

背景格子を用いた粗視化粒子法による 計算高速化アルゴリズムの検討

Computational Acceleration Algorithm Using Background Grid-Based Coarse Particle Method

日名大基¹⁾, 林雅江²⁾, 奥田洋司³⁾, 松永拓也⁴⁾

Daiki Hina, Masae Hayashi, Hiroshi Okuda and Takuya Matsunaga

- 1) 東京大学 新領域創成科学研究科 (〒277-8563 千葉県柏市柏の葉5-1-5, E-mail: dai-14769-dhp@g.ecc.u-tokyo.ac.jp)
2) 博(工) 東京大学 新領域創成科学研究科 助教 (〒277-8563 千葉県柏市柏の葉5-1-5, E-mail: masae@edu.k.u-tokyo.ac.jp)
3) 工博 東京大学 新領域創成科学研究科 教授 (〒277-8563 千葉県柏市柏の葉5-1-5, E-mail: okuda@edu.k.u-tokyo.ac.jp)
4) 博(工) 東京大学 新領域創成科学研究科 講師 (〒277-8563 千葉県柏市柏の葉5-1-5, E-mail: tmatsunaga@edu.k.u-tokyo.ac.jp)

We are working on developing a new computational acceleration algorithm that achieves non-uniform spatial resolution in particle methods. The proposed method aims to reduce computational cost by generating multi-level coarse particles using background grids. We validate our method using a two-dimensional cavity flow and a three-dimensional dam break problem. The results show that computational time can be reduced while maintaining acceptable accuracy by coarsening. The velocity and pressure distributions demonstrate good agreement with reference solutions and experimental data. Future work will focus on developing more sophisticated coarsening criteria beyond the simple distance-from-boundary approach, improving computational efficiency, and applying the method to more complex problems with moving boundaries and free surfaces.

Key Words : computational fluid dynamics, particle method, multi-resolution, least squares method

1. 緒言

数値流体解析の手法には格子法と粒子法がある。粒子法は、自由表面流れをはじめとする複雑な移動境界問題に適した計算手法として、近年大きな注目を集めている。

しかし、粒子法では計算領域全体を一様な空間解像度で計算することを基本とするため、スケールギャップの大きな問題では多大なコストを要するという大きな問題がある。この課題を解決するために、非一様な空間解像度を実現できる可変解像度手法が必要とされている。そこで、本研究では、粒子法の新たな可変解像度手法の開発を行い、計算高速化を目指す。

2. 既往研究

この章では既存の可変解像度粒子法[1]~[5]を、粒子分裂・合体型、領域分割型、粒子サイズ変化型の3つに分類し、それぞれの長所と短所を説明する。

(1) 粒子分裂・合体型[1, 2]

高解像度領域に流入する粒子を小さい粒子に分割し、流出する複数粒子を合体して大きな粒子にする手法である。この手法では、分裂と合体に伴う粒子サイズの変化の定式化が単純であり、体積保存性を容易に満足できる利点がある。一方で、粒子が分裂や合体をする際に、精度低下や数値不安定化が起きることや、合体のペア粒子が見つかからず合体不能に陥りやすい問題がある。また、異なる

粒子サイズが混在した場で空間微分を評価することにも課題が指摘される。

(2) 領域分割型[3, 4]

この手法では、計算領域を異なる解像度を与える複数の領域に分割し、境界条件を用いて領域間の連成問題を解くものである。各領域において解像度は一様であり、異なる粒子サイズが混在するこがないため、空間微分において一様解像度向けの定式化がそのまま適用できる利点がある。一方で、領域間の粒子の受け渡しによって、流体体積の保存性を失うことによつて、領域間の連成計算によって計算コストが増大する課題がある。

(3) 粒子サイズ変化型[5]

この手法では、誤差評価関数に基づいて粒子サイズを時々刻々と変化させることで粒子サイズを連続的に変化させる。そのため、計算精度と安定性に優れている。しかし、粒子数は原則一定でかつ大きな解像度変化を考慮できないことや、自由表面流れへの適用できることなどが課題として指摘される。

3. 提案手法

既存手法の欠点を踏まえ、本研究では以下の4つの条件すべてを満たすことを目標に、新たな可変解像度手法の開発を研究目的とする。

- ① 解析精度と数値安定性が大きく低下しない

- ② 体積保存性を有する
- ③ 自由表面流れに適用可能である
- ④ 空間的に解像度を大きく変化できる

(1) 基本概念

以降では粒子間距離を粒子サイズとして説明を行う。まず、高解像度を基本として、計算領域全体に基本となる小さな粒子(微細粒子)を配置する。そのうえで、解像度の要求が低いと考えられる領域(低解像度領域)に、大きな粒子(粗視化粒子)を重合配置する。このことを粗視化と呼ぶ。粗視化粒子の背後にある微細粒子は、粗視化粒子に速度や圧力といった代表値を計算させることで計算を簡略化する。

(2) 背景格子

粗視化粒子の配置には、あらかじめすべての微細粒子を囲むように定義された背景格子を用いる。背景格子の格子間隔は計算効率と数値安定性を考慮して微細粒子のサイズの2倍とする。

次節で説明する粗視化判定法に基づき、粗視化を行う場合には、図1のように背景格子の中央に粗視化粒子を配置する。このとき、背後にある微細粒子は削除せず、配置された粗視化粒子がそのセル内の代表として振る舞う。

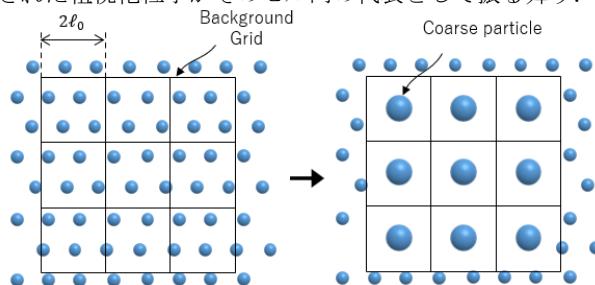


図-1 背景格子を用いた粗視化方法

(3) 粗視化アルゴリズム

粗視化判定法は次のとおりである。背景格子のひとつのセルの中にあるすべての微細粒子が、最近傍境界までの距離が影響半径以上であるとき、そのセルの中心に粗視化粒子を生成する。反対に、セル内の粒子にひとつでも最近傍境界までの距離が影響半径未満の粒子を含んだり、そもそも空のセルであったりする場合には粗視化を行わない。このように、本研究では低解像度領域かどうかを、界面や壁面などの境界からの距離によって判断し、微細粒子が低解像度領域内にあると判定されれば粗視化を行う。

さらに、この判定を粗視化された粒子に対しても行うことで、多段の粗視化を可能とする。ただし、レベル1の粗視化粒子は上記のように背景格子の中央に配置するが、それ以降のレベルでは、図2のように周囲4つの粗視化粒子の中央に配置する。

粗視化レベルを1段増やすごとに、粒子のサイズ(計算点の距離)は2倍になる。このとき、粗視化粒子の影響半径もそれに伴って倍増するため、粗視化レベルには上限があ

るが、あらかじめ設定をしておくことで、それ以前のレベルで粗視化を停止することも可能である。

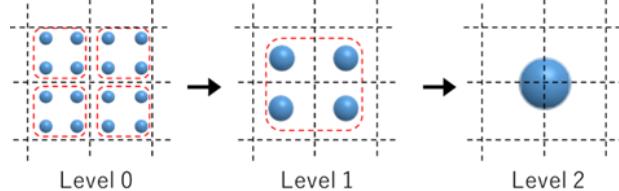


図-2 多段階の粗視化粒子の生成法

(4) 計算手順

具体的な計算手順は次のとおりである。ただし、本研究では、高い精度と安定性が期待されている安定化LSMPS法[6]にこのアルゴリズム組み込んでいるが、ここでは簡単に粗視化粒子に関する手順のみを示す。 $r^k, u^k, u^*, P, \Delta t, v, \rho$ はそれぞれ粒子の k ステップ目の位置、 k ステップ目の速度、仮速度、圧力、時間刻み幅、動粘性係数、密度を表す。また、以降では、粗視化されていない微細粒子とそれ以上粗視化されない粗視化粒子のことをまとめて代表粒子と呼ぶことにする。

- ① 全ての粒子に関して粗視化判定を行う
 - ② 粗視化粒子を生成する
 - ③ 粗視化粒子の速度を補間する
 - ④ 代表粒子の仮速度を求める
- $$u^* = u^k + \Delta t [-(u^k \cdot \nabla) u^k + v \nabla^2 u^k]$$
- ⑤ 代表粒子の圧力を求める
- $$\nabla^2 P = \frac{\rho}{\Delta t} \nabla \cdot u^*$$
- ⑥ 代表粒子の速度を求める
- $$u^{k+1} = u^* - \frac{\Delta t}{\rho} \nabla P$$
- ⑦ すべての微細粒子の位置を更新し、速度を修正する

$$r^{k+1} = r^k + \Delta t u^k + \delta r$$

$$u^{k+1} = u^{k+1} + (\Delta r \cdot \nabla) u^{k+1}$$

- ⑧ 粗視化粒子の速度を微細粒子にマッピングする

この手順を繰り返して時間ステップを進める。このように、粗視化された微細粒子は、粗視化粒子に速度や圧力を計算させ、それをマッピングした値を用いて移動する。手順③の速度の補間にはLSMPS法Type-B[7]を用いる。手順⑧のマッピングとは、代表粒子の速度を用いて、粗視化された微細粒子の速度を求ることである。

ここで、安定化LSMPS法は、従来のLSMPS法の数値安定性を大幅に向上させた手法であり、特に複雑な自由表面流れの解析に有効である。

4. 数値検証

以下では2次元キャビティ流れと3次元ダムブレークを用いて提案手法の計算精度と計算時間の検証を行う。

(1) 2次元正方キャビティ流れ

検証に用いた2次元正方キャビティ流れはレイノルズ数100とし、はじめに配置する微細粒子は 64×64 個とした。そのうえで、粗視化レベルの上限を変化させた。

図3はマッピング(前章の計算手順⑧)する前の代表粒子の圧力分布を、図4はマッピング後の微細粒子の速度分布を表す。図3および図4の(a)は粗視化なし、(b)は粗視化上限レベル1、(c)は粗視化上限レベル2、(d)は粗視化上限レベル3の結果である。このように、粗視化によって全体的な圧力分布と速度分布のパターンに大きな違いが出ることはなく、基本的な流れは維持された。特に粗視化の上限がレベル1であるときは粗視化を行っていない通常の手法とほとんど同一の結果が得られている。一方で、粗視化レベルが上がるにつれて、渦の大きさや位置に若干の変化が見られ、特に下部にできる二次渦が大きくなる傾向が見られた。これは、粗視化によって局所的な解像度が低下し、微細な流れ構造の再現性が若干低下するためと考えられる。また、流れが定常状態に落ち着くまでにかかる時間は粗視化レベルの上限が上がることでわずかに短くなった。粗視化により数値粘性が若干増加したためだと考えられる。

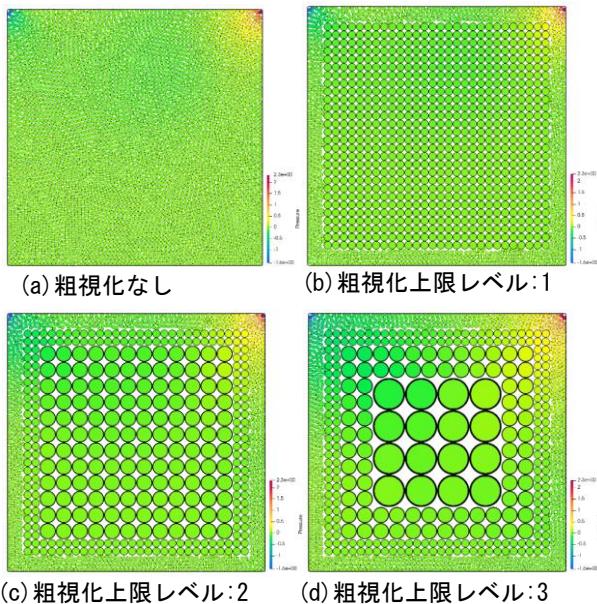


図-3 2次元キャビティ流れにおける圧力分布の比較

図5に異なる粗視化上限レベルにおける速度分布をGhiaら[8]の数値計算解および粗視化なしの計算結果と比較した。特にレベル3では流れの局所的な特性において若干の誤差が生じることが観察された。特に注目すべき点として、レベル1とレベル2では壁面近傍における速度勾配が高精度に保存されている一方、レベル3では水平中心線の垂直速度成分で若干の偏差が見られる。しかしながら、大域的な流れはすべての粗視化レベルで概ね再現されており、特にレベル1ではGhiaらの結果と良く似た。

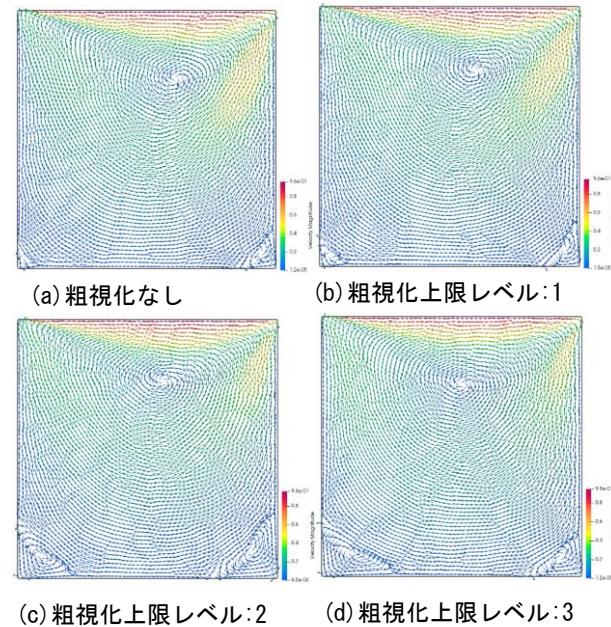


図-4 2次元キャビティ流れにおける速度分布の比較

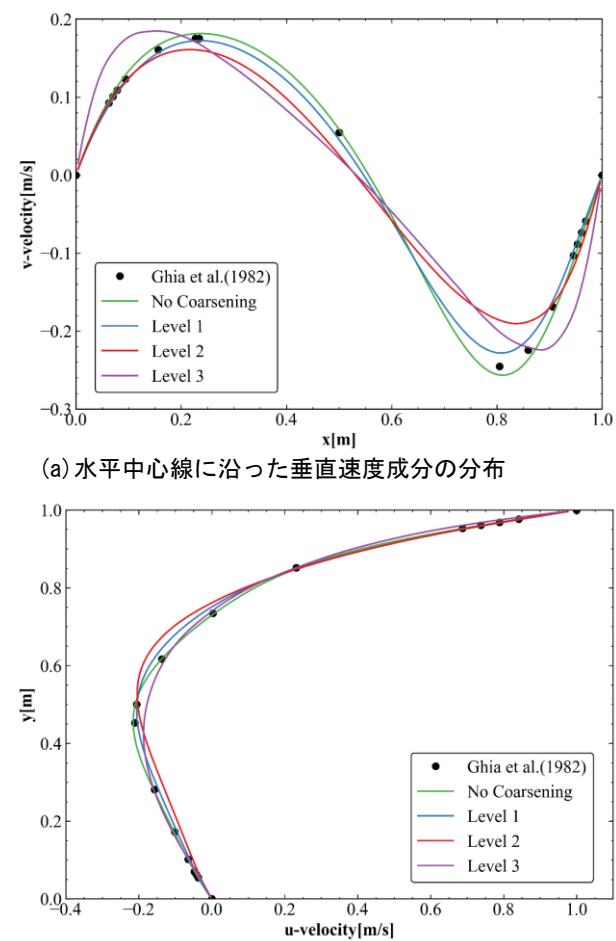


図-5 2次元キャビティ流れにおける中心線上の速度分布

図6に各粗視化上限レベルにおける計算時間と代表粒子数の変化を表す。棒グラフは計算時間の内訳を表し、赤線は代表粒子数の推移を示している。粗視化レベルの増

加に伴い、代表粒子数は顕著に減少し（粗視化しない場合の4096個から粗視化上限レベル3の1264個）、全体の計算時間も短縮される。粗視化しない場合から粗視化上限レベル1の粗視化への移行時に最も大きな粒子数および計算時間の減少が見られ、粗視化上限レベル2以降での効率改善は緩やかになる。

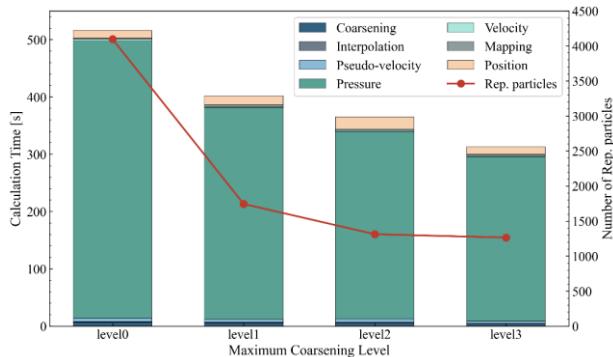


図-6 粗視化レベルによる計算時間と代表粒子数の関係

以上の結果から計算時間の短縮という粗視化の利点と計算精度のバランスが最適であるような粗視化レベルの上限を決めることが重要である。

(2) 3次元ダムブレーク

次に、図7のような形状の容器と内部に固定された箱の3次元ダムブレーク問題に関して、Kleefsmanらの実験結果[9]を用いて検証を行う。今回は粗視化レベルの上限は設けず、はじめに配置する微細粒子の粒子間距離は0.01 mとした。

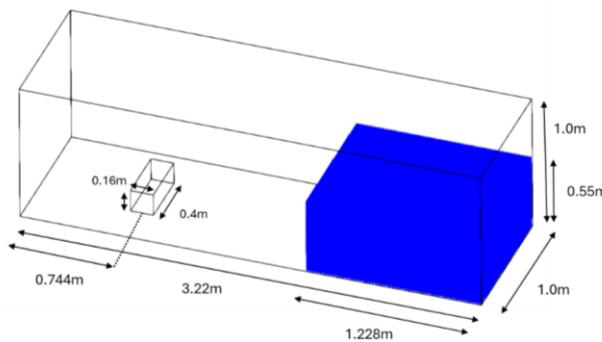
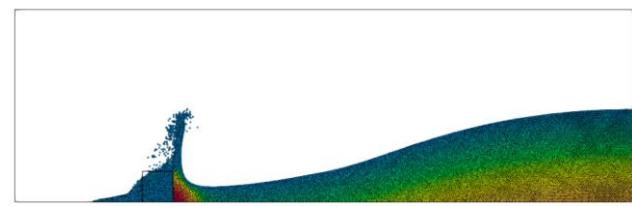
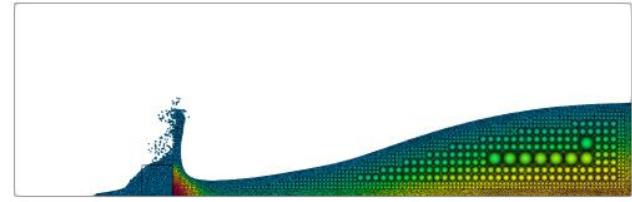


図-7 検証に用いたダムブレークの問題設定

図8に流体が箱に衝突した直後の粗視化なしと粗視化ありの速度分布を示す。ただし、粗視化粒子が見えるように奥行き方向の中央断面における様子を表す。境界から離れるほど大きな粗視化粒子が生成されていることが分かる。定性的な流れの様子は粗視化なしと粗視化ありで良く一致した。



(a) 粗視化なし



(b) 粗視化あり

図-8 3次元ダムブレークの流体が箱に衝突する際の圧力分布(奥行き方向中央断面の様子)

図9に容器内部の箱の右側面（高さ0.02 m）における圧力の時間変化を粗視化なしとありの計算結果、そしてKleefsmanらの実験結果との比較を示す。はじめに流体が箱に衝突することで圧力が急上昇し、その後徐々に安定した状態へ移行しながら4秒後半あたりにわずかに上昇するという過渡的な圧力の時間変化は粗視化の有無にかかわらず、非常に良く計算することができている。急上昇のピークの値が粗視化の有無により多少異なるものの、それ以外では圧力の値が良く一致している。

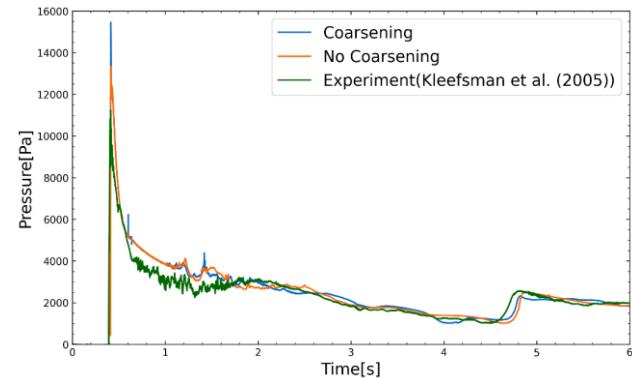


図-9 容器内部の箱の右側面における圧力の時間変化

図10に粗視化なしときの総粒子数と、粗視化ありのときの代表粒子のレベル別の内訳を時間経過に従って示す。流体の流れが開始すると、はじめは流体の厚みが小さくなることで粗視化レベルが小さくなり、代表粒子数は増加するが、流れが落ち着くことで代表粒子数の変化も小さくなり、最終的には粗視化なしの総粒子数のおよそ半分程度になった。一方で、計算時間は粗視化なしで261分、粗視化ありで238分と8.8%の減少にとどまった。

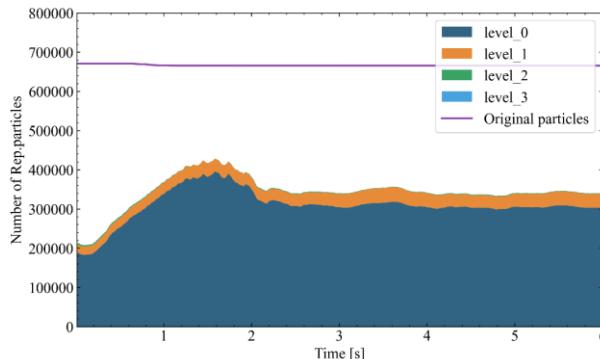


図-10 粗視化なしの総粒子数と粗視化ありの代表粒子数の時間変化とその内訳

以上の結果から背景格子を用いた粗視化粒子法により、圧力や速度の計算に用いる粒子の数が大きく減少し、それに伴って精度を高く保ちながら計算時間も減少することが分かる。

5. 結言

背景格子を用いて低解像度領域の粒子を多段階に粗視化するような計算高速化アルゴリズムの開発に取り組んだ。この手法の有効性を検証するため、2次元キャビティ流れと3次元ダムブレーク問題への適用を行った。

2次元キャビティ流れの検証では、粗視化の最大レベルを制限することで精度をおおよそ保ちながら、計算時間を約22~40%ほど削減することができた。しかし、粗視化レベルの上限が大きくなるほど渦の大きさと位置、壁面近傍の速度勾配において精度が低下した。

3次元ダムブレークの検証では、計算精度を大きく損なうことなく、計算粒子数を約半分に削減することができた。ただし、計算時間の短縮効果は2次元キャビティ流れほど顕著ではなく、この点は今後の課題である。

今後は境界からの距離だけでなく、流れ場の勾配情報や渦度などを考慮した、より高度な粗視化判定基準の開発や、さらなる計算精度の向上と計算時間の短縮のために提案手法の改善を図る。

参考文献

- [1] Vacondio, R., Rogers, B. D., Stansby, P. K., Mignosa, P., & Feldman, J. (2013). Variable resolution for SPH: a dynamic particle coalescing and splitting scheme. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 256, 132-148.
- [2] Tanaka, M., Cardoso, R., & Bahai, H. (2018). Multi-resolution MPS method. Journal of computational physics, 359, 106-136.
- [3] Shibata, K., Koshizuka, S., Matsunaga, T., & Masaie, I. (2017). The overlapping particle technique for multi-resolution simulation of particle methods. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 325, 434-462.
- [4] Bellezzi, C. A., Cheng, L. Y., Amaro Jr, R. A., & Tsukamoto, M. M. (2022). Border mapping multi-resolution (BMMR) technique for incompressible projection-based particle methods. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 396, 115013.
- [5] SÖDERSTEN, A., Matsunaga, T., KOSHIZUKA, S., HOSAKA, T., & ISHII, E. (2022). Adaptive resizing-based multi-resolution particle method. Mechanical Engineering Journal, 9(1), 21-00309.
- [6] Matsunaga, T., & Koshizuka, S. (2022). Stabilized LSMPS method for complex free-surface flow simulation. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 389, 114416.
- [7] Tamai, T., & Koshizuka, S. (2014). 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, 277-305.
- [8] Ghia, U. K. N. G., Ghia, K. N., & Shin, C. T. (1982). High-Re solutions for incompressible flow using the Navier-Stokes equations and a multigrid method. Journal of computational physics, 48(3), 387-411.
- [9] Kleefsman, K. M. T., Fekken, G., Veldman, A. E. P., Iwanowski, B., & Buchner, B. (2005). A volume-of-fluid based simulation method for wave impact problems. Journal of computational physics, 206(1), 363-393.