

## パーティクルシステムを用いた液体の表現

3D-8

村尾 高秋

日本アイ・ビー・エム株式会社

東京基礎研究所

## 1 はじめに

本研究の目的はよりリアルな液体の動きを表現することである。この目的を達成するためには

- 液体の動きを表現するためのモデルの開発
- そのモデルのレンダリング手法の開発

を行なう必要がある。今回は液体の振舞いを表現するために現在検討しているモデルの基本骨格について提案すると共にそれぞれのモデルの長所、短所また克服すべき問題について述べる。

## 2 液体のモデル化

液体は分子の集合である。そこで液体のモデルを particle system を使ってモデル化することを考える。個々の分子を particle に割り振ってモデル化しようとするのは非現実的である。また、流体解析のように正確な結果が必要なわけではない。そこで無数の分子の集合である液体と相似な振舞いをするのに十分、かつ計算機で現実的に扱える個数の particle で液体のモデルを構築することを考えてゆくことにする。

## 2.1 液体の分子の振舞い

気体、固体の分子の振舞いをまとめるとつぎのように言うことができる。

[気体分子] 並進運動に主に支配される。分子の相互作用は他の場合よりも少ない。

[固体分子(原子)] 分子(原子)の相互作用に主に支配される。並進運動はあまり見られない。

液体分子はこの両者の特徴を兼ね備えた動きをする。即ち、分子の相互作用が強く作用することは液体が体積を持つことから明らかである。その反面、自在にその形状を変化させることから気体のように分子の自由度が大きいはずである。問題はこう言った曖昧な状態をいかにしてモデル化するかである。今回は、

- 気体、固体のように比較的モデル化し易い状態の特例として液体分子を扱う

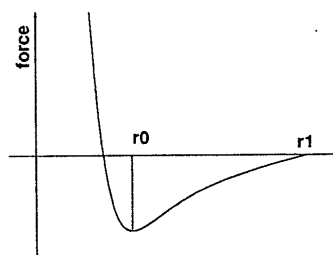


図1: van der Waals 力のモデル

- 液体分子を直接モデル化する

といったアプローチから、3種類の液体モデルを提案する。以下にそれぞれについて述べてゆく。

## 2.2 気体分子モデルを用いた液体モデル

前に述べたように液体分子の運動は体積を持つと言う点を除けば気体分子の運動と共通した動きをされると考えられる。そこで液体分子を特殊な気体分子として扱うことによりモデル化することができる。気体分子間に主に作用するのは van der Waals 力である。しかし、前に述べたように気体分子の運動は並進運動が主体である。よって particle を用いたモデルとして次のようなものが考えられる。

- Particle に van der Waals 力を持たせる。
- Particle を剛体の小球として扱う。

液体分子は気体分子より分子同士の相互作用の確率が多くなるため前者のモデルで扱う必要が出てくる。これは particle に図1のような van der Waals 力をモデル化したものを持たせることによって実現できる。このとき一定の体積を持たせるために  $r_0$  と  $r_1$  の間隔を  $r_0$  に対して小さくするようにとる。

## 2.3 固体分子モデルを用いた液体モデル

一般的に結晶が融解するとその体積は5~15%増加する。即ちその分だけ分子間のすき間が増えて分子の自由度が増えると思えることが出来る。このことから液体分子を特殊な固体分子としてモデル化することが出来る。ここでは固体のモデルとして体心立方格子を4面体分割したモデルを使う。このモデルでは1個の質

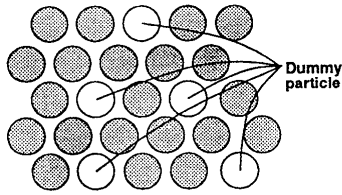


図 2: 固体分子モデルによる液体モデル

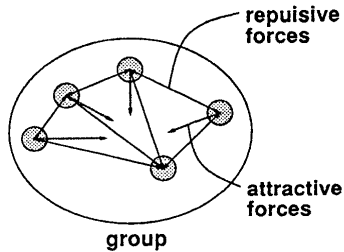


図 3: 液体分子モデル

点に 8 個の質点が隣接している。固体の密度に対して液体の密度は 87 ~ 95% だから液体の場合、1 個の質点に 6 ~ 7 個の質点が隣接していることになる。よってモデルの質点を適当な確率でダミーにすることによって液体のモデルとすることができる (図 2 参照)。特定の 4 面体でダミー質点と質点の位相が逆転した場合その物理量を入れ替えてやることによってモデルの位相を保つことができる。

## 2.4 液体分子モデル

前に述べた 2 通りのモデルは共に液体分子を比較的モデル化し易い他のモデルに置き換えることによって扱おうとしたものである。このモデルはそれらに対して液体分子を直接モデル化したものである。隣接する液体分子間では引力よりも斥力が支配的に働く。このことから隣接する particle 間で斥力を求め、一定距離で隣接する particle の集合の重心に向かって引力を働かせることによって液体分子のモデルを構築する (図 3 参照)。

## 3 各モデルの特徴

### 3.1 気体分子モデルを用いた液体モデル

計算量 particle 数が  $n$  のとき  $n^2$  のオーダーで増加する。この場合、particle は全くリンクを持たないため、particle の集合が particle 単位に分裂するような場合でも問題なく扱うことができる。よって、水しぶきのように細かく分裂する液体を表現するのに向いている。

### 3.2 固体分子モデルを用いた液体モデル

固体分子モデルを用いた液体モデルはリンク構造が変化しないため particle の集合が複数個に分裂する場合を扱うことができない。このような場合を扱おうとするときは、リンクの再構築を行なう等の特殊な処理を必要とする。

計算量の増加は  $n$  のオーダーである

このモデルは動きが激しくない場合、たとえば容器の中で揺れる液体の表現に向いている。

### 3.3 液体分子モデル

液体分子モデルでは particle をグループ分けしなければならない。そのため計算量の増加は最悪で  $n \log n$  最良で  $n$  のオーダーとなる。またこの場合、particle の集合が分裂しても問題はない。

このモデルは 3.1 よりも多くの particle を扱い、しかも液体が分裂するような場合に向いている。

## 4 今後の課題

### 各液体モデルの使い分け

前にあげた液体モデルのいずれかのみで液体を表現しようとするのは非現実的である。現在、3 種類のモデルを組み合わせて使うことを検討している。

### particle 数の問題

どのようなモデルを採用するにせよ計算機で現実的に扱える particle の数とリアルな効果を得るために必要な particle の数にはまだ開きがある。そこで particle 数を稼ぐために何らかの工夫が必要となってくる。

現在、particle 数を増やすために液体モデルの particle とは別に特定の規則で運動する particle を発生させることを考えている。ここで「特定のパターンをある程度ランダムに振った確率で再帰的に繰り返すことによってリアルな形状を得る。」というフラクタルの手法を運動にも適用できるのではないかと考えている。

## 参考文献

- [1] D.Tabor : Gases, liquids and solids and other states of matter , Cambridge University Press , 1991.
- [2] R.W.Hockney J.W.Eastwood : Computer Simulation Using Particles , Adam Hilger , 1989.
- [3] Karl Sims : Particle Animation and Rendering Using Data Parallel Computation , Computer Graphics , Vol.24 , No.4 , 1990 , pp405-413.