

DPD 法を用いた対向ポアズイユ流れにおける計算誤差の評価

Evaluation of computational error in DPD simulation of countering-Poiseuille flow

- 山田 格, 名工大院, 愛知県名古屋市昭和区御器所町, E-mail:yamada.toru@nitech.ac.jp
 玉野真司, 名工大院, 愛知県名古屋市昭和区御器所町, E-mail:tamano.shinji@nitech.ac.jp
 森西洋平, 名工大院, 愛知県名古屋市昭和区御器所町, E-mail:morinishi.yohei@nitech.ac.jp
 Toru YAMADA, Nagoya Institute of Technology, Gokisocho, Showa-ku, Nagoya, Aichi
 Shinji TAMANO, Nagoya Institute of Technology, Gokisocho, Showa-ku, Nagoya, Aichi
 Yohei MORINISHI, Nagoya Institute of Technology, Gokisocho, Showa-ku, Nagoya, Aichi

The dissipative particle dynamics (DPD) method is one of coarse-grained particle simulation methods in which each DPD particle is considered to represent a number of actual molecules. This study focuses on evaluating the computational error of the DPD simulations under flow conditions which has not been well studied yet. In this study, countering-Poiseuille flows are generated in a rectangular computational domain by applying body forces to DPD particles. The computational error is estimated by using kinetic and configurational temperatures which are based on kinetic and potential energies of the domain. The results in this study lead to the following main findings: The computational error in stationary situations is significantly influenced by the shape of weight function of the dissipative force; The error under countering-Poiseuille flow conditions is influenced by the body force applied to DPD particles and the influence becomes larger as time increment is smaller.

1. 緒言

散逸粒子動力学 (dissipative particle dynamics : DPD) 法⁽¹⁾は、散逸粒子 (DPD 粒子) と呼ばれる仮想粒子を仮定し、流体の輸送現象を観察するための粒子シミュレーション法の一つである。本手法はメソスケール (分子スケールと連続体スケールの中間的な空間スケール) における輸送現象の解析に有効であり、これまでに燃料電池、コロイド懸濁液、さらには界面活性剤の輸送現象解明のための数値計算などが行われている⁽²⁾。一方で、DPD 法の計算誤差の軽減に関する研究も、同計算手法の信頼性向上の観点から近年盛んに行われている。

DPD 法の計算誤差の軽減に関する研究は、主に DPD 熱欲項 (次節記載の散逸力および揺動力) の改良および時間進行法の改良に大別される。筆者らは、複雑流体などを再現する既存の DPD モデリング手法に対し修正を必要としない、という後者の特徴に着目し、時間進行法の改良による計算誤差の軽減に努めてきた。その結果、静止状態の系において、一般的に DPD 法で用いられる Modified-Verlet (MV) 法⁽³⁾を用いた場合に現れる誤差に対して、分離型ルンゲクッタ (PRK) 法を用いることにより大幅な誤差の軽減を達成した⁽⁴⁾。しかしながら、動的環境下において時間進行法の改良の計算誤差に対する影響に着目した研究はあまり見られない。

そこで本研究では、全方向を周期境界に囲まれた系における対向ポアズイユ流れ計算⁽⁵⁾を実施し、同計算の計算誤差に対する時間進行法の影響を調査した。また、静止状態の計算については、DPD パラメータのひとつである流体の粘度を決定する散逸力重み関数の形状係数に着目し、この計算誤差に対する影響を調べた。

2. 計算手法

2-1 支配方程式

DPD 法では、粒子はその cut-off 半径 r_c の範囲内にある他の粒子と干渉し合い、その運動量を交換する。粒子 i に着目した運動方程式は以下で表される⁽⁶⁾。

$$d \begin{bmatrix} \mathbf{q}_i \\ \mathbf{p}_i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{p}_i/m_i \\ \mathbf{F}_i^C + \mathbf{F}_i^D + \mathbf{F}_i^R \end{bmatrix} dt \quad (1)$$

ここで、 \mathbf{q}_i , m_i , \mathbf{p}_i は粒子 i の位置、質量、および運動量 ($\mathbf{p}_i = \mathbf{v}_i / m_i$, \mathbf{v}_i : 粒子 i の速度) を表す。また、 \mathbf{F}_i^C は他の粒子 (粒子 j) と

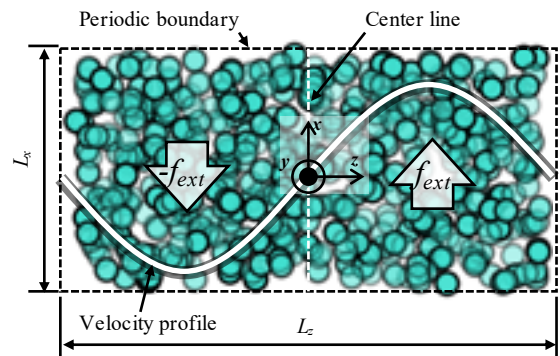


Fig. 1: Schematic of the computational domain under the countering-Poiseuille flow driven by a body force f_{ext} where the turquoise circles represent DPD particles.

の間に作用するポテンシャルによる保存力、 \mathbf{F}_i^D は運動量交換による散逸力、 \mathbf{F}_i^R は粒子の分布に基づいた熱運動を引き起こす揺動力を表現し、それぞれ以下の式で記述される⁽⁶⁾。

$$\mathbf{F}_i^C = \sum_{j \neq i} a_{ij} \left(1 - \frac{r_{ij}}{r_c}\right) \mathbf{e}_{ij} \quad (2)$$

$$\mathbf{F}_i^D = - \sum_{j \neq i} \gamma \omega^D(r_{ij}) (\mathbf{e}_{ij} \cdot \mathbf{v}_{ij}) \mathbf{e}_{ij} \quad (3)$$

$$\mathbf{F}_i^R = \sum_{j \neq i} \sigma \omega^R(r_{ij}) \zeta_{ij} dt^{-1/2} \mathbf{e}_{ij} \quad (4)$$

r_{ij} ($=|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j|$) は粒子 i と粒子 j の距離、 \mathbf{e}_{ij} ($=\mathbf{r}_{ij}/|\mathbf{r}_{ij}|$) は粒子 i から粒子 j への単位ベクトル、 \mathbf{v}_{ij} ($=\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j$) は粒子 i と粒子 j の相対速度である。 ζ_{ij} は粒子のランダム運動を引き起こす平均 0、分散 1 のホワイトノイズであり、 $\zeta_{ij} = \zeta_{ji}$ を満たす。 a , γ , σ は各項の強さを表す係数である。

2-2 計算条件

本研究で設定した計算領域を図 1 に示す。同領域は 3 次元直方体であり、本稿では各方向長さ (L_x, L_y, L_z) を (5, 5, 10) とした。初期設定として、DPD 法で一般的に用いられる DPD 粒子の数密度 $\rho = 4$ となるよう、領域内総粒子数 N_{tot} を $N_{tot} = 1000$ と設定した。また、全方向に対し周囲境界条件を与えた。保存力の強さを表す係数 a_{ij} には $a_{ij} = 18.75$ ⁽³⁾ と与えた。DPD 法に対する揺動散逸定理⁽⁶⁾、

つまり $\sigma^2 = 2\gamma k_B T$ および $\omega^D(r_{ij}) = (\omega^R(r_{ij}))^2$, の前者より $(k_B T, \gamma, \sigma) = (1.0, 4.5, 3)$ を得た。また、粒子の初期速度は領域温度の平均が設定温度 ($k_B T = 1.0$) となるよう確率的に与えた。

散逸力の重み関数は一般的に次式で表される。

$$\omega^D(r_{ij}) = \left(1 - \frac{r_{ij}}{r_c}\right)^s \quad (5)$$

ここで s は形状係数であり流体の粘度を決定する。本研究では、静止状態の計算において s 値の大きさを $s = 0.5, 1.0, 2.0$ と変化させ、その計算誤差に対する影響を調査した。対向ポアズイユ流れ計算については一般的な値である $s = 2.0$ を用いた。

対向ポアズイユ流れは、図 1 に示すように z 軸正および負の領域にある DPD 粒子に対し、それぞれ f_{ext} および $-f_{\text{ext}}$ の体積力を x 軸方向に作用させることにより簡単に実現できる。本研究では、 f_{ext} の大きさを $f_{\text{ext}} = 0.05, 0.1, 0.2$ と変化させた場合における、 f_{ext} の計算誤差に対する影響を調査した。

3. 時間進行法

本研究で用いる MV 法および Ruth 法について、以下にその概要を説明する。

3-1 MV 法

MV 法⁶⁾は、分子動力学法でよく用いられる velocity-Verlet 法を修正した手法であり、時間刻み幅を Δt とすると以下の式で表される時間積分アルゴリズム (時間: $n \rightarrow n+1$) である。

$$\begin{aligned} \mathbf{q}_i^{n+1} &= \mathbf{q}_i^n + \Delta t \frac{\mathbf{p}_i^n}{m_i} + \frac{\Delta t^2}{2} \mathbf{F}_i^n, \\ \hat{\mathbf{p}}_i^{n+1} &= \mathbf{p}_i^n + \lambda \Delta t \mathbf{F}_i^n, \\ \mathbf{p}_i^{n+1} &= \mathbf{p}_i^n + \frac{\Delta t}{2} \left[\mathbf{F}_i^n + \hat{\mathbf{F}}_i^{n+1} \right] \end{aligned} \quad (6)$$

ここで $\mathbf{F}_i = \mathbf{F}_i^C + \mathbf{F}_i^D + \mathbf{F}_i^R$ であり、 λ は定数である。本研究では $\lambda = 0.5$ ³⁾ を採用した。

3-2 Ruth 法

分離型レンゲクッタ (PRK) 法は系のシンプレクティック性を保存できる時間進行法のひとつである。本稿では 3 段 3 次 PRK 法のひとつである Ruth 法⁷⁾を用いた。Ruth 法の時間積分アルゴリズム (時間: $n \rightarrow n+1$) は時間刻み幅を Δt とすると以下で表される⁷⁾。

$$\begin{aligned} \mathbf{p}_0 &= \mathbf{p}_i^n, \quad \mathbf{q}_0 = \mathbf{q}_i^n, \\ \mathbf{p}_1 &= \mathbf{p}_0 + b_1 \Delta t \mathbf{F}_i(\mathbf{q}_0, \mathbf{p}_0, t), \\ \mathbf{q}_1 &= \mathbf{q}_0 + \hat{b}_1 \Delta t \mathbf{p}_1, \\ \mathbf{p}_2 &= \mathbf{p}_1 + b_2 \Delta t \mathbf{F}_i(\mathbf{q}_1, \mathbf{p}_1, t + \hat{b}_1 \Delta t), \\ \mathbf{q}_2 &= \mathbf{q}_1 + \hat{b}_2 \Delta t \mathbf{p}_2, \\ \mathbf{p}^{n+1} &= \mathbf{p}_2 + b_3 \Delta t \mathbf{F}_i(\mathbf{q}_2, \mathbf{p}_2, t + (\hat{b}_1 + \hat{b}_2) \Delta t), \\ \mathbf{q}^{n+1} &= \mathbf{q}_2 + \hat{b}_3 \Delta t \mathbf{p}^{n+1}. \end{aligned} \quad (7)$$

ここで、 $(b_1, b_2, b_3, \hat{b}_1, \hat{b}_2, \hat{b}_3) = (7/24, 3/4, -1/24, 2/3, -2/3, 1)$ である。

4. 計算結果および考察

4-1 計算誤差の評価方法

本研究では、DPD 法の計算誤差について一般的に着目される、温度 ($k_B T$) の設定値に対する誤差を算出し、前述のとおり s 値、体積力、および時間刻み幅の誤差に対する影響を評価する。本研究では運動温度 (kinetic temperature) および状態温度 (configurational temperature) ⁹⁾ を次式を用いてそれぞれ算出した。

$$(k_B T)_K = \frac{\sum_i (\mathbf{p}_i^2 / m_i)}{d(N_{\text{tot}} - 1)}, \quad (8)$$

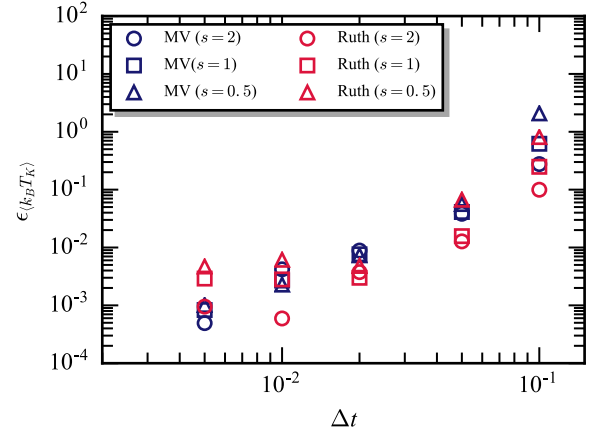


Fig. 2: Kinetic temperature error as a function of Δt for different s values in stationary situations.

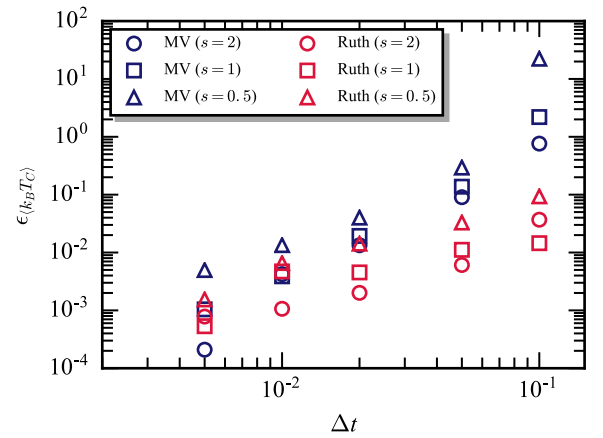


Fig. 3: Configurational temperature error as a function of Δt for different s values in stationary situations.

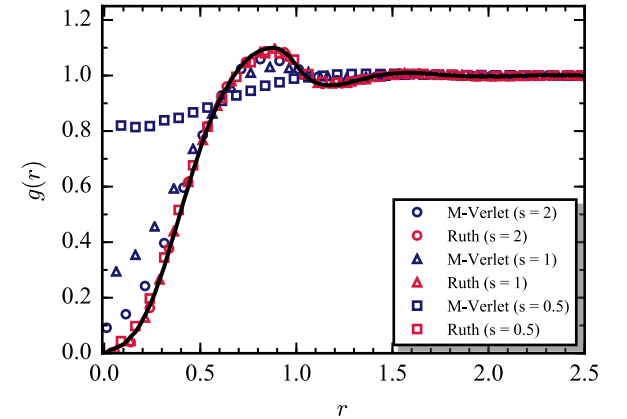


Fig. 4: Radial distribution function for different s values when $\Delta t = 0.1$ in stationary situations.

$$(k_B T)_C = \frac{\sum_i^{N_{\text{tot}}} |\mathbf{F}_i^C|^2}{\sum_i^{N_{\text{tot}}} (-\nabla_i \cdot \mathbf{F}_i^C)}. \quad (9)$$

上式からわかるように、運動温度および状態温度は、それぞれ粒子の運動エネルギーおよびポテンシャルエネルギーのみを用いて算出される値である。それぞれの温度の設定値からの誤差は次式を用いて算出した。

$$\epsilon_{(k_B T)_m} = \frac{|k_B T - \langle k_B T_m \rangle|}{k_B T}. \quad (10)$$

ここで下付き文字 m は K あるいは C をとり、山括弧は平均値を

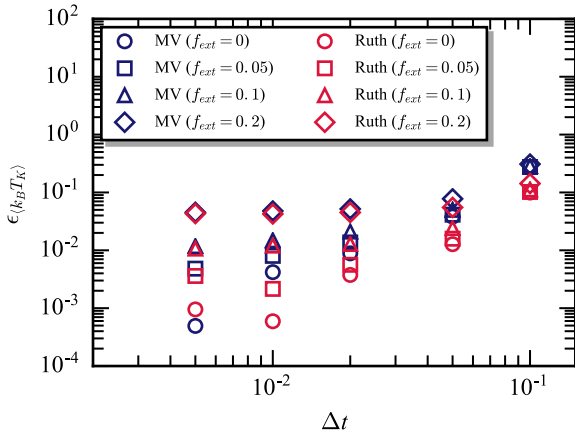


Fig. 5: Kinetic temperature error as a function of Δt for different f_{ext} values in the countering-Poiseuille flow situations.

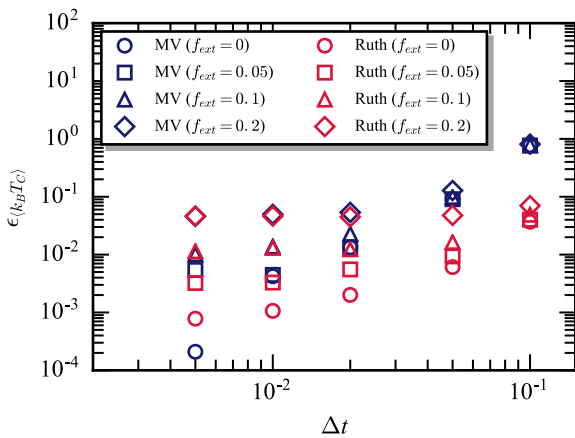


Fig. 6: Configurational temperature error as a function of Δt for different f_{ext} values in the countering-Poiseuille flow situations.

表す。

4-2 静止状態における計算誤差に対する s 値の影響

図 2 に運動温度誤差の Δt による変化を示す。同図からわかるように、 s 値の大きさに関わらず、運動温度誤差は Δt の増加に伴い単調増加する傾向を示す。また、 s 値の増加に伴い誤差も増加し、その増加量は Δt 増加とともに大きくなる傾向も同図から見てとれる。

次に、図 3 に状態温度誤差の Δt による変化を示す。図 2 および図 3 を比較すると、運動温度および状態温度の誤差の変化の傾向は定性的に一致しているといえる。また、状態温度誤差に対する s 値の影響は、運動温度誤差に対するものよりも大きいことがわかった。状態温度は、系の粒子の分布がどれだけ理想に近いかを示す指標である。したがって、 s 値の増加は粒子の運動よりもその分布に大きな影響を与えることが示唆される。

上記の系のポテンシャルエネルギーに与える影響を粒子の分布の観点から考察する。系内の DPD 粒子の分布状態を表す動径分布関数 (radial distribution function, $g(r)$) は以下の式で算出される。

$$g(r) = \frac{\Delta n(r)/\Delta r}{4\pi r^2 \rho}, \quad (13)$$

ここで Δn は距離 r から $r + \Delta r$ に存在する粒子の数である。状態温度誤差に対する s 値の影響が大きい $\Delta t = 0.1$ での動径分布関数を図 4 に示す。参考として MV 法を用いて $\Delta t = 0.005$ としたときの計算結果を実線で示す。同図より、MV 法を用いた計算では s 値の増加とともに動径分布関数の形が参考のものとは大きく乖離す

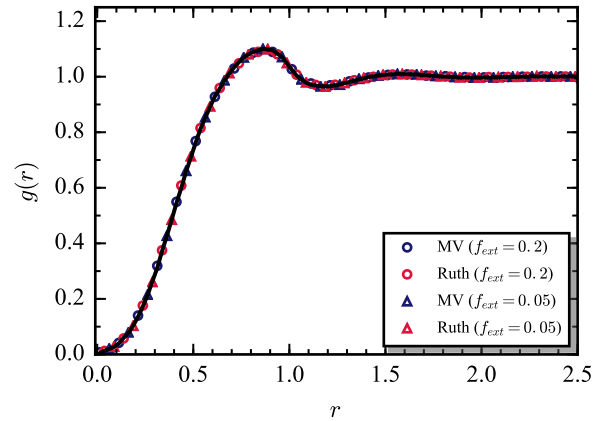


Fig. 7: Radial distribution function for different f_{ext} values when $\Delta t = 0.01$ in the countering-Poiseuille flow situations.

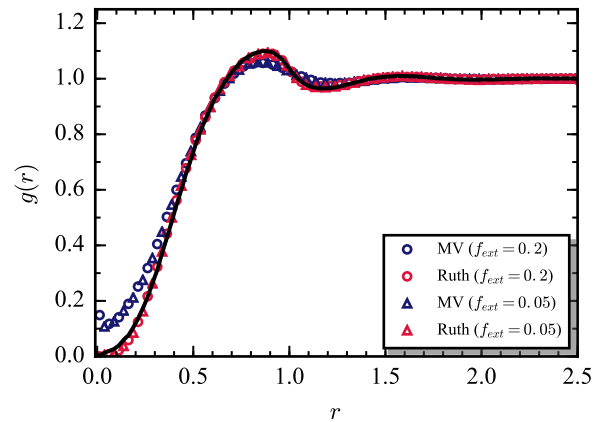


Fig. 8: Radial distribution function for different f_{ext} values when $\Delta t = 0.1$ in the countering-Poiseuille flow situations.

ることが見てとれる。一方、Ruth 法を用いた計算では、動径分布関数に対する s 値の影響があまり見られない。よって、時間進行法の改良により、計算誤差に対する s 値の影響、すなわち粘度の変化による影響は軽減できることがわかった。

4-3 対向ポアズイユ流における計算誤差に対する f_{ext} の影響

次に、図 1 に示す対向ポアズイユ流れにおける計算誤差について評価した。図 5 に $f_{ext} = 0.05, 0.1, 0.2$ と変化させたときの運動温度誤差を示す。ここで、全ての計算について s 値は $s = 2$ とした。同図より、時間進行法によらず、 f_{ext} の増加に伴い運動温度誤差も増加し、その傾向は Δt の小さな場合で顕著に現れることが見てとれる。また、 $\Delta t \leq 0.02$ では、誤差がほぼ一定となることもわかった。この傾向を包括的に考察すると、式 (4) の揺動力の影響は小さくはないものの、誤差がほぼ一定値をとること、また f_{ext} の増加に伴い誤差が増加することから、散逸力による影響が大きいと推察できる。さらに、対向ポアズイユ流れにおいては、時間進行法の改良では時間刻み幅が比較的大きい計算でのみ誤差を軽減できることもわかった。

状態温度についても運動温度と同様の評価を行った。図 6 に状態温度の誤差を示す。同図から見てとれるように、体積力 f_{ext} の影響の傾向は、運動温度のそれと同様である。 $\Delta t \leq 0.02$ で状態温度誤差が時間進行法によらずおおよそ一定となる傾向も、運動温度のそれと一致したが、静止状態においてみられた時間進行法と同誤差に対する大きな影響を考慮すると、 $f_{ext} = 0.2$ においては、計算誤差に対する散逸力の影響が卓越していることが推察できる。

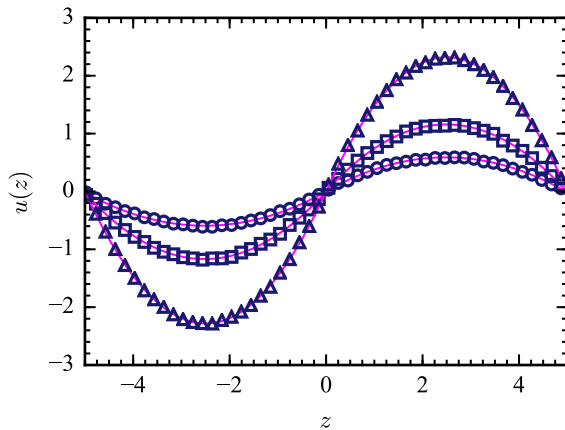


Fig. 9: Velocity profile for different body forces integrated by the MV scheme when $\Delta t = 0.1$ (the least-square-fitted curves are shown with magenta color).

Table 1: Viscosity estimated from the counterimg-Poiseuille simulations for different body forces and time increments.

Integ. Scheme	f_{ext}	Δt				
		0.005	0.01	0.02	0.05	0.1
MV	0.05	1.070	1.061	1.074	1.105	1.303
	0.1	1.068	1.079	1.084	1.125	1.293
	0.2	1.085	1.089	1.096	1.121	1.311
Ruth	0.05	1.074	1.072	1.083	1.098	1.137
	0.1	1.062	1.078	1.070	1.086	1.145
	0.2	1.085	1.091	1.090	1.096	1.144

状態温度は系の粒子の分布がどれだけ理想に近いかを示す指標であることはすでに述べた。そこで、図 6 で示された誤差が動径分布関数にどのように影響するかを考察する。図 7 に $\Delta t = 0.01$ における異なる体積力を作用させた場合の動径分布関数 $g(r)$ を示す。同図より、 $g(r)$ に定性的な差異は見られない。静止状態における $g(r)$ でもみられたように、状態温度誤差が 10% 未満であれば、この誤差は $g(r)$ に定性的にはほとんどあらわれないことが推察される。続いて、図 8 に $\Delta t = 0.1$ における異なる体積力を作用させた場合の $g(r)$ を示す。同図からわかるように、 $f_{ext} = 0.05, 0.2$ の両ケースにおいて MV 法の分布が Ruth 法のそれよりも参考値との差異が大きく、また体積力の違いによる分布の変化はほとんど見られない。したがって、比較的大きな時間刻み幅においては、誤差に対して保存力の影響が卓越しており、散逸力の影響は小さいことがわかった。

4-4 粘度の誤差の評価

最後に、対向ポアズイユ流れにおける計算結果から粘度を算出し、これに対する時間刻み幅 Δt および体積力 f_{ext} の影響について調べた。対向ポアズイユ流れにおける x 軸方向速度 $u(z)$ は z が正の領域で以下の解析解を持つ⁶⁾。

$$u(z) = \frac{\rho f_{ext}}{2\mu} z (L_z/2 - z^2) \quad (11)$$

図 9 に MV 法を用いた $\Delta t = 0.01$ における計算結果、および各計算結果における上式をモデル関数とした最小二乗近似曲線を示す。同図より、計算結果はいずれの体積力においてもポアズイユ流れをよく再現していることが確認できる。次に、本研究で実施したすべての対向ポアズイユ流れ計算において、最小二乗近似曲線から算出した粘度の値を表 1 に示す。同表からわかるように、 $\Delta t > 0.02$ で、特に MV 法を用いた計算結果について粘度が大きな値を

とる傾向がみられる一方で、 $\Delta t \leq 0.02$ においては、時間進行法および体積力に関わらず粘度の値に大きな差異はない。この時間刻み幅の計算では、図 5 および図 6 で、運動温度および状態温度の誤差は体積力の増加に伴い最大 2 桁程度誤差が増加することが確認されたが、その変化に対し、粘度の変化は非常に小さいことがわかった。したがって、動径分布関数と同様に、温度の誤差が 10% 未満程度であれば、粘度の値に影響はほとんどないといえる。

5. 結言

本研究では、DPD 法を用いた対向ポアズイユ流れ数値計算において、時間進行法、時間刻み幅、および体積力の計算誤差に対する影響を評価し、以下の知見を得た。

- ① 静止状態における運動温度および状態温度の誤差は、散逸力の重み関数の形状係数 s に大きな影響を受け、その影響は時間刻み幅が大きいほど大きくなる。また、同誤差は時間進行法の改良により軽減できる。
- ② 対向ポアズイユ流れ計算における運動温度および状態温度の誤差は、DPD 粒子に作用する体積力が大きくなるほど増大する傾向があり、また時間刻み幅が小さいほどその影響は大きい。しかし、動径分布関数への影響は小さい。
- ③ 対向ポアズイユ流れ計算において算出された粘度に対する時間刻み幅および体積力の影響は、それらの運動温度および状態温度に対する影響に比べ非常に小さい。

謝辞

本研究は JSPS 科研費 JP19K14886 の補助を受けている。ここに記して感謝の意を表す。

参考文献：

- (1) Hoogerbrugge, P. J., and Koleman, J. M. V. A., "Simulating Microscopic Hydrodynamic Phenomena with Dissipative Particle Dynamics," *Europhys. Lett.*, 19(3)(1992), pp. 155-160.
- (2) Español, P., and Warren, P. B., "Perspective: Dissipative particle dynamics," *J. Chem. Phys.*, 146(2017), 150901, 16 pages.
- (3) Groot, R. D., and Warren, P. B., "Dissipative Particle Dynamics: Bridging the Gap Between Atomistic and Mesoscopic Simulation," *J. Chem. Phys.*, 107(11)(1997), pp. 4423-4435.
- (4) Yamada, T., Itoh, S., Morinishi, Y., and Tamano, S., "Temperature Error Reduction of DPD Fluid by Using Partitioned Runge-Kutta Time Integration Scheme," *Fluids*, 4(3)(2019), 156, 14 pages.
- (5) Baker, J. A., Lowe, C. A., Hoefsloot, H. C. J., and Iedema, P. D., "Poiseuille Flow to Measure the Viscosity of Particle Model Fluids," *J. Chem. Phys.*, 122(2005), 154503, 6 pages.
- (6) Español, P., and Warren, P. B., "Statistical Mechanics of Dissipative Particle Dynamics," *Europhys. Lett.*, 30(4)(1995), pp.191-196.
- (7) Ruth, R. D., "A canonical integration technique," *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, NS-30(1983), pp. 2669-2671.
- (8) Butler, B., D., Ayton, G., Jepps., O. G., and Evans, D. J., "Configurational Temperature: Verification of Monte Carlo Simulations," *J. Chem. Phys.*, 109(16)(1998), pp. 6519-6512.