

# MPS法における勾配計算の高精度化とその応用

## A Precise Calculation Method of the Gradient Operator in Numerical Computation with the MPS

入部綱清<sup>1</sup>・仲座栄三<sup>2</sup>

Tsunakiyo IRIBE and Eizo NAKAZA

A highly precise numerical calculation method of the gradient as a differential operator in a computational method with the MPS has been proposed in this study. The method is not dependent on the particle arrangement. Gradient calculations of a linear and nonlinear function have been introduced in the proposed method to verify the numerical accuracy. The results show high accuracy on the boundary in regular grid arrangement case but on both the boundary and inside in random arrangement case. High accuracy and computational stability are also obtained when applied to the calculations of the hydrostatic pressure and free surface of water.

### 1. はじめに

海岸工学及び河川工学の分野では、流体表面の大変形、分離、合体を伴う流れを扱うため、数値解析手法として粒子法が用いられることがある。粒子法は、格子や要素が不要なため、複雑な流体挙動の解析においても発散することが少ないという特性を持つ。

粒子法の一つであるMPS (Moving Particle Semi-implicit) 法はKoshizuka・Oka (1996) によって開発された手法である。近年、土木工学、機械工学、原子力工学分野のように広く適用されつつあるが、解の精度についての研究は他の手法に比べ遅れているのが現状である。

MPS法の非圧縮流れ解析では、微分演算子として勾配とラプラシアンが用いられる。その勾配計算の導出過程においては、勾配を計算する任意粒子の周りに近傍粒子がどの方向にも均等に存在すると仮定している。

本研究では、勾配計算の高精度化としてこのような仮定を用いない勾配計算を提案し、従来の勾配計算との精度比較を行う。また、その応用として従来、圧力ポアソン方程式のソース項に用いていた密度の時間変化に関する項を、提案する勾配計算を用いた速度の発散に置き換える。

MPS法の非圧縮流れ解析においては圧力が激しく振動するという問題があり、振動抑制に関する研究がいくつか報告されている (Khayyer・後藤, 2008; 近藤・越塚, 2008; 末吉・内藤, 2004; 田中・益永, 2008; 日比・藪下, 2004)。しかし、これらの中に微分演算子の精度について改良が行われた研究はない。

本研究では数値解析例として、提案する勾配計算を用いて静水状態の流体解析を行い、静水圧分布及び水面高さを求める。解析結果と理論値を比較しその有用性を示す。

### 2. MPS法

#### (1) 離散化

MPS法 (越塚, 2005) は非圧縮性流れを解く有力な数値解析法の一つであり、メッシュやセルを必要としないため、自由境界の大変形を比較的容易に表現することが可能である。

非圧縮性流れの支配方程式は連続の式とNavier-Stokes式である。連続の式とNavier-Stokes式には微分演算子として勾配とラプラシアンが含まれるが、MPS法では粒子*i*の物理量φの勾配とラプラシアンはそれぞれ次式で表される。

$$\langle \nabla \phi \rangle_i = \frac{d}{n^0} \sum_{j \neq i} \left[ \frac{\phi_j - \phi_i}{|\vec{r}_j - \vec{r}_i|^2} (\vec{r}_j - \vec{r}_i) w(|\vec{r}_j - \vec{r}_i|) \right] \dots\dots\dots (1)$$

$$\langle \nabla^2 \phi \rangle_i = \frac{2d}{\lambda n^0} \sum_{j \neq i} \left[ (\phi_j - \phi_i) w(|\vec{r}_j - \vec{r}_i|) \right] \dots\dots\dots (2)$$

ここで、*j*は近傍粒子を示し、 $\vec{r}$ は位置ベクトル、*d*は次元数、*w*は重み関数、 $n^0$ は初期配置で求めた粒子数密度、 $\lambda$ は解析定数である。図-1に粒子*i*, *j*間の勾配モデルを示す。

重み関数*w*は粒子間距離*r*を用いて次式で表される。

$$w(r) = \begin{cases} \frac{r_c - r}{r} - 1 & r \leq r_c \\ 0 & r_c < r \end{cases} \dots\dots\dots (3)$$

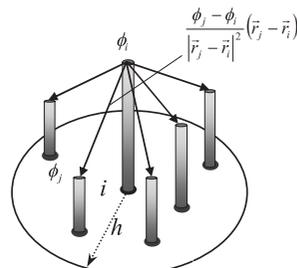


図-1 粒子*i*の勾配モデル (*h*: 影響半径)

1 正会員 修(工) 琉球大学特命助教島嶼防災研究センター  
2 正会員 工博 琉球大学教授工学部環境建設工学科

$r_e$ は粒子間相互作用の及ぶ範囲の半径である。また、粒子数密度 $n_i$ は重み関数 $w$ を用いて次式で定義される。

$$\langle n \rangle_i = \sum_{j \neq i} w(|\vec{r}_j - \vec{r}_i|) \dots\dots\dots (4)$$

式(4)は粒子 $i$ と、その近傍粒子 $j$ との重み関数の和を表している。

## (2) 計算アルゴリズム

MPS法では非圧縮性流れに半陰解法アルゴリズムを適用している。そのため、陽解法と陰解法を用いて計算を行う。

まずNavier-Stokes式である式(5)から圧力項を除いた式(6)の計算を陽解法で行う。

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \mu \nabla^2 \vec{u} + \vec{F} \dots\dots\dots (5)$$

$$\vec{u}_i^* = \nu \nabla^2 \vec{u}_i^* dt + \vec{F} dt \dots\dots\dots (6)$$

ここで $\vec{u}$ は流速ベクトル、 $\mu$ は動粘性係数、 $\nabla$ は勾配、 $\nabla^2$ はラプラシアン、 $\vec{F}$ は外力ベクトル、 $\rho$ は流体の密度、 $p$ は圧力、 $t$ は時間、 $dt$ は時間増分である。式(6)より仮の速度 $\vec{u}_i^*$ を求めて式(7)より仮の位置 $\vec{r}_i^*$ を求める。

$$\vec{r}_i^* = \vec{r}_i^n + \vec{u}_i^* dt \dots\dots\dots (7)$$

仮の位置 $\vec{r}_i^*$ で粒子数密度 $n^*$ を求めると密度一定条件を満たしていないため、初期粒子数密度 $n^0$ とは一致していない。そこで、仮の位置で求められた粒子数密度 $n^*$ と初期粒子数密度 $n^0$ の差より圧力を解く。圧力 $p$ は陰解法を用いて計算する。

$$\nabla^2 p_i^{n+1} = -\frac{\rho}{dt^2} \frac{n_i^* - n^0}{n^0} \dots\dots\dots (8)$$

式(8)より圧力を求め、式(9)に代入し修正速度 $\vec{u}_i'$ を求める。

$$\vec{u}_i' = -\frac{1}{\rho} \nabla p_i^{n+1} dt \dots\dots\dots (9)$$

式(9)より求めた修正速度を仮の速度に加えて次ステップの速度を求める。最後に修正速度 $\vec{u}_i'$ より修正される変位 $\vec{u}_i' dt$ を仮の位置 $\vec{r}_i^*$ に加え、式(10)より次のタイムステップの位置 $\vec{r}_i^{n+1}$ を求めて1タイムステップが終了する。

$$\vec{r}_i^{n+1} = \vec{r}_i^* + \vec{u}_i' dt \dots\dots\dots (10)$$

## 3. MPS法の勾配計算

MPS法での勾配ベクトルは、評価点の粒子 $i$ と、その近傍の任意粒子 $j$ との粒子間の勾配を考え、粒子 $i$ の影響半径内で重み付け平均することで得られる。粒子 $i, j$ が、それぞれ位置ベクトル $\vec{r}_i, \vec{r}_j$ と物理量 $\phi_i, \phi_j$ を保持していると、粒子 $j$ の物理量 $\phi_j$ を粒子 $i$ 周りでTaylor展開すると次式のようになる。

$$\phi_j = \phi_i + \nabla \phi_{ij} \cdot (\vec{r}_j - \vec{r}_i) \dots\dots\dots (11)$$

$$\nabla \phi_{ij} \cdot (\vec{r}_j - \vec{r}_i) = \phi_j - \phi_i \dots\dots\dots (12)$$

ただし、式(11)では二次以上の高次の項は無視している。式(12)の両辺を粒子 $i, j$ の相対位置ベクトルの絶対値で除して次式が得られる。

$$\nabla \phi_{ij} \cdot \frac{(\vec{r}_j - \vec{r}_i)}{|\vec{r}_j - \vec{r}_i|} = \frac{\phi_j - \phi_i}{|\vec{r}_j - \vec{r}_i|} \dots\dots\dots (13)$$

次に、式(13)の両辺に粒子 $i, j$ の相対位置ベクトル方向の単位ベクトルを掛けると次式のようになる。

$$\left( \nabla \phi_{ij} \cdot \frac{(\vec{r}_j - \vec{r}_i)}{|\vec{r}_j - \vec{r}_i|} \right) \frac{(\vec{r}_j - \vec{r}_i)}{|\vec{r}_j - \vec{r}_i|} = \frac{\phi_j - \phi_i}{|\vec{r}_j - \vec{r}_i|} \frac{(\vec{r}_j - \vec{r}_i)}{|\vec{r}_j - \vec{r}_i|} \dots\dots (14)$$

式(14)の左辺を整理し次式が得られる。

$$\left[ \frac{(\vec{r}_j - \vec{r}_i)}{|\vec{r}_j - \vec{r}_i|} \otimes \frac{(\vec{r}_j - \vec{r}_i)}{|\vec{r}_j - \vec{r}_i|} \right] \nabla \phi_{ij} = \frac{\phi_j - \phi_i}{|\vec{r}_j - \vec{r}_i|} \frac{(\vec{r}_j - \vec{r}_i)}{|\vec{r}_j - \vec{r}_i|} \dots\dots (15)$$

ここで、 $\otimes$ はテンソル積を表す。式(15)の両辺を粒子 $i$ の影響半径内の近傍粒子 $j$ で重み付け平均すると次式が得られる。

$$\left[ \frac{1}{n^0} \sum_{j \neq i} w(|\vec{r}_j - \vec{r}_i|) \frac{(\vec{r}_j - \vec{r}_i)}{|\vec{r}_j - \vec{r}_i|} \otimes \frac{(\vec{r}_j - \vec{r}_i)}{|\vec{r}_j - \vec{r}_i|} \right] \nabla \phi_{ij} = \frac{1}{n^0} \sum_{j \neq i} w(|\vec{r}_j - \vec{r}_i|) \frac{\phi_j - \phi_i}{|\vec{r}_j - \vec{r}_i|} \frac{(\vec{r}_j - \vec{r}_i)}{|\vec{r}_j - \vec{r}_i|} \dots\dots (16)$$

式(16)の左辺は、行列とベクトルの積である。その行列の逆行列を両辺の左より掛けると次式が得られる。

$$\nabla \phi_{ij} = \left[ \frac{1}{n^0} \sum_{j \neq i} w(|\vec{r}_j - \vec{r}_i|) \frac{(\vec{r}_j - \vec{r}_i)}{|\vec{r}_j - \vec{r}_i|} \otimes \frac{(\vec{r}_j - \vec{r}_i)}{|\vec{r}_j - \vec{r}_i|} \right]^{-1} \left( \frac{1}{n^0} \sum_{j \neq i} w(|\vec{r}_j - \vec{r}_i|) \frac{\phi_j - \phi_i}{|\vec{r}_j - \vec{r}_i|} \frac{(\vec{r}_j - \vec{r}_i)}{|\vec{r}_j - \vec{r}_i|} \right) \dots\dots (17)$$

式(17)の右辺に含まれる逆行列は、影響半径内の粒子配置が正方格子状の場合に限り、次式に近似できる。

$$\left[ \frac{1}{n^0} \sum_{j \neq i} w(|\vec{r}_j - \vec{r}_i|) \frac{(\vec{r}_j - \vec{r}_i)}{|\vec{r}_j - \vec{r}_i|} \otimes \frac{(\vec{r}_j - \vec{r}_i)}{|\vec{r}_j - \vec{r}_i|} \right] \approx \frac{1}{d} I \dots\dots\dots (18)$$

ここで、 $d$ は次元数、 $I$ は単位行列である。式(17)に式(18)を代入すると、従来のMPS法の勾配計算である式(1)が得られる。通常、MPS法の非圧縮性流れの計算アルゴリズムでは、影響半径内の粒子配置がランダムであっても式(1)を用いて計算が行われている。この場合、もともと粒子配置は格子状で周囲が均等に粒子で満たされることを仮定しているため、勾配計算の精度低下が懸念される。そこで本研究では、そのような仮定を導入せず、式(17)を用いて勾配計算を行う方法を提案し、そのことで勾配計算の精度が飛躍的に向上することを示す。式(17)に含まれる逆行列は、二次元計算で二行二列、三次元計算で三行三列であるため、1タイムステップの計算時間と比べ、無視できる程度の計算時間であることも本手法の実用的有用性の一つといえる。

## 4. 数値計算例

(1) 線形関数及び非線形関数に対する勾配精度の検証  
勾配精度の比較として、次式に示す線形関数及び非線

形関数に対するy方向の勾配計算を行う。

線形関数：

$$P = \rho g y \dots\dots\dots (19)$$

非線形関数：

$$v = \cos\sqrt{x^2 + y^2} \dots\dots\dots (20)$$

式 (19) の  $\rho$  及び  $g$  はそれぞれ密度と重力であり定数とし、重力の作用する鉛直方向を  $y$  とした。

粒子の配置については図-2に示すように規則配置と不規則配置の二種類について検証する。規則配置については縦61粒子、横61粒子で総粒子数3721、粒子間距離は0.33とした。また、不規則配置については規則配置の粒子に乱数を与えて不規則性を考慮した。

図-3に式 (19) の線形関数に対するの勾配精度の検証結果を示す。式 (19) の  $\rho$  を  $1000\text{kg/m}^3$ 、 $g$  を  $9.8\text{m/s}^2$  とし、 $y$  方向の勾配計算の理論値を  $9800\text{kg/m}^2\text{s}^2$  とした。

図-3 (a) より、従来手法は規則配置の場合、計算領域の境界での微分値は理論値と大きく異なることが確認で

きる。この原因として、境界上の粒子については、近傍粒子が格子配置であるものの、計算領域外方向には近傍粒子が存在しないためであると判断される。計算領域の境界での微分は、流体計算において水表面近傍の圧力勾配に対応する。また、不規則配置の場合、すべての粒子で微分値は理論値と大きく異なることが確認できた。この原因は、すべての粒子が格子状に配置されていないことによる。図-3 (b) において、提案手法は規則配置及び不規則配置の場合においても、計算領域内のすべての粒子で微分値は理論値に非常に近い値を示している。この理由が、粒子の配置に対する仮定を導入しなかったことであることは明らかであり、提案手法が任意粒子配置の勾配計算を行うのに有用な手法であることを示している。MPS法の非圧縮流れの計算においては、初期粒子配置で格子状に粒子を配置したとしても、数タイムステップ後には粒子は不規則な配置になる。そのため、従来手法では数タイムステップ以降の勾配計算の精度には注意が必要である。一方、提案手法は粒子が不規則配置の場合でも線形関数の勾配の精度が確保されているため、数タイムステップ以降も勾配計算の精度を確保した計算が可能である。

図-4に式 (20) の非線形関数に対するの勾配精度の検証結果を示す。図-4 (a) より、線形関数の場合と同様、従来手法では規則配置で計算領域の境界での微分値が大きく異なっている。計算領域の内部については格子状に粒子が並んでいるため、微分値は理論値に近い値を示している。不規則配置については、すべての粒子で微分値は理論値と大きく異なる値となった。図-4 (b) に示すように、提案手法では非線形関数に対しても、規則配置及び不規則配置ともに微分値は理論値に近い値を示している。本節では、線形関数及び非線形関数に対する勾配精度の検証を行った。従来手法では、粒子が境界にある場合や粒子配置が不規則な場合は、微分対象の関数が線形関数及び非線形関数に関わらず、微分値は理論値と大きく異なる値を取ることが示された。一方、提案手法ではいずれの場合においても、微分値は理論値に近い値を得ることが示された。

(2) MPS法の非圧縮流れ解析アルゴリズムへの応用

提案手法の応用としてMPS法の非圧縮流れ解析アルゴリズムへの適用を行う。具体的には圧力ポアソン方程式のソース項に適用する。本節では計算結果の比較を行うために、ソース項を密度の時間変化 (式 (21)) とする従来のMPS法の非圧縮流れアルゴリズムの場合 (ケース1)、速度の発散 (式 (22)) とし勾配計算に従来の手法を用いた場合 (ケース2)、速度の発散とし勾配計算に提案手法を用いた場合 (ケース3) の3ケースについて、図-5に示すような容器に水を配置した三次元解析モデル

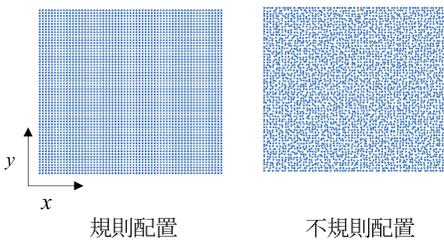
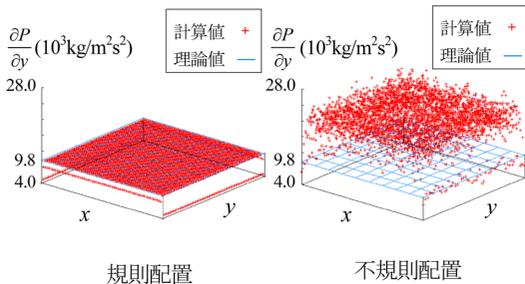
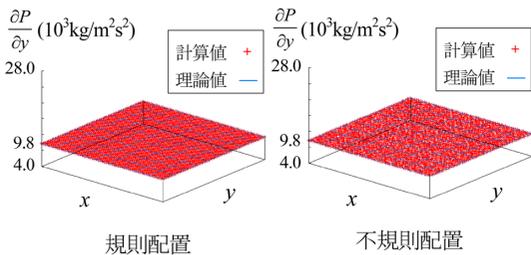


図-2 精度検証に使用した粒子の配置



(a) 従来手法の結果



(b) 提案手法の結果

図-3 線形関数に対する勾配計算の精度比較

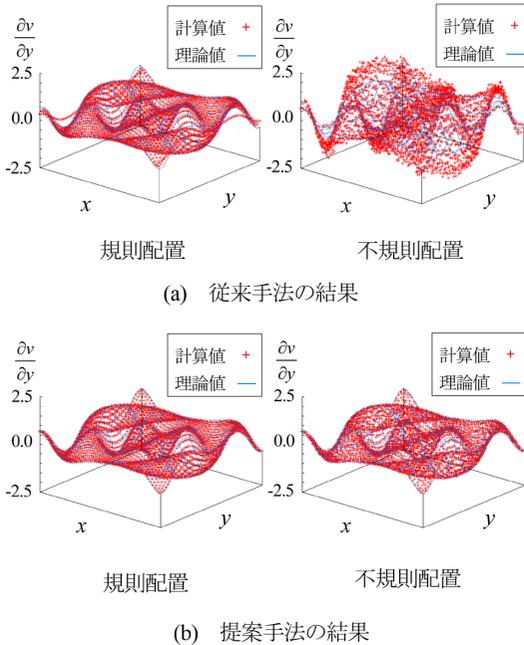


図-4 非線形式に対する勾配計算の精度比較

を用いて底面の圧力の履歴及び水面高さの履歴について検討を行った。

$$\nabla^2 p = \frac{\rho}{\Delta t^2} \frac{n^0 - n_i}{n^0} \dots\dots\dots (21)$$

$$\nabla^2 p = \frac{\rho}{\Delta t} \left( \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) \dots\dots\dots (22)$$

**a) 底面の圧力の履歴**

底面の圧力の履歴の検討として、図-6 (a) にケース1、図-6 (b) にケース2、図-6 (c) にケース3の結果を示す。圧力の測定は、容器底面中央の壁粒子で行った。

図-6 (a) に示すように、ケース1は解析開始直後、圧力に大きな振動が発生した。この振動は、その後5秒間かけて収束した。最終的に圧力値は理論値の約65%程度の値となった。図-6 (b) が示すように、ケース2については解析開始後しばらく安定しているものの、計算開始後5秒以降は理論値を中心に大きなばらつきを示した。この原因として、解析開始時に格子状に配置されていた粒子が時間の経過に伴い次第に不規則な配置になり、速度の発散に用いる勾配の計算精度が悪くなったことが挙げられる。図-6 (c) に示すように、提案手法を用いた計算では解析開始から終了まで安定した圧力値を示した。このとき、圧力値は比較的理論値に近い値を示している。

これらの比較により本手法は、粒子配置が不規則な配置になった場合であっても速度の発散に用いる勾配の計算精度が良く、さらに計算の安定性に大きく寄与していることが確かめられる。

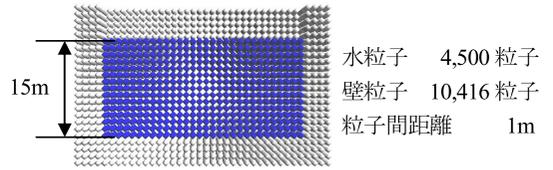
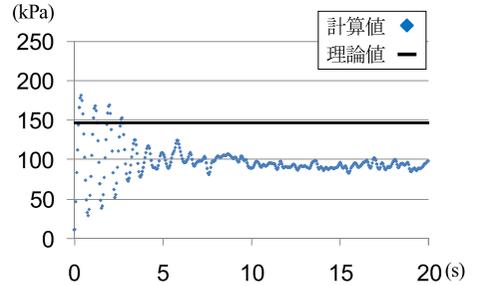
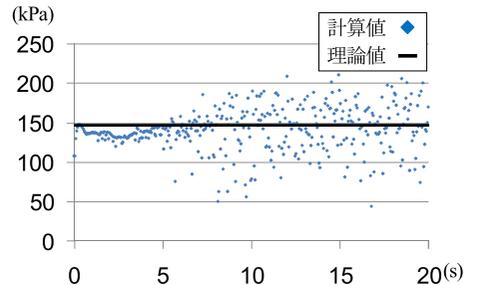


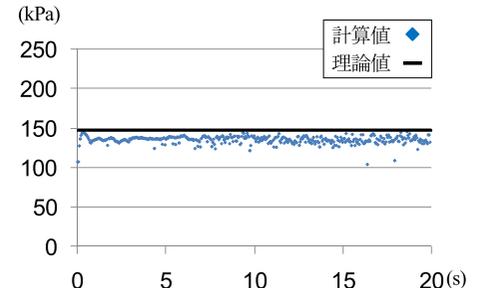
図-5 三次元解析モデル



(a) ケース1の結果



(b) ケース2の結果



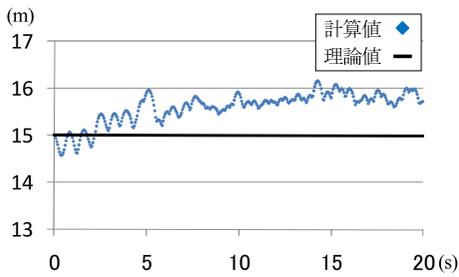
(c) ケース3の結果

図-6 底面の圧力の履歴

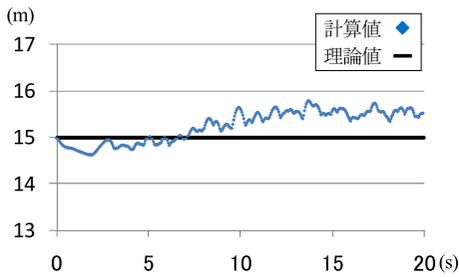
**b) 水面高さの履歴**

水面高さの履歴の検証として、図-7 (a) にケース1、図-7 (b) にケース2、図-7 (c) にケース3の結果を示す。水面の高さは、タイムステップ間の全水粒子中で最も高い位置に存在する粒子の座標値とした。

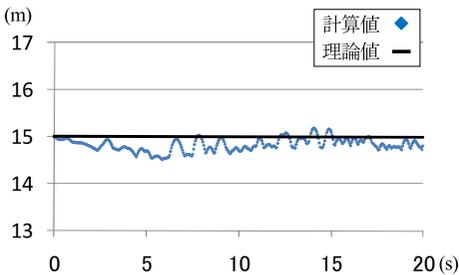
図-7 (a) に示すように、ケース1は、解析開始後から約5秒間、理論値である15m付近を上下している。これは図-6 (a) で示した5秒までの圧力の振動と対応しているようにみえる。圧力値が収束したのとほぼ同時に水面の高さも収束し、最終的には約16mで安定している。図-7 (b)



(a) ケース 1 の結果



(b) ケース 2 の結果



(c) ケース 3 の結果

図-7 水面高さの履歴

に示すように、ケース2は解析開始後から約7秒間は理論値に近い値を示している。その後、圧力の振動と対応するかのように7秒以降は次第に水面の高さが高くなり最

終的には約15.5mで安定した。図-7(c)に示すように、提案手法を用いた計算では解析開始から終了まで安定かつ精度良い水面の高さを示している。水面の高さは他のケースに比べ理論値に最も近い値を示した。

## 5. おわりに

本研究では、MPS法の勾配計算の高精度化を提案し、精度検証を行った。従来の勾配計算で精度良く計算できなかった境界上の粒子の微分や、不規則配置での微分について、高精度化された勾配計算は、線形及び非線形関数のいずれの微分値に対しても理論値に近い値を示した。その応用として、MPS法の非圧縮性流れアルゴリズムの圧力ポアソン方程式のソース項を速度の発散とした上で、その勾配計算に提案手法を適用した。提案手法による底面の圧力の履歴は、従来の方法と比較し、精度及び安定性において優れた性能を示した。水面の高さの履歴についても、提案手法は安定的でかつ理論値に近い値を示した。本手法を用いることで、MPS法の精度及び安定性が大きく改善されることが期待できる。

## 参考文献

- Khayyer Abbas・後藤仁志 (2008)：粒子法における圧力擾乱低減のためのCMPS-HS法の提案, 海岸工学論文集, 第55巻, pp. 16-20.
- 越塚誠一 (2005)：粒子法, 丸善株式会社, 144p.
- 近藤雅裕・越塚誠一 (2008)：MPS法における不自然な数値振動の抑制, Transactions of JSCES, 20080015.
- 末吉 誠・内藤 林 (2004)：粒子法による数値計算において圧力振動を軽減する補助計算手法について, 関西造船協会講演概要集, 22, pp. 57-60.
- 田中正幸・益永孝幸 (2008)：疑似圧縮性効果によるMPS法の安定化と圧力の平滑化, Transactions of JSCES, 20080025.
- 日比茂幸・藪下和樹 (2004)：MPS法の不自然な圧力振動の抑制に関する研究, 関西造船協会論文集, No.241, pp. 125-131.
- Koshizuka, S. and Oka, Y. (1996): Moving Particle Semiimplicit Method for Fragmentation of Incompressible Fluid, Nucl. Sci Eng. 123, pp. 421-434.