数を100に設定したケースにおいては参照解と良好な一致を示しており、高精度な計算が実現されている。

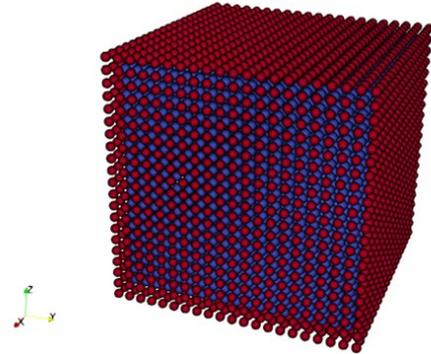


図2 三次元キャビティ流れ問題：粒子解析モデル (赤色の粒子は境界粒子を示す)

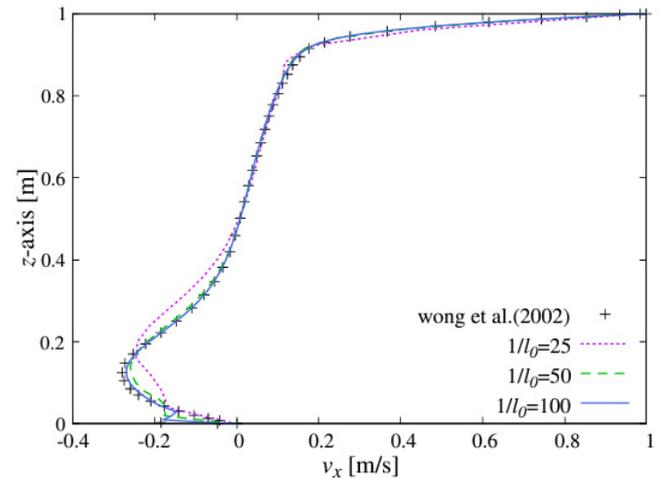


図3 三次元キャビティ流れ問題：解析結果の比較 (Re = 1000)

3. 分散メモリ型並列解析法
領域分割法に基づく分散メモリ型並列化

分散メモリ型並列計算環境は多数の計算ノードから構成されており、計算ノードにメモリが分散され、計算ノード間はネットワークで接続されている。各計算ノードは割り当てられたデータを用いて計算し、データを通信することで並列計算が行われる。大規模問題を取り扱う場合、メモリ容量の制約から単一の計算ノードではデータを保持できない状況が生じるため、分散メモリ並列環境を使用するためには事前に解析データの分割が必要である。解析データの分割では、高い並列性能を実現するため、各計算ノードで受け持つ計算負荷を均一化し、計算ノード間の通信量を減らすよう分割を行う。

Lagrange型粒子法に対し様々な動的負荷分散手法 [16,17] が開発されており、著者らもこれに関連する研究 [18] を行っているが、これらに対しEuler型粒子法では時間経過によって粒子は移動せず、粒子間の相互作用関係も変化しない。そのため、初期配置における静的負荷分散によって均一化された各計算

ノードの計算負荷は、時間経過した後においても維持される。したがって、初期配置における適切な静的負荷分散のみで、高い並列性能を達成することが可能である。本研究では、有限要素法などの解析において用いられる領域分割法を基盤とし、これを粒子法の粒子間相互作用関係に対応するグラフに適用可能な形で拡張した並列化手法を提案する。この手法では、初期配置における粒子の相互作用関係をグラフ構造データへ変換し、作成したグラフ構造データを均一に分割することによって負荷分散を行う。

図4はグラフ構造化のプロセスを表した図である。まず、生成された各粒子をグラフ理論におけるノードとして捉える。次に、各粒子の計算は影響半径内にある粒子の情報を参照するので、各粒子の影響半径内にある粒子とエッジを結ぶ。全粒子で同じ手続きを繰り返すことでグラフ構造を生成する。

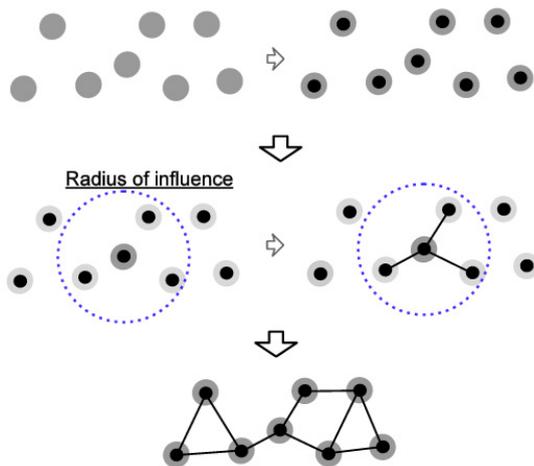


図4 粒子の相互作用関係に基づくグラフ構造化の概略図

グラフ構造に対する領域分割は、グラフ分割ライブラリの METIS [13] を用いたグラフの最小カット分割により行う。図5は METIS に付与した条件について示した図である。まず、各領域の計算量を均等にするための条件を付与する。Lagrange型では、粒子移動によって各粒子の影響半径内にある粒子数に差が生じ、一粒子あたりの計算コストが大きく変化する。そのため、粒子数の均等分割では、各計算ノードの計算負荷に大きな差が生じ、同期待ち時間が大幅に増加する恐れがある。一方、本研究は Euler型であるため粒子移動はなく、粒子を領域の等分割によって規則的に配置するため、常に各粒子の計算コストがおおよそ一定だと考えられる。そこで、本手法は各分割領域の粒子数が等しくなるような条件を付与した。

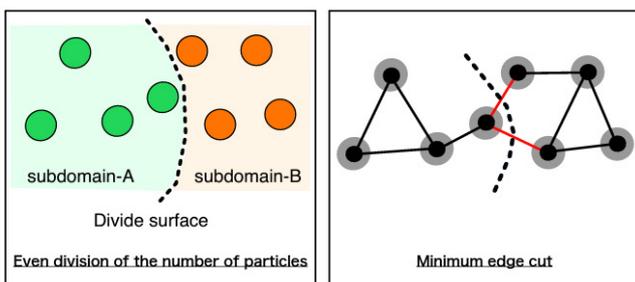


図5 グラフ構造に対する領域分割の条件

次に、領域間の通信量を最小にするための条件を付与する。各粒子の計算は、影響半径内にある粒子の情報、すなわちエッジで結ばれた粒子の情報を必要とするため、通信量は分割するエッジ数に強く依存する。そこで、本手法は均等分割の条件とともに、カットされるエッジ数が最小になるような条件を付与した。また、領域分割によって生じる分割面付近の粒子では隣接する領域にある粒子を影響半径内に含み、粒子情報を参照する必要がある。そこで、隣接領域にある参照粒子を自領域でも重複して保持し、重複した粒子の情報は、当該粒子が本来属する隣接領域からMPIを用いたデータ通信により取得する。例えば、影響半径を粒子間距離の3.1倍と設定した場合、重複して保持する参照粒子であるオーバーラッピング領域は図6が表すように6層となる。

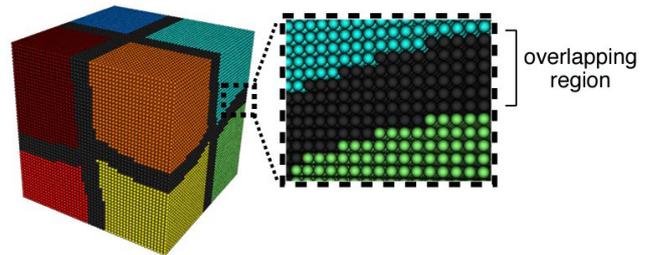


図6 オーバーラッピング領域の概略図

スケーリングテスト例 (定常移流拡散問題)

本検証では三次元定常移流拡散問題を対象にし、創成解を用いた方法で行う。分散メモリ型並列計算環境は東京大学の Oakbridge-CXスーパーコンピューターシステムを利用する。三次元定常移流拡散問題を解析対象とし、総粒子数を100万、1600万とした2ケースで検証を行なう。2ケースそれぞれで並列数を128, 256, 512, 1024, 2048 と変化させて計算する。ただし、全解析において1ノードあたりのコア数を16コアとなるように設定する。並列性能評価には、加速率 (speed-up factor) と並列化効率 (parallel efficiency) を指標として用いる。

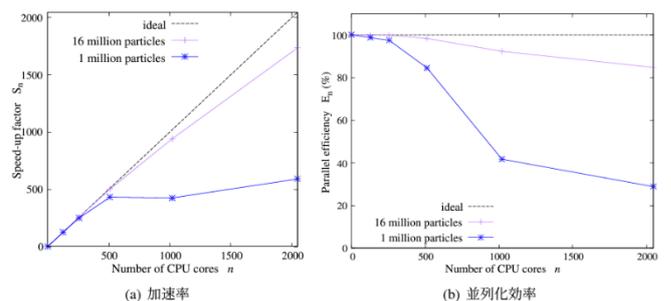


図7 定常移流拡散問題：加速率と並列化効率

図7より、100万粒子では512並列、1600万粒子では2048並列まで良好な加速率となり、80%以上の並列化効率が得られている。しかし、100万粒子では1024並列以上において加速率が大幅に低下している。これは、線形方程式の求解部分において、並列数の増加とともに通信時間の割合が増加していることが原因である。通信時間の増加は、並列数の増加に伴うオーバーラッピング領域の増加が主な原因である。領域間の通信ではオーバーラッピング領域の粒子情報を通信しているため、オーバーラッピング領域の大きさは通信量と正の相関関係にある。100万粒子の場合は、

分割された小領域に属する粒子数に対してオーバラッピング領域の粒子数が相対的に非常に大きくなり、減少する計算時間よりも増加する通信時間が上回ったため、全体の計算時間の加速率を大幅に低下させたと考えられる。このあたりの詳細な議論に関しては、文献 [10] を参考されたい。

4. おわりに

本稿では、既存の粒子法のカテゴリの境界上にある方法論の一つとして、完全 Euler 型の粒子法を紹介した。現在は、基本数理およびライブラリの開発のフェーズから、実問題の解析に向け、図8の例のように、複雑形状への適用を実施している。

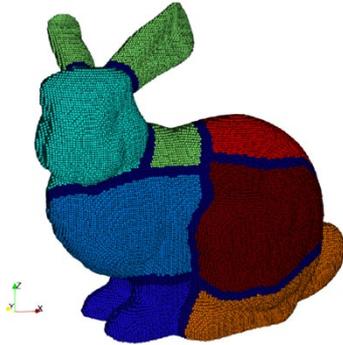


図 8 領域分割されたスタンフォードバニー形状の粒子解析モデル

本手法が標榜する「形状に対する柔軟性」は、構造格子系的手法と境界面捕捉法の組み合わせが得意とする分野と近い。著者らはこの構造格子系手法の研究を進めているが、現時点では、これら二つの方法論の利点や適正はかなり近く、その実用上の差異を論理的に説明できない、というのが正直な所であり、両者を比較して議論することが今後の課題といえる。

冒頭でも分類に関する議論をしたが、著者は、ある程度普及した数値解析手法には、ステレオタイプの分類や宗教に近い思想体系が付随すると思う。しかしながら、学術的、または工学的実用の観点から、このようなカテゴリに振り回されず、各方法論の要素をより詳細に分解し、それらを設計する思考が肝要である。著者も、横断的に様々な方法論の研究を続け、より深い理解を得るよう努めたい。

参考文献

[1] R. A. Gingold, J. J. Monaghan, Smoothed particle hydrodynamics: theory and application to non-spherical stars, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, Vol. 181 No. 3, pp. 375–389, 1977.

[2] S. Koshizuka, Y. Oka, Moving-particle semi-implicit method for fragmentation of incompressible fluid, *Nuclear Science and Engineering*, Vol. 123, No. 3, pp. 421–434, 1996.

[3] N. Cho, C. D. Martin, D. C. Segol, A clumped particle model for rock, *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, Vol. 44, No. 7, pp. 997–1010, 2007.

[4] M. Hori, K. Oguni, H. Sakaguchi, Proposal of FEM implemented with particle discretization for analysis of failure phenomena, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 53, pp. 681–703, 2005.

[5] T. Belytschko, Y. Y. Lu, L. Gu, Element-free galerkin methods, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 37, No. 2, pp. 229–256, 1994.

[6] W. K. Liu, S. Jun, Y. F. Zhang, Reproducing kernel particle methods. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, Vol. 20, No. 8–9, pp. 1081–1106, 1995.

[7] F. Hu, T. Matsunaga, T. Tamai, S. Koshizuka, An ALE particle method using upwind interpolation. *Computers and Fluids*, Vol. 145, pp. 21–36, 2017.

[8] M. Antuono, P. N. Sun, S. Marrone, S., A. Colagrossi, The δ -ALE-SPH model: An arbitrary Lagrangian-Eulerian framework for the δ -SPH model with particle shifting technique. *Computers & Fluids*, Vol. 216, p. 104806, 2021.

[9] T. Matsunaga, S. Koshizuka, Stabilized LSMPS method for complex free-surface flow simulation, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 389, p. 114416, 2022.

[10] 田中克治, 森田直樹, 三目直登, 風上化 LSMPS 法に基づく Euler 型解法による大規模並列解析, *日本計算工学会論文集*, Vol. 2023, p. 20230003, 2023.

[11] 山本悠貴, 洪基源, 三目直登, 山田知典, 吉村忍, 流体構造連成問題におけるメッシュ制御技術の時空間最適化, *日本機械学会論文集*, Vol. 84, No. 857, p. 17-00451, 2018.

[12] T. Tamai, S. Koshizuka, Least squares moving particle semi-implicit method. *Computational Particle Mechanics*, Vol. 1, No. 3, pp. 277–305, 2014.

[13] G. Karypis, V. Kumar, A fast and high quality multilevel scheme for partitioning irregular graphs, *SIAM Journal on Scientific Computing*, Vol. 20, No. 1, pp. 359–392, 1998.

[14] J. Kim, P. Moin, Application of a fractional-step method to incompressible Navier-Stokes equations, *Journal of Computational Physics*, Vol. 59, No. 2, pp. 308–323, 1985.

[15] K. L. Wong, A. J. Baker, A 3D incompressible Navier–Stokes velocity–vorticity weak form finite element algorithm, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, Vol. 38, No. 2, pp. 99–123, 2002.

[16] A. Ferrari, M. Dumbser, E. F. Toro, A. Armanini, A new 3D parallel SPH scheme for free surface flows, *Computers & Fluids*, Vol. 38, No. 6, pp. 1203–1217, 2009.

[17] K. Murotani, S. Koshizuka, T. Tamai, K. Shibata, N. Mitsume, S. Yoshimura, S. Tanaka, K. Hasegawa, E. Nagai, T. Fujisawa, Development of hierarchical domain decomposition explicit MPS method and application to large-scale tsunami analysis with floating objects, *Journal of Advanced Simulation in Science and Engineering*, Vol. 1, No. 1, pp. 16–35, 2014.

[18] N. Mitsume, T. Yamada, S. Yoshimura, Parallel analysis system for free-surface flow using MPS method with explicitly represented polygon wall boundary model, *Computational Particle Mechanics*, Vol. 7, No. 2, pp. 279–290, 2020.



高精度粒子法による数値流体解析とその高精度化原理について

松永 拓也
東京大学

1. はじめに

連続体力学の数値解析手法はしばしば格子法と粒子法の2つに分けられる。両者の違いはシンプルに、微分方程式の離散化にメッシュを使用するかしないかである。メッシュを使用しない粒子法では、連続体を有限個の粒子の集まりとして表し、個々の粒子の運動によって連続体の挙動を計算する。格子法に対する粒子法の利点は複数あり、メッシュ生成にかかる煩雑な作業を省略できることのほか、着目する物体にのみ計算点を配置すればよく、計算領域全体を覆うようなメッシュは不要であること、物体の変形に伴うメッシュ歪みによって計算が破綻しないこと、などが挙げられる。このような性質から、粒子法は飛沫の発生を伴うような複雑な自由表面流れや界面の大変形を伴う混相流の解析に適した手法として脚光を浴び、現在では広範なエンジニアリング分野ならびにコンピュータグラフィックスで応用されている。

一方で、格子法に比べ劣っている点として、解析精度の低さが幾度となく指摘されてきた。実際、これまで広く用いられてきた粒子法には、空間離散化に適合性がなく、解像度を上げたときの誤差の収束性を数学的に担保することができなかった。そうした背景のもと、粒子法の高精度化を目指した取り組みが多くの研究者によって実施されてきた。それらの研究成果の積み重ねに加え、ここ数年間の技術進展は特に目覚ましく、現在では精度の問題の大部分が解決済みであると筆者は考えている。

本稿では、高精度化された粒子法の一例として、筆者ら[1]によって2022年に開発された「安定化LSMPS法」を取り上げる。安定化LSMPS法は、自由表面の大変形や複雑なトポロジー変化を考慮できる点は保持しながら、従来手法よりも解析精度を大きく向上できる特徴がある。その高精度化に重要な役割を果たすいくつかの要素技術を解説するとともに、高精度化がもたらす利点の一部を実際の解析例を使って紹介する。

2. 空間離散化スキーム

2.1 LSMPSスキーム

先に述べたように、従来の粒子法の空間離散化には適合性がない。ここでいう従来の粒子法とは、SPH (Smoothed Particle Hydrodynamics) 法[2]やMPS (Moving Particle Semi-implicit) 法[3]である。これらの初期の空間離散化モデルは一般に0次精度であり、粒子間隔 Δx について $\Delta x \rightarrow 0$ の極限をとっても数学的には元の微分方程式には一致しない。すなわち、空間解像度を上げたときに数値解が真の解に近づくことが保証されず、厳密解のない一般の問題に対して計算結果の信頼性を評価すること自体が困難である。これは信頼性が重要となる製造業での利用にとって致命的な問題になりうる。

この適合性の問題を解決する新しい空間離散化スキームは複数考案されている。代表的なものは、CM (Corrective Matrix) スキーム[4]とLSMPS (Least Squares MPS) スキーム[5]である。

両者は共に、Taylor展開に基づく多項式近似と最小二乗法を用いて構築されており、原理的には共通する部分が多い。CMスキームは、はじめ1階微分を1次精度で離散化する手法として提案され、のちに1階微分2次精度および2階微分1次精度を与える改良が施された[6]。対して、LSMPSスキームは任意階微分を任意次数の精度で離散化する手法である。CMスキームはLSMPSスキームのある特別な場合として整理でき、LSMPSスキームはより一般化された定式化であると解釈できる。その他の相違点としては、LSMPSスキームには多項式近似における0次の項を未定係数として含める定式化があり、物理量の内挿値を求めるときなどにも使用できる。

安定化LSMPS法では、すべての空間離散化に2次のLSMPSスキームがベースとして用いられ、そこに追加項を加えることで数値安定性が補強されている。改良されたCMスキーム[6]でも同じ次数の多項式近似が使用されており、適合性という観点では同じ精度をもつ。しかし多項式基底が異なる。この差異に起因して、安定化LSMPS法で用いられている一部の定式化がCMスキームでは再現できない。

2.2 数値安定性の改善

実は、最小二乗法あるいは多項式近似を用いた適合性のあるメッシュフリーな空間離散化スキーム自体は古くから存在しており、1990年頃には流体解析への適用も見られている[7,8]。それにも関わらず粒子法で既存の高精度な離散化スキームが普及しなかったのは、数値的に不安定化しやすい性質が関係していると考えられる。

最小二乗法を用いたスキームは、非一様な粒子配置に対しても精度を保てる一方で、粒子配置の乱れ・偏りが大きい場合や近傍粒子数が少ない場合にはしばしば極端に大きな数値誤差を発生する。粒子法が本領を発揮する自由表面流れの解析では、自由表面付近において偏った粒子配置が避けられず、この不安定化の問題が顕在化する。この問題の解決が粒子法の高精度化にとって最重要の課題であったとの見方もある。

現在では、不安定化のメカニズムも調査されており[9]、不安定化を抑制する方法が複数考案されている。すべてを詳しく解説することはしないが、概略のみを述べれば以下の4つのアプローチが挙げられる。

- (i) 従来スキームの併用[10]：流体領域内部では最小二乗法スキームを使用し、自由表面では従来の適合性のないスキームに切り替える。
- (ii) 自由表面判定の最適化[9]：粒子配置を元に計算される特別な指標を用いて不安定化を事前予測し、その予測に基づいて不安定化が発生しないような自由表面粒子分布に修正する。
- (iii) 離散化スキームの修正[1]：最小二乗法における目的関

数に境界条件ならびに人工的な安定化項を組み込むことで、悪条件化を抑制する。安定化LSMPS法で用いられる。

(iv) 移動サーフェスマッシュ [11]: 自由表面を陽的な表面メッシュとして表し、メッシュ節点を自由表面上の計算点として扱う。

3. 壁境界の取り扱い

3.1 ポリゴンモデル

粒子法では、壁面の形状を表現する方法として、粒子を用いるものとポリゴンを用いるものがあるが、安定化LSMPS法ではポリゴンをういた表現が採用されている。粒子を用いる場合、複雑形状の表現に難がある点に加え、壁表面の凹凸の存在によって解析精度が低下する問題が指摘される。ポリゴンをういた場合には、これらの問題点が解消されるだけでなく、粒子と壁面の相対位置関係や壁面上の法線ベクトルが陽的に与えられることから、境界上で課すべき拘束条件をより厳密に定義できる利点がある。

3.2 物理的境界条件

物体表面で考慮すべき境界条件には、ノースリップ壁境界条件とフリースリップ壁境界条件の2つがある。ノースリップ条件では、速度に関してディリクレ境界条件、圧力に関してノイマン境界条件が課され、フリースリップ条件では、速度にもノイマン条件が含まれる。従来の粒子法ではノイマン境界条件を拘束することが原理的に難しく、壁面付近での圧力の計算精度やフリースリップ条件の適用に課題があった。

一方、安定化LSMPS法では、境界上に課される任意の偏微分方程式、すなわちディリクレ境界条件とノイマン境界条件の両方が、多項式近似の枠組みを用いて空間離散化スキームの中に直接組み込まれる[12]。これにより、境界条件の精度が向上することに加え、温度場などの解析におけるより複雑な境界条件に対しても適用可能となっている[13]。

3.3 数値的境界条件

粒子法特有の問題として、境界近傍での粒子数密度の評価が挙げられる。粒子数密度は粒子分布の粗密度を表すスカラー量であり、通常は近傍粒子に対して特定の重み関数の和をとったものとして定義される。しかし、境界付近では流体の存在しない領域を影響半径に含むため、粒子数密度を直接計算すると過小に評価され、実際の粒子分布の粗密度を正しく反映できない。その結果、壁面付近で自由表面粒子の誤判定が起りやすいほか、粒子分布に偏りが生じて数値不安定化を引き起こすなどの問題がある。

安定化LSMPS法では、この問題への対処として体積積分を用いたアプローチ[14]が採用されている。これは、境界の外側の領域に仮想的な微小粒子が無制限存在すると見做し、重み関数を被積分関数とする体積積分によって粒子数密度を補正するものである。ポリゴンで表される任意の形状に対して適用することができるため、複雑形状への適用性に優れている。

4. 自由表面の取り扱い

4.1 自由表面判定

従来の粒子法では、自由表面判定によって各粒子が自由表面上にあるものか、内部にあるものかを二値的に区別していた。一方、安定化LSMPS法では、粒子タイプを更に細分化し、内部粒

子、準自由表面粒子、自由表面粒子、スプラッシュ粒子の4種に分ける。これは、適用する境界条件や、離散化スキームにおける人工的な安定化項、後述する粒子分布均一化の取り扱いなどを条件分岐によって細かく変更することにより、様々な粒子配置に対して必要十分な数値安定化を加えた最適な計算方法を選択して、複雑な流れの計算でも数値安定性と解析精度を両立することを狙ったものである。例えば、元々数値的に安定である内部粒子には人工的な安定化項を考慮せず、自由表面付近に存在する準自由表面粒子および自由表面粒子には粒子配置の偏りに起因する不安定化を回避するための安定化を加える。スプラッシュ粒子はほぼ孤立した粒子であり、連続体の一部としてではなく、等速直線運動する質点に近い取り扱いとなる。

粒子タイプの判定法は、従来と同様の粒子数密度や近傍粒子数のしきい値を用いた方法に加え、粒子配置の偏りの大きさを表す指標や、幾何的な判定方法[15]などを組み合わせて行う。判定のパラメータとして、いくつかのしきい値が必要となるが、2次元・3次元共に汎用的に使用できる設定値が多数のシミュレーションの計算によって既に得られており、対象とする問題に応じて解析者が自ら調整する必要はほとんどない。

4.2 サーフェスフィッティング

自由表面上の法線ベクトルは、境界条件や粒子分布の均一化操作などに用いられるため重要である。従来の粒子法では、自由表面の法線ベクトルを粒子数密度の勾配に基づいて決定することが一般的であった。しかし、この方法では壁近傍で法線ベクトルの誤差が大きくなり、例えば、自由表面を有する問題において数値対流が発生して定常解への収束を阻害する原因となる。

安定化LSMPS法では、自由表面の法線ベクトルの算出に、サーフェスフィッティングを用いている。各自由表面粒子上で局所的に定義される界面形状が陰関数による曲面表現を用いて表されるものとし、近傍の自由表面粒子分布と最も適合する形状を代数距離の2乗和を最小化する問題として定式化して求める。結局これは固有値問題に帰着され、自由表面粒子分布から決まる特定の行列の最小固有値に対応する固有ベクトルを求めれば、自由表面上の法線ベクトルが算出される。このサーフェスフィッティングを用いる方法では、壁近傍での法線ベクトルの精度低下がなく、静水圧問題のように繊細な解析においても定常解に収束することが確認されている。

5. 粒子分布の均一化

MPS法では、非圧縮性条件を粒子数密度一定の条件に置き換え、粒子数密度の偏差を組み込んだ圧力ポアソン方程式を解くことで粒子分布の均一化を図っていた。しかし、境界付近において粒子数密度の正確な評価が困難なことなどに起因し、圧力場の誤差が大きい問題が指摘される。

安定化LSMPS法では、粒子分布の均一化を圧力計算から完全に分離することで、粒子数密度が圧力場の計算結果に直接影響しないような工夫がされている。体積保存性を満たすためには、粒子数密度一定の条件から導出されるポアソン方程式を解くことが必要であるが、圧力ポアソン方程式とは異なり解の要求精度は低い。従って、ポアソン方程式を離散化して得られる代数方程式に対して緩和係数を導入することで、収束性を良くし、線形ソルバーにかかる計算時間を大きく短縮することができる。結果とし

て、問題の分割によって解くべき連立一次方程式が増えるものの、追加される計算コストは全体の数パーセント程度に抑えられる。

体積保存性に加えて考慮すべき問題として、粒子分布の非等方向性の蓄積がある。粒子を流れに完全に追従して移動させる場合、ある特定の方向に粒子分布の粗密が現れる。この粒子分布の非等方向性が進行すると、空間離散化スキームの不安定化を引き起こす。これは体積保存性とは別の問題であり、粒子分布を一様化する操作が必要となる。この問題への対処には、粒子シフティング[16]を使用する。粒子シフティングは近傍粒子との相互作用を考えるだけでよく、粒子の移動量を陽的に計算できる。求めた粒子移動量は、体積保存性を満たすための粒子位置補正に付加して考慮する。

6. 計算例

従来の粒子法の代表例であるMPS法を比較対象として、安定化LSMPS法による計算例を示す。

図1は、重力による流体塊の落下を計算した結果である。初期時刻において一定体積の流体を容器上方に充填し、鉛直下向きに重力を加えたときの流体運動の移り変わりを表している。MPS法では、重力によって直ちに流体が自由落下し、底面に衝突する。一方、安定化LSMPS法では、はじめおよそ1秒の間、流体は容器上方に留まって静止し、その後、界面の擾乱が次第に成長して崩壊する様子が示されている。

このように定性的にも大きく異なる流体挙動が現れる原因は負圧の取り扱いの違いにある。MPS法では負圧を考慮すると著しく数値不安定化するため、負の圧力値をゼロに置き換えるリミッターが適用される。その結果、本来負圧によって発生する流体内部および流体-壁面間の引力が計算の中では考慮されず、MPS法では単に流体が落下する挙動しか観測できない。安定化LSMPS法では、離散化スキームの高精度化ならびに粒子数密度を圧力ポアソン方程式から除去したことによって負圧を直接考慮しても安定に計算できるようになっている。この改善点により、負圧を含む圧力場が形成されて圧力勾配と重力とが釣り合い、流体が静止する準平衡状態を再現することができたのである。

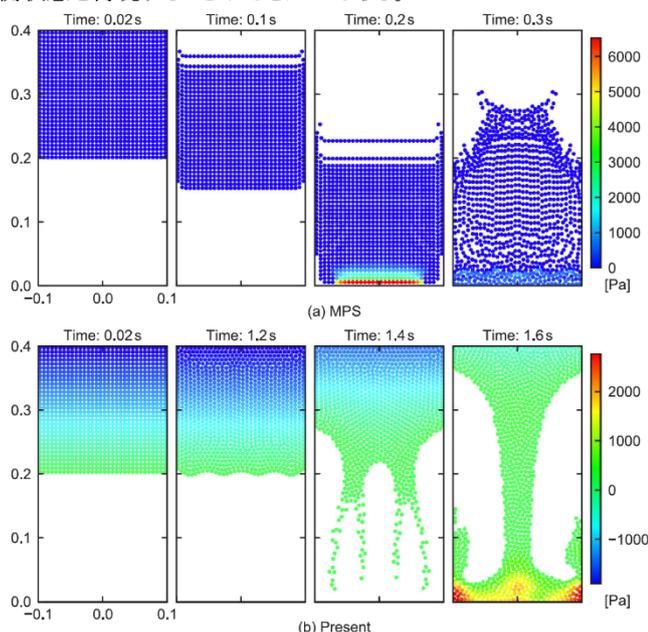


図1 容器内に半充填された流体の重力による落下挙動のシミュレーション計算の比較(図中の"Present"は安定化LSMPS法、色は圧力を表す) [1]

負圧を伴う流れは普遍的に存在するものであり、負圧の発生を忠実に計算できることは極めて意義が大きい。例えば、物体後流に発生する渦や、壁面を伝って流れる液膜、伸長する液柱のくびれ、ポンプによる液体の吸い上げなど、負圧の考慮なしには再現できなかった流体现象も、高精度粒子法を用いることによって解析が可能になると考えられる。

7. おわりに

粒子法による流体シミュレーションは、商用ソフトウェアの存在もあり、産業界への普及が進行している。しかし、精度要求を満足しないことや、そもそも対象とする現象が再現できないといった技術的な課題に直面するケースがあることは想像に難くない。高精度粒子法を使うと、これまでより誤差が小さくなるだけでなく、従来は解けなかったような問題も解析できるようになってきている。高精度化技術が普及し、さらに発展することによって、粒子法シミュレーションがものづくり等の現場で実用的貢献を果たすことに期待する。

参考文献

- [1] T. Matsunaga, S. Koshizuka, Stabilized LSMPS method for complex free-surface flow simulation, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 389 (2022) 114416.
- [2] J.J. Monaghan, Smoothed particle hydrodynamics, *Annual Review of Astronomy and Astrophysics* 30 (1992) 543-574.
- [3] S. Koshizuka, Y. Oka, Moving-particle semi-implicit method for fragmentation of incompressible fluid, *Nuclear Science and Engineering* 123 (1996) 421-434.
- [4] A. Khayyer, H. Gotoh, Enhancement of stability and accuracy of the moving particle semi-implicit method, *Journal of Computational Physics* 230 (2011) 3093-3118.
- [5] T. Tamai, S. Koshizuka, Least squares moving particle semi-implicit method: An arbitrary high order accurate meshfree Lagrangian approach for incompressible flow with free surfaces, *Computational Particle Mechanics* 1 (2014) 277-305.
- [6] G. Duan, A. Yamaji, S. Koshizuka, B. Chen, The truncation and stabilization error in multiphase moving particle semi-implicit method based on corrective matrix: Which is dominant?, *Computers & Fluids* 190 (2019) 254-273.
- [7] S. Koshizuka, Y. Oka, Y. Togo, S. Kondo, Interpolating matrix method: A finite difference method for arbitrary arrangement of mesh points, *Journal of Computational Physics* 75 (1988) 444-468.
- [8] J.T. Batina, A gridless Euler/Navier-Stokes solution algorithm for complex-aircraft applications, *AIAA Paper* 93-0333 (1993).
- [9] G. Duan, T. Matsunaga, S. Koshizuka, A. Yamaguchi, M. Sakai, New insights into error accumulation due to biased particle distribution in semi-implicit particle methods, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 388 (2022) 114219.
- [10] G. Duan, S. Koshizuka, A. Yamaji, B. Chen, X. Li,

- T. Tamai, An accurate and stable multiphase moving particle semi-implicit method based on a corrective matrix for all particle interaction models, *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 115 (2018) 1287-1314.
- [11] T. Matsunaga, S. Koshizuka, T. Hosaka, E. Ishii, Moving surface mesh-incorporated particle method for numerical simulation of a liquid droplet, *Journal of Computational Physics* 409 (2020) 109349.
- [12] T. Matsunaga, A. Södersten, K. Shibata, S. Koshizuka, Improved treatment of wall boundary conditions for a particle method with consistent spatial discretization, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 358 (2020) 112624.
- [13] Z. Wang, G. Duan, T. Matsunaga, T. Sugiyama, Consistent Robin boundary enforcement of particle method for heat transfer problem with arbitrary geometry, *International Journal of Heat and Mass Transfer* 157 (2020) 119919.
- [14] T. Matsunaga, N. Yuhashi, K. Shibata, S. Koshizuka, A wall boundary treatment using analytical volume integrations in a particle method, *International Journal of Numerical Methods in Engineering* 121 (2020) 4101-4133.
- [15] S. Marrone, A. Colagrossi, D. Le Touzé, G. Graziani, Fast free-surface detection and level-set function definition in SPH solvers, *Journal of Computational Physics* 229 (2010) 3652–3663.
- [16] A. Khayyer, H. Gotoh, Y. Shimizu, Comparative study on accuracy and conservation properties of two particle regularization schemes and proposal of an optimized particle shifting scheme in ISPH context, *Journal of Computational Physics* 332 (2017) 236-256.

部門からのお知らせ

第35回計算力学講演会 (CMD2022) 優秀講演表彰報告



飯田 明由
豊橋技術科学大学

第35回計算力学講演会（後援 鹿児島大学工学部）において、座長および参加者に評価をお願いした結果に基づき選考を行い、計算力学部門一般表彰として優秀講演表彰2名、優秀技術講演表彰1名、ならびに日本機械学会若手優

秀講演フェロー賞5名を表彰することとなりました。表彰状を受賞者にお送りするとともに、本誌上に公開して、心よりお祝い申し上げます。

（以下敬称略, 五十音順）

● 優秀講演表彰

久保 淳(東京大学)

分子動力学法によるFCC 金属中の転位近傍の応力場解析

澤田 有弘(産業技術総合研究所)

流体・構造連成問題に対するLaplacian-perturbed Lagrange 未定乗数定式化

● 優秀技術講演表彰

荒尾 修(株式会社 デンソー)

放熱材料内部ファイラーの実分散状態をモデル化した3次元熱伝導解析

● 日本機械学会若手優秀講演フェロー賞

加藤 大輝(豊田工業大学)

CFRP シェル構造の材料配向角と形状・トポロジーの同時最適化

北嶋 航太(北海道大学)

Elmer による胸部大動脈解離を対象とした流体-構造連成解析

西野 博貴(中央大学)

アルミニウム合金/エポキシ樹脂界面の接着強度に及ぼす表面改質の影響

人見 匡俊(金沢大学)

ヘテロナノ組織チタンの粒界から発生する変形モードの負荷方向依存性

馬込 望(筑波大学)

高精度重合メッシュ法を用いた領域分割型並列流体解析
以上

● 優秀講演表彰



久保 淳



澤田 有弘



荒尾 修

● 日本機械学会若手優秀講演フェロー賞



加藤 大輝



北嶋 航太



西野 博貴



人見 匡俊



馬込 望



2023年度年次大会部門企画について

伊井 仁志
東京都立大学システムデザイン研究科機械システム工学域

日本機械学会2023年度年次大会は、2023年9月3日(日)から9月6日(水)までの日程で、東京都立大学南大沢キャンパス(〒192-0397 東京都八王子市南大沢1-1)で開催される予定です。本大会は「機械工学の英知を結集しゼロエミッション社会を拓く」をキャッチフレーズに、「安全安心」、「グリーン&デジタル」、「共生社会」の3つを主要テーマとして開催されます。特別企画や他部門とのジョイントセッションなどが企画されており、企業の方、学生の方も含めて、多くの方にご参加頂ける内容となっております。年に1度の部門の枠

を超えた学術交流の場として、研究成果のご発表や最新研究情報の収集、研究者ネットワークの構築などにご活用下さい。また、他部門と合同で部門同好会の開催を予定しています。本大会の詳細は2023年度年次大会ホームページ(<https://confit.atlas.jp/guide/event/jsme2023/top>)をご覧ください。

計算力学部門では、以下の特別企画・オーガナイズドセッションを企画致しております。皆様のご参加を心よりお待ちしております。

【特別企画】先端技術フォーラム

「人・社会の不確かさ・複雑さを含めた拡張デジタルツインの構築を目指して」

(計算力学部門, 生産システム部門, 設計工学・システム部門)
平野徹(ダイキン情報システム)

【特別企画】ワークショップ

「循環器疾患の治療デバイス・治療法の進展と工学への期待」
(医工学テクノロジー推進会議, 機械力学・計測制御部門, バイオエンジニアリング部門, 材料力学部門, 機素潤滑設計部門, 流体工学部門, ロボティクス・メカトロニクス部門, 熱工学部門, 計算力学部門, 情報・知能・精密機器部門, マイクロ・ナノ工学部門, 日本循環器学会)
岩崎清隆(早稲田大学)

【オーガナイズドセッション】

「燃料電池・二次電池とナノ・マイクロ現象」

(流体工学部門, マイクロ・ナノ工学部門, 熱工学部門, 計算力学部門, 材料力学部門, 動力・エネルギー部門)
柘淵郁也(東京大学), 徳増崇(東北大学), 田部豊(北海道大学), 大島伸行(北海道大学), 佐藤一永(東北大学), 鹿園直毅(東京大学), 花村克悟(東京工業大学)

「1DCAE・MBDと物理モデリング」

(設計工学・システム部門, 機械力学・計測制御部門, 機械材料・材料加工部門, 流体工学部門, 熱工学部門, 計算力学部門)
大富浩一(Ohtomi Design Lab.), 山崎美稀(日立ハイテク), 脇谷伸(広島大学), 野間口大(大阪大学), 岩田宜之(東芝インフラシステムズ), 西田怜美(DataLabs), 畑陽介(ブラザー工業), 福江高志(金沢工業大学)

「医工学テクノロジーによる医療福祉機器開発」

(医工学テクノロジー推進会議, 機械力学・計測制御部門, 流体工学部門, 計算力学部門, バイオエンジニアリング部門, ロボティクス・メカトロニクス部門, 情報・知能・精密機器部門, 材料力学部門, 熱工学部門, マイクロ・ナノ工学部門, 機素潤滑設計部門)
宮田昌悟(慶應義塾大学), 白樫了(東京大学), 塚本哲(防衛大学校), 松浦弘明(東京大学)

お問い合わせ先: 伊井 仁志(東京都立大学) sii@tmu.ac.jp



第36回計算力学部門講演会 (CMD2023) 開催案内

計算力学講演会実行委員会幹事
横山 博史
豊橋技術科学大学 機械工学系

第36回計算力学講演会 (CMD2023) を愛知県豊橋市にて、対面形式にて開催することとなりました。新型コロナウイルス (COVID-19) の影響により、計算力学講演会は2020年には中止となり、2021年、2022年は遠隔方式で行われました。久しぶりの対面での開催となります。

CMD2023の会場は、豊橋商工会議所(愛知県豊橋市, 下図)です。開催期間は2023年10月25日(水)～27日(金)です。一般セッション、フォーラムに加え、27のオーガナイズドセッション(予定)を企画しており、計算力学や機械工学に関連する幅広い分野について議論できます。まずは、4月上旬～6月上旬にかけて講演申込み受付を行う予定ですので、積極的なお申込みをお待ちしております。詳しくは、以下のホームページをご覧ください。

講演会HP: <https://www.jsme.or.jp/conference/cmdconf23/index.html>

特別講演は、ミシガン大学名誉教授、株式会社コンボン研究所代表取締役社長の菊地昇氏にお引き受けいただきました。貴重な講演を頂ける機会となるかと存じますので、是非ご参加頂ければ幸いです。詳細は講演会HPをご覧ください。

今年度は講演会の懇親会は実施致しませんが、会場となる商工会議所は豊橋駅周辺の飲食店街へも近い立地です。皆様には是非豊橋に来て頂き、食べ物も満喫して頂ければと思っております。

今年度からの試みとして、昼食の時間を使って、株式会社JSOL、計測エンジニアリングシステム株式会社、Hexagon、ダッソー・システムズ株式会社の4社によるランチョンセミナーを企画しております。お弁当も用意する予定ですので、是非ご参加頂ければ幸いです(受付傍もしくは機器展示会場で参加チケットを配布予定)。

講演会に関する主なスケジュールは以下を予定(2023年3月現在)しております。参加登録に関しましては、事前登録制とさせていただきますので、期日内にご登録頂ければ幸いです。

講演申込み受付 4/10～6/9

参加事前登録 8/7～10/10



会場となる豊橋商工会議所(<https://www.toyohashi-cci.or.jp>)

それでは、皆様にとって充実した講演会となるように、飯田明由実行委員長(豊橋技術科学大学)を中心に実行委員一同全力を尽くして参りたいと思いますので、どうぞよろしくお願い致します。

オーガナイズドセッション(予定)

GS 一般セッション

OS-01 設計のための数値モデリング

OS-02 複合・連成現象の解析と力学

OS-03 計算力学と最適化

OS-04 逆問題とデータ同化の最新展開

OS-05 粒子法/メッシュフリー法とその関連技術

OS-06 オープンソースベースのCAEツールの可能性

OS-07 サロゲートモデルによる解析・最適化・不確定性評価

OS-08 フェーズフィールド法と関連トピックス

OS-09 直交格子・AMR法の流体シミュレーション

OS-10 電子デバイス・電子材料と計算力学

OS-11 量子コンピュータと計算力学

OS-12 CAE/CAD/CAM/CG/CAT/CSCW

OS-13 大規模並列・連成解析と関連話題

OS-14 半導体産業を牽引する計算機シミュレーションー結晶成長からデバイス製造の最先端技術までー

OS-15 市販CAEソフトを用いた難問題のモデリング・シミュレーション

OS-16 高分子材料に関わる計算力学と機械学習及び関連話題

OS-17 計算電磁気学と関連話題

OS-18 計算バイオメカニクス

OS-19 計算力学/AIと社会・環境・防災シミュレーションの融合

OS-20 材料の組織・強度に関するマルチスケールアナリシス

OS-21 電子・原子・マルチシミュレーションに基づく材料特性評価 (OS-20, 21は合同オーラルセッションおよびポスターセッションも開催)

OS-22 高次構造と機械的特性

OS-23 破壊力学とき裂の解析・き裂進展シミュレーション

OS-24 深層学習と機械学習

OS-25 境界要素法の高度化と最新応用

OS-26 周期構造とシミュレーション技術【応用物理学会合同OS】

OS-27 企業におけるCAEおよび産学官連携の事例

フォーラム(予定)

F-01 計算力学を支える数値解析技術ー先進的手法への期待ー

F-02 機械学習・統計数理と計算力学の融合による新しい価値創出(その3)

本内容は2023年3月現在の予定となり、変更する可能性があります。最新の情報は講演会HPにてご確認ください。

《各行事の問い合わせ、申込先》

日本機械学会計算力学部門担当 石澤 章弘 E-mail: ishizawa@jsme.or.jp

〒162-0814 東京都新宿区新小川町4番1号 KDX飯田橋スクエア2階 TEL 03-4335-7610 FAX 03-4335-7618

計算力学部門ニュースレター No. 69 : 2023年5月31日発行

編集責任者：広報委員会委員長 山田 崇恭

ニュースレターへのご投稿やお問い合わせは下記の広報委員会幹事までご連絡ください。

なお、各記事の文責は著者にあります。

広報委員会幹事 森 正明 E-mail: m-mori@cybernet.co.jp

サイバネットシステム株式会社

デジタルエンジニアリング事業本部 エンジニアリング事業部 メカニカル技術部

〒101-0022 東京都千代田区神田練塀町3