

42. メッシュフリー法における最小二乗法による 内挿を用いた移流項の処理手法に関する研究

成 岱蔚^{1*}・山田 正²

¹中央大学理工学部研究科都市環境学専攻（〒112-8551東京都文京区春日1-13-27）

²中央大学理工学部都市環境学科（〒112-8551東京都文京区春日1-13-27）

* E-mail: chengdaiwei@chuo-u.ac.jp

メッシュフリー手法は格子法と比べて、格子を設定する必要がないため、大型かつ複雑解析領域、あるいは混相流や境界の大変形を伴う流体運動によく応用されている。メッシュフリー手法における空間的な離散化手法は積分形式と内挿形式二つ種類がある。二つの種類の離散化モデルを比較すると、内挿形式は計算コストが積分形式より重い精度が内挿形式より低いいため、得られた結果は不自然な数値振動が見られる。一方で内挿形式はラグランジュ的な支配方程式に適用するのは難しい。

以上を踏まえて、本研究は内挿形式の区間離散化手法でラグランジュ的な支配方程式に適用し、それによる移流項の処理手法を提案した。

Key Words : Meshfree Method, Smoothed Particle Hydrodynamics, Moving Particle Semi-implicit

1. はじめに

数値シミュレーションとして有限要素法や有限差分法が色々な分野で広く利用されている。これらの手法の共通点は、解析領域内に格子を設定し、計算を行うことであり、格子法と呼ばれている。格子法を用いた計算の安定性や精度は格子の設定方法によって、大きく異なるため、格子の設定手法に関する研究が多くされている。しかし、大型かつ複雑解析領域、あるいは混相流や境界の大変形を伴う流体運動などの解析対象に格子法を適用するのは困難である。

このような背景のなか、格子を必要としないメッシュフリー(Meshfree)計算手法の研究が盛んに行われてきている。メッシュフリー法は格子を設定しないため、連続関数を表すには、ある領域内の複数の計算点の情報を用いて、その領域内の連続関数を構築する必要がある。構築手法は、大きく分けると積分形式と内挿形式二種類がある¹⁾。

二つの種類の離散化モデルを比較すると、内挿形式のモデルは内挿をするため、線形方程式を解く必要があり、計算コストが積分形式のモデルより重い。それに対し、積分形式のモデルは元の方程式に収束する(適合性)に

は厳しい制限条件を満たさなければならないので、精度が内挿形式のモデルより低い。

一方、メッシュフリー手法は計算中で連続関数を構築するため、計算点の移動に対して、格子法より安定的に計算できる。

流体の支配方程式であるN-S方程式はオイラーとラグランジュ二つの形式があり、後者は前者と比べると、移流項を計算する必要がない利点がある。他に、ラグランジュ的な計算手法は計算点が流体の運動とともに移動しているため、メッシュフリー手法に適合する。

ラグランジュのメッシュフリー手法として、SPH(Smoothed Particle Hydrodynamics)、MPS(Moving Particle Semi-implicit)は幅広く応用されている。SPH、MPSは積分形式の離散化モデルを用いるため、得られた圧力値は、不自然な振動をすることが知られている²⁾。一方、直接的に内挿形式のモデルを用いてラグランジュ形式の支配方程式を離散化すれば、計算点の動きが激しい場合で、計算が発散することが知られている。

以上を踏まえて、本研究では、計算点を固定し、内挿形式のモデルを用いた移流項を処理する手法の開発を目標とする。

2. 積分形式と内挿形式の離散化モデル

積分形式の空間離散化モデルは、ある場所の連続関数 ϕ を表す時に、その場所の周辺の ϕ の重み付き平均値を使う。一方、メッシュフリー手法には積分形式に対して、内挿形式の空間離散化モデルがある。それは、ある場所の物理量 ϕ を表す時に、ある内挿関数を設定し、その場所の周辺内の ϕ に関する情報を用いて内挿する。

(1) 積分形式の離散化モデル

積分形式のモデルの基本概念は式(2.1)に基づいている。式(2.1)を離散化すると、式(2.2)になる。

$$\phi(\vec{r}) = \int_{\Omega} \phi(\vec{r}') \delta(\vec{r}' - \vec{r}) d\vec{r}' \quad (2.1)$$

$$\phi(\vec{r}_i) = \frac{1}{n_0} \sum_{j \neq i} \phi(\vec{r}_j) w(|\vec{r}_j - \vec{r}_i|) \quad (2.2)$$

ϕ はスカラー関数、 $\vec{r}$ は座標ベクトル、下付き j は $\vec{r}_j$ 座標の近傍にある粒子の番号、 $w(|\vec{r}|)$ は重み関数である。近傍粒子を検索する範囲と平均粒子間距離が無限に小さくなると、式(2.2)は式(2.1)に収束する。

式(2.2)に従って、スカラー関数 ϕ と微分方程式の項を入れ替えると、式(2.3)、(2.4)の勾配モデル及びラプラシアンモデルが得られる。

$$\langle \nabla \phi \rangle_i = \frac{d}{n_0} \sum_{j \neq i} \frac{\phi_j - \phi_i}{|\vec{r}_j - \vec{r}_i|^2} (\vec{r}_j - \vec{r}_i) w(|\vec{r}_j - \vec{r}_i|) \quad (2.3)$$

$$\langle \nabla^2 \phi \rangle_i = \frac{2d}{\lambda n_0} \sum_{j \neq i} (\phi_j - \phi_i) w(|\vec{r}_j - \vec{r}_i|) \quad (2.4)$$

(2) 内挿形式の離散化モデル

本研究は内挿形式の離散化モデル中の移動最小二乗法を使用する。内挿形式の離散化モデルは内挿関数の係数で微分方程式の項を表す。

$$\phi_j - \phi_i = a_1 x_{ij} + a_2 y_{ij} + a_3 x_{ij}^2 + a_4 x_{ij} y_{ij} + a_5 y_{ij}^2 \quad (2.5)$$

式(2.5)のように、多項式を用いて粒子 i の近傍で内挿する。近傍粒子の ϕ_j を使えば、内挿関数の係数 $a_1 \sim a_5$ の最小二乗推定値が得られる。従って、式(2.6)に示すようにテーラー展開を用いれば、 $a_1 \sim a_5$ から微分方程式を離散化できる。

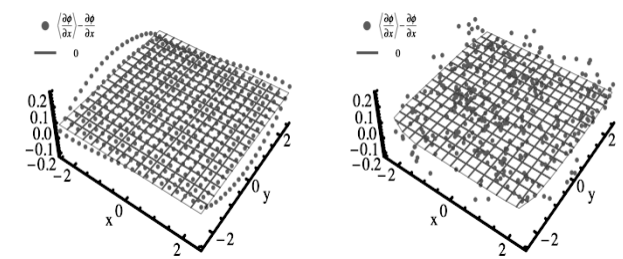
$$\begin{aligned} \langle \nabla \phi \rangle &= \left(\frac{\partial \phi}{\partial x}, \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) = (a_1, a_2) \\ \langle \nabla^2 \phi \rangle &= \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} = 2a_3 + 2a_5 \end{aligned} \quad (2.6)$$

(3) 離散化モデルの比較

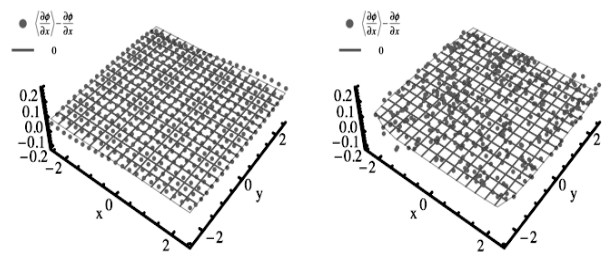
積分形式と内挿形式の二種類の離散化モデルの離散化効果を比較するため、ある目標関数 $\phi(x, y)$ を設定し、二種類のモデルによる一階微分の離散化結果を比較する。

図-1(a)は積分形式のモデルの計算結果を示している。左図は粒子が規則配置される場合の計算結果を示しており、微分値は理論値と基本的に同じことが分かる。しかし、右図に示す粒子が不規則配置される場合、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、粒子が格子状に配置されているのは積分形式の適合性を保証する制限条件である。

一方、図-1(b)に示す内挿形式のモデルの結果は、粒子が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。この結果は、粒子の配置に対する仮定を導入しなかったことにあることは明らかであり、内挿形式のモデル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。



(a) 積分形式離散化モデルによる空間離散化



(b) 内挿形式離散化モデルによる空間離散化

図-1 積分形式と内挿形式離散化モデルの比較

3. N-S方程式の離散化

本研究は空間的な離散化に移動最小二乗法を使用し、時間的な離散化は半陰的な解法を使用する。半陰的な解法は、一タイムステップを陽的段階と陰的段階二つに分けて計算を行う。陽的段階では粘性力と外力を計算し、粒子に作用させ、粒子位置を計算する。陽的な段階で得られた粒子の位置は連続式を満たさないため、陰的な段階で圧力ポアソン方程式を解き、得られた圧力を用いて粒子の位置を連続式を満たすように修正する。

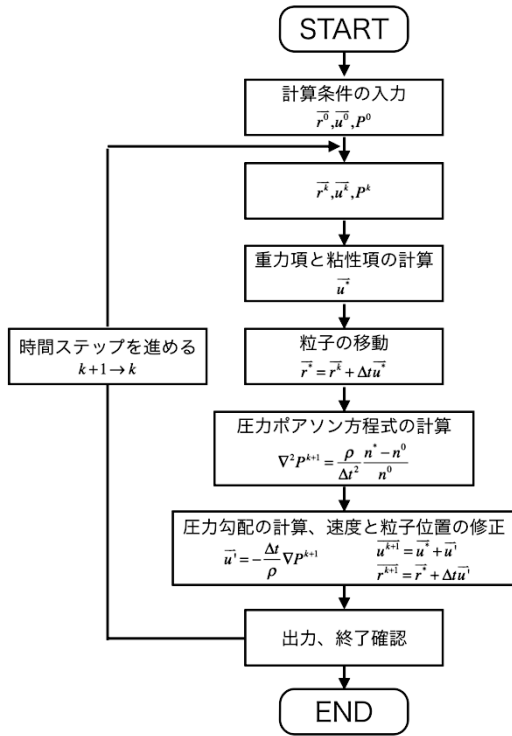


図-2 MPS法のアルゴリズム

図-2に示すのはMPSのアルゴリズムであり、積分形式の離散化モデルが使われている。式(3.1)はMPSの離散化した圧力ポアソン方程式を示している。 n^* は陽的な段階で得られた位置から計算した粒子数密度（ある粒子の近傍の粒子の細かさ）、 n^0 は計算初期の粒子数密度である。

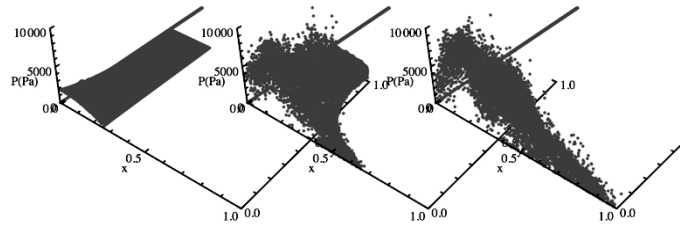
$$\nabla^2 P = -\frac{\rho_0}{\Delta t^2} \left(\frac{n^* - n^0}{n^0} \right) \quad (3.1)$$

内挿形式の離散化モデルは、重み関数を使用していないため、式(3.1)を使用することができない。粒子近傍の物理量の重み付き平均値で粒子の物理量を表しているの、粒子の位置が連続式を満たさないと、重み関数の値

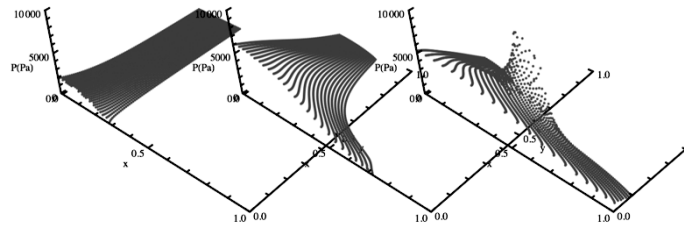
が変わる。そのため、粒子数密度は計算初期と異なる。しかし、内挿形式の離散化モデルを使用すれば、重み関数がない。そのため、粒子の位置の変化は流体の密度の変化を反映することができない。その代わりに内挿形式の離散化モデルを使用する場合では、式(3.2)に示すように陽的な段階で得られた速度の発散を圧力ポアソン方程式のソース項として使う。

$$\nabla^2 P = -\frac{\rho}{\Delta t^2} \nabla u^* \quad (3.2)$$

4. 内挿形式の離散化モデルによる計算結果



(a) 積分形式離散化モデルによる水柱崩壊計算



(b) 内挿形式離散化モデルによる水柱崩壊計算

図-3 積分形式と内挿形式離散化モデルによる水柱崩壊計算

図-3は二次元水柱崩壊の計算結果を示す。縦軸は圧力を表している。計算の初期は粒子が規則配置されているため、積分形式と内挿形式は両方とも安定的に計算できることが分かる。時間が進むと、粒子の配置が乱れるため、積分形式の計算結果は大きな圧力擾乱が見られる。それに対して、内挿形式は計算初期積分形式と同じように計算を安定的に進行する。ところが、時間がさらに進むと、積分形式の計算結果はある程度圧力が振動しているが、計算は発散しない。一方、内挿形式の計算結果は粒子の距離が離れ過ぎで、計算が発散してしまうことが分かる。

計算が発散する原因は、内挿形式の離散化モデルは粒子の位置と関係ない速度の発散を圧力ポアソン方程式のソース項として扱っているため、粒子数密度を一定に維持することができないと考えられる。

5. 最小二乗法による内挿を用いた移流項の処理手法

前節に述べたように、内挿形式の離散化モデルで計算する時に、粒子数密度（計算点の細かさ）が一定になる保証がない。すなわち、ラグランジュ的なN-S方程式を離散化する際に、計算点が流体とともに移動している。その結果、計算点が細かくなったり粗くなったりする。

この問題点の解決策として、一つ考えられる方法は計算点を固定することである。

MPS法の一タイムステップの最後は圧力勾配から速度や位置を修正し、得られた結果は $k+1$ タイムステップ位置 $\vec{r}^{k+1}$ の物理量 $\vec{u}^{k+1}(\vec{r}^{k+1})$, $p^{k+1}(\vec{r}^{k+1})$ である。計算点の位置を固定するために、図4の枠の中示したように $k+1$ タイムステップ位置 $\vec{r}^0$ の物理量 $\vec{u}^{k+1}(\vec{r}^0)$, $p^{k+1}(\vec{r}^0)$ を計算する必要がある。

具体的な方法は：1、位置 $\vec{r}^{k+1}$ の物理量 $\vec{u}^{k+1}(\vec{r}^{k+1})$, $p^{k+1}(\vec{r}^{k+1})$ を用いて、式(2.5), (2.6)から内挿関数の係数を求める。2、計算初期の粒子位置 $\vec{r}^0$ を内挿関数に代入し、 $\vec{r}^0$ 位置の物理量を求める。

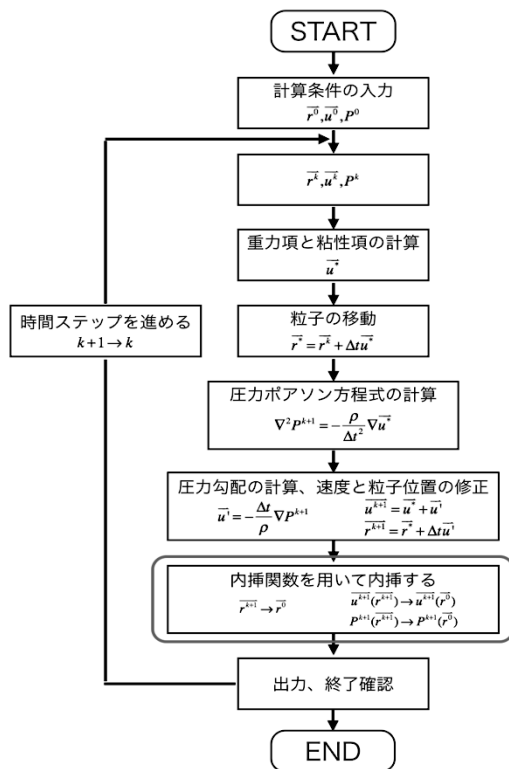
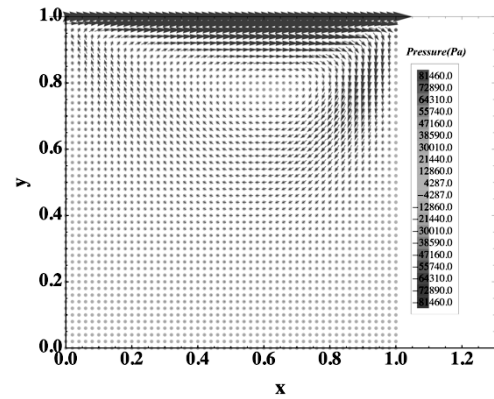


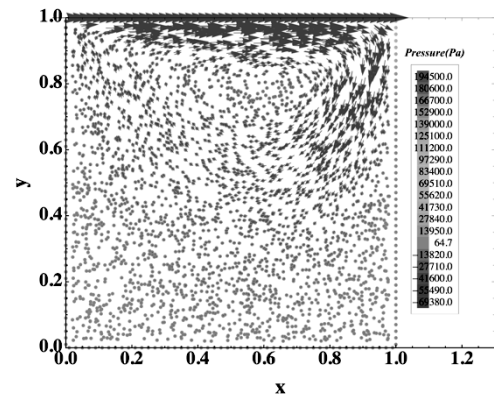
図4 本研究提案する計算手法のアルゴリズム

6. 提案する手法による計算結果

本研究提案した手法で、レイノルズ数 $Re = 100$ のキャビティ流れの計算を行った。図5は計算結果を示している。



(a) 粒子が規則配置される



(b) 粒子がランダム配置される

図5 提案する手法によるキャビティ流れの計算結果

7. まとめ

本研究はメッシュフリー計算手法における積分形式と内挿形式の空間離散化モデルを比較した。積分形式の空間離散化モデルの適合性によって不自然な圧力擾乱が生じることを示した。また、内挿形式の空間離散化モデルを使う時に、計算点の位置が激しく変化する場合、計算が発散してしまうことを確認した。

それに対して、本研究は新しい手法を提案した。MPS法に最小二乗法を導入し、内挿を行う。それによってラグランジュ形式の支配方程式を離散化しても、計算点を固定できる。

図5の計算結果から見ると、粒子の配置に関わらず、計算を安定に行うことができ、本手法の有効性を検証した。

参考文献

- 1) G.R.Liu Meshfree Methods, CRC Press, 2010, pp. 13-20.
- 2) 玉井佑, 越塚誠一, 柴田和也, MPS法における高精度粒子間相互作用モデルの開発, 計算工学講演会論文集, 17, C-2-2, 2012