

SPH 法に関する基礎的研究*

(第2報, 粒子径が異なる場合の2相流境界問題の取扱い)

小原 治樹*¹, 本田 真理子*², 小山 彰規*²

Fundamental Study of SPH Method

(2nd Report, Treatment of 2 Phase Flow in Case of Uneven Particles)

Haruki OBARA*³, Mariko HONDA and Akinori KOYAMA

*³ Department of Mechanical Systems Engineering, Toyama University,
3190 Gofuku, Toyama-shi, Toyama, 930-8555 Japan

In preceding report, we proposed Relaxation equations for the smoothed particle hydrodynamics (SPH) method suited to suppress the numerical disorder around the boundary of 2 phase flow as gas and liquid. The effect of the equations was discussed for uniformly distributed particles having same smoothing length. But, when the smoothing length of particles is not constant, it causes numerical disorder again. Additionally, there was a difficulty that the momentum conservation is not satisfied in the Relaxation equation. This paper discusses the problem of numerical disorder caused by the difference of the smoothed length between particle, and we propose a new calculation method suited to suppress the numerical disorder. Additionally, we discuss about the treatment of smoothing length, which was not clearly discussed previously, and we propose a revised Relaxation equation.

Key Words: Numerical Analysis, SPH, Particle Method, 2 Phase Flow, Un-even Particles

1. 緒言

SPH 法は, 計算プログラムが単純で多相流体問題を扱いやすいが, 一般工学問題に適用する場合に, 2 流体の接触面近傍で数値異常が発生し, 計算困難となる。これをここでは2相流境界問題と呼ぶ。前報^①ではこの数値異常を押さえる緩和計算式を提案し, 粒子径が一樣な場合について計算法の有効性を確認した。この緩和計算式は, 粒子径が均等で, 求積点 i と他の j 粒

子間に流体境界が存在するとき, i 粒子に隣接する, 従ってもつとも影響が大きい粒子による誤差を無くすように構成された式である。しかし, 蒸発などの相変化問題や, 強い衝撃波問題などの場合には, 異なる径の粒子を取扱う必要があり, その場合にも, 通常の計算法では加速度などが異常な値となるため, 解析困難になる。従って, 異なる径の粒子問題に対しても緩和計算式が有効か否か調べる必要がある。また, 緩和計算式は, 平滑長さ h が一樣な場合以外, 運動量保存則を満たさないという問題があり, さらにこの問題に関係して, h をどのように取り扱うべきかという問題が残された。この h のとり方は重要な問題であるが, 従来, 詳細に議論し

* 原稿受付 2006年3月15日。

*¹ 正員, 富山大学工学部 (〒930-8555 富山市五福3190)。

*² 学生員, 富山大学工学部。

E-mail: obarah@eng.toyama-u.ac.jp

たものが見あたらない。本報告では、粒子径が異なる場合の数値異常問題の解決法について検討し、あわせて h の取扱いについて論ずる。また修正した緩和計算式を提案する。

2. SPH法

SPH法の数学的根拠は、次式

$$\langle f(X) \rangle = \int f(X) W(X - X', h) dX' \quad (1)$$

であり、求積点 i における物理量 f の平均値および1次元勾配は、 i 及び各 j 粒子の影響を加算した離散形で

$$\langle f(X) \rangle_i = \sum_{j=1}^N f_j \frac{m_j}{\rho_j} W(X - X_j, h) \quad (2)$$

$$\langle \frac{\partial f(X)}{\partial x} \rangle_i = \sum_{j=1}^N f_j \frac{m_j}{\rho_j} \frac{\partial W(X - X_j, h)}{\partial x} \quad (3)$$

のように求める。ここで W は空間積分値が1となるガウス関数やBスプライン関数、 ρ は密度、 m は粒子質量、 h は核関数の広がりを表す平滑長さである。式(2)、(3)は任意点 X の物理量が各点の分布量の重ね合わせであるという考えに対応すると解されている。また、連続の式には通常 Libersky の式⁽²⁾

$$\frac{d\rho_i}{dt} = -\rho_i \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} \left\{ [u_j - u_i] \frac{\partial W}{\partial x} + [v_j - v_i] \frac{\partial W}{\partial y} + [w_j - w_i] \frac{\partial W}{\partial z} \right\} \quad (4)$$

が用いられる。式(4)に音速の C^2 をかければ圧力増分式になる。粘性なしの流体の運動方程式には、Monaghan の式⁽³⁾ (x 方向のみ書く)

$$\frac{du_i}{dt} = -\sum_j m_j \left(\frac{p_j}{\rho_j^2} + \frac{p_i}{\rho_i^2} \right) \frac{\partial W}{\partial x} \quad (5)$$

が用いられる。ここで、 u, v, w は x, y, z 方向の速度、 p は圧力を表す。

これに対し我々は2相問題のため、式(4)(5)に変わる計算式として次の圧力増分、加速度の緩和計算式を提案した⁽⁴⁾。

$$\frac{dp_i}{dt} = -\sum_j \frac{m_j}{\rho_j} \frac{2\rho_i C_i^2 \rho_j C_j^2}{\rho_i C_i^2 + \rho_j C_j^2} \left\{ [u_j - u_i] \frac{\partial W}{\partial x} + [v_j - v_i] \frac{\partial W}{\partial y} + [w_j - w_i] \frac{\partial W}{\partial z} \right\} \quad (6)$$

$$\frac{du_i}{dt} = -\sum_j \frac{m_j}{\rho_j} \left[\frac{p_i}{\rho_i} \left(\frac{\partial W_j}{\partial x_i} - \frac{\partial W_i}{\partial x_j} \right) + 2 \frac{p_j - p_i}{\rho_i + \rho_j} \frac{\partial W_j}{\partial x_i} \right] \quad (7)$$

式(7)では $\partial W/\partial x$ を区別し、 $\partial W_j/\partial x_i$ は i 位置における W_j の x 方向微分値、 $\partial W_i/\partial x_j$ は j 位置における W_i の x 方向微分値としている。他の式で単に $\partial W/\partial x$ とした場合は $\partial W_j/\partial x_i$ を表す。なお本論文では核関数としてガウス関数を用いた。

3. h が一様でない場合の誤差

粒子径が不均一な場合の数値異常は後述のように h の取り方に依存している。そこで最初に h の与え方について述べる。通常、 h の計算式には、

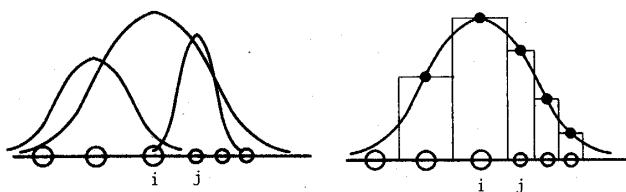
$$h = \eta \left(\frac{m}{\rho} \right)^{\frac{1}{3}}, \quad \text{通常 } \eta = 1 \quad (8)$$

または、

$$h = \eta \left(\frac{m}{\langle \rho \rangle} \right)^{\frac{1}{3}}, \quad \text{通常 } \eta = 1 \quad (9)$$

が用いられる。式(9)の h を式(8)と区別し、ここでは $\langle h \rangle$ と表す。 $\langle h \rangle$ は平均密度 $\langle \rho \rangle$ を用いて求めているため、分布は滑らかになる。式(9)が一般的なようである。

次に平均化方法について検討する。「物理量は各点の分布量の重ね合わせである」という考えでは、図1(a)のモデルのように、求積点 i の周囲に j 点があるとき、 j 点を中心とする核関数を用いて i 点の値を求めて加算する。この考えでは、 h として h_j を用いるのが妥当であり、この場合の h は粒子 j ごとに变化する。一方、式(1)の考えに立てば、図1(b)の曲線について求積点回りの $f \times W$ を積分するのであるから、 h を一定として、各粒子の $-h/2 \sim h/2$ 範囲の積分値を加算すべきである。ただし、平滑長さ h の値をどのように定めるかは別の問題として残る。



(a) Conventional method (b) Based on fundamental eq. (1)

Fig.1 Models of smoothing

ここではまず、(8)式を用い、図1(a)の考えに基づき、 h として h_j を用いた場合の誤差を調べる。

前報と同じく、左を気体、右を液体として準定常2相流れを考え、境界左右の du/dt が等しくなるように圧力分布を与えたモデルで計算する。即ち左右の流体の圧力勾配が密度に比例するとして、

$$-\frac{1}{\rho_{\text{gas}}}\left.\frac{\partial p}{\partial x}\right|_{\text{gas}} = -\frac{1}{\rho_{\text{liquid}}}\left.\frac{\partial p}{\partial x}\right|_{\text{liquid}} \quad (10)$$

を満たすように圧力勾配を与える。

気体は空気、液体は水とし、各粒子の質量がほぼ同じで、空気の h は水の h の 10 倍、従って体積では 1000 倍となるように h を定める。図 2 に計算モデルの圧力勾配を示す。図 2 の計算モデルで 3 次元正立方格子上に粒子を与えた時の加速度分布計算例を図 3 に示す。計算式は、Monaghan の式(5)、緩和計算式(7)を用いた。ここでは h として h_i を用いたが、加算範囲を単純に $4h_i$ などにとると、求積点が水の場合は影響範囲内に空気粒子が入らないため、加算されない。また求積点が空気粒子の場合には、水の h が小さいために、水粒子の影響が加算されない。結局、各流体でのみで平均化がなされ、端末効果が現れる。ここでは加算範囲を、求

| air | water |
|---|--|
| $p = p_0[1 - 0.000129(x/5.5)]$ [Pa] | $p = p_0[1 - 0.1(x/5.5)]$ [Pa] |
| $m = 1.29$ [kg], $\rho = 1.29$ [kg/m ³] | $m = 1$ [kg], $\rho = 1000$ [kg/m ³] |
| $h = 1.0$ [m], $C = 330$ [m/s] | $h = 0.1$ [m], $C = 1400$ [m/s] |
| $p_0 = 0.1$ [MPa] | |

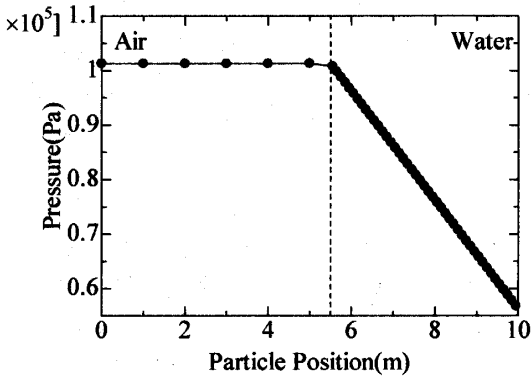


Fig. 2 Pressure distribution model

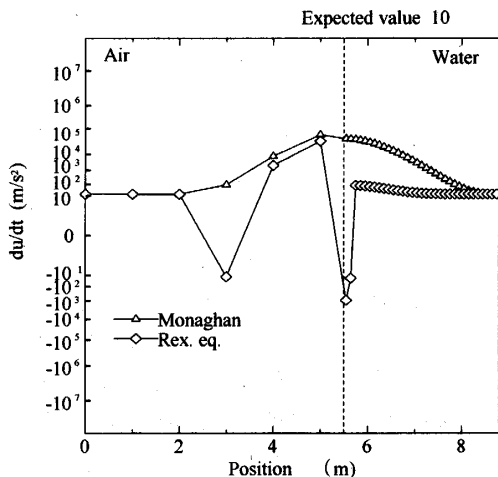


Fig. 3 du/dt distribution around boundary

積点に影響する粒子のうち、最も大きい h の 4 倍としている。 du/dt の期待値 10 [m/s²] に対し、境界面近傍の加速度は最大 10^5 程度の値となった。

4. 計算法の検討

4.1 h の値 図 3 の誤差問題を解決するため、SPH法の計算原理に立ち返って考察する。SPH法の理論根拠は式(1)である。またこのとき、核関数 W についてはその積分値が 1 であることを要する。しかしながら、図 3 の計算では図 1 (a)の方法を用いたため、後述の図 5 に見られるように W の積分値が 1 にならず、理論が破綻したと思われる。これが 2 相境界近傍の乱れの、第 1 の理由と考えられる。従って SPH法の理論根拠を式(1)とするならば、 h を一定にして求積点周りに積分すべきである。

次に h をどのように定めるかが問題になる。図 4 は、同一径の粒子を 3 次元正立方格子上に均等配置し、式(8)の η を変えて h の大きさを変えたときの $\langle \partial f / \partial x \rangle$ の誤差の計算結果を示す。 f の勾配は 1 になるように与えている。図 4 では通常用いられる $\eta = 1$ の場合の誤差は 10^{-3} 程度だが、 η が小さいと、即ち粒子サイズを表す h_i よりも平滑長さ h が小さくなると誤差は大きくなる。逆に η が大きいほど誤差が小さくなる。ただし、 η を大きくすれば平均化領域が拡大し、物理量の変化はなだらかになるため、むやみに η を大きくするのは望ましくない。これらのことから、基本的には求積点 i に影響するすべての j 粒子の内、最大の h を用いるのが妥当であると考えられる。ここでは $h = \text{Max} \langle h_i, h_j \rangle$ を採用する。

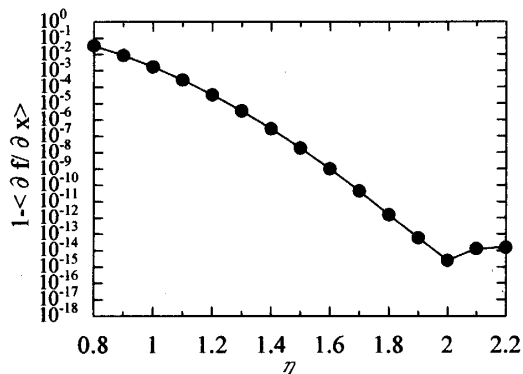
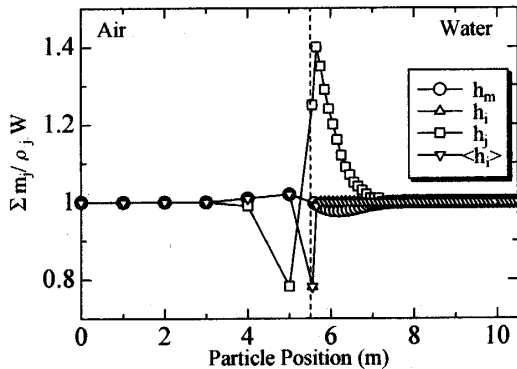
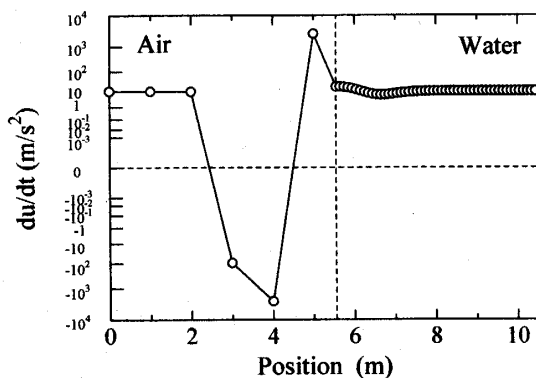


Fig. 4 Influence of η on error of $\langle \partial f / \partial x \rangle$ in case of uniformly distributed particles

h として $h = h_i$, $h = h_j$, $h = h_m = \text{Max} \langle h_i, h_j \rangle$, $\langle h_j \rangle$ を用い、図 2 の粒子配置で W の積分値を求めた計算結果を図 5 に示す。本来 W の積分値は 1 にならなければなら

ないが、図5では h_m の時に数%程度の誤差で W の積分値がほぼ1となり、誤差が最も小さいことが分かる。また $\langle h_j \rangle$ を用いても効果がないことがわかる。

次に h_m を用い、図2のモデルの場合に緩和式で計算した加速度分布を図6に示す。図6では加速度が 10 $[m/s^2]$ となるべきところ、境界近傍粒子では $\pm 10^3 [m/s^2]$ 程度の値となっており、平均化方法と h の与え方を考慮したのみでは不十分であることがわかる。

Fig. 5 Integral of W Fig. 6 du/dt distribution in case of $h = \text{Max}\langle h_j, h_i \rangle$

4・2 修正した加速度緩和計算式 4.1項の考えに従い、各粒子の平均化の時に、 h を一定とすれば、 $\partial W_j / \partial x_i = -\partial W_i / \partial x_j$ となる。このとき加速度の緩和計算式(7)は

$$\frac{du_i}{dt} = -\frac{2}{\rho_i} \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} \left[\frac{\rho_i \rho_j + \rho_j \rho_i}{\rho_i + \rho_j} \cdot \frac{\partial W}{\partial x} \right] \quad (11)$$

となる。これが新しい緩和計算式である。 i, j 粒子のみが存在するとして、 i, j 粒子の運動量変化を調べると、

$$m_i \frac{du_i}{dt} = -\frac{2m_i m_j}{\rho_i \rho_j} \left[\frac{\rho_i \rho_j + \rho_j \rho_i}{\rho_i + \rho_j} \right] \frac{\partial W_j}{\partial x_i} \quad (12)$$

$$m_j \frac{du_j}{dt} = -\frac{2m_i m_j}{\rho_j \rho_i} \left[\frac{\rho_j \rho_i + \rho_i \rho_j}{\rho_i + \rho_j} \right] \frac{\partial W_i}{\partial x_j}$$

となり、 $\partial W_j / \partial x_i = -\partial W_i / \partial x_j$ だから、式(12)の2つの

式を加算値は0となり、運動量保存則が満たされる。また $\rho_i = \rho_j$ のとき

$$\frac{du_i}{dt} = -\frac{1}{\rho_i} \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} (\rho_i + \rho_j) \frac{\partial W}{\partial x} \quad (13)$$

となるが、()の第1項は無有限一様空間で加算すると0になるので、式(13)は運動方程式を単純に平均化した式と一致する。従って、もとの運動方程式と矛盾しない。これにより運動量保存則が保証された加速度緩和計算式が得られたことになる。

4・3 積分加算法の提案 残された図6の誤差の原因として、数値積分誤差が考えられる。例えば積分範囲を $3h$ 程度としたとき、粒子均等分布では数値積分の刻み幅は h であるから、数値積分の刻み幅としてはかなり粗く、10%オーダーの誤差になっても不思議ではない。しかし粒子が均等分布の場合には各刻み幅での数値誤差が互いに打ち消しあうため、数値積分誤差はさほど大きくなる。ところが、不均等分布の場合には誤差が都合よく互いに打ち消しあうことができないため全体として大きな誤差を生じると思われる。そこで、 f は不明だから、核関数 W のみを粒子区間ごとに積分し、それを加算することにより、誤差を小さくすることを試みる。(これまでの計算を単純加算、この方法を積分加算と呼ぶ)ここでは、核関数 W に次のガウス関数を用いた。

$$W = \frac{1}{\sqrt{\pi^3 h^3}} \exp \left[-\frac{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2 + (z-z_i)^2}{h^2} \right] \quad (14)$$

ガウス関数は、次のように x, y, z 方向の関数の積に分けることができるため、取り扱いやすい。

$$W = W_x W_y W_z$$

$$W_x = \frac{1}{\sqrt{\pi} h} e^{-\frac{(x-x_i)^2}{h^2}}, \quad W_y = \frac{1}{\sqrt{\pi} h} e^{-\frac{(y-y_i)^2}{h^2}}, \quad (15)$$

$$W_z = \frac{1}{\sqrt{\pi} h} e^{-\frac{(z-z_i)^2}{h^2}}$$

このとき圧力の緩和計算式(6)は、

$$\frac{dp_i}{dt} = \sum_j \frac{2\rho_i C_i^2 \rho_j C_j^2}{\rho_i C_i^2 + \rho_j C_j^2} \left\{ [u_j - u_i] \Delta \left(\frac{\partial W}{\partial x} \right)_j \Delta W_{ij} \Delta W_{ij} \right. \\ \left. + [v_j - v_i] \Delta W_{ij} \Delta \left(\frac{\partial W}{\partial y} \right)_j \Delta W_{ij} \right. \\ \left. + [w_j - w_i] \Delta W_{ij} \Delta W_{ij} \Delta \left(\frac{\partial W}{\partial z} \right)_j \right\} \quad (16)$$

となり、加速度の緩和計算式(11)は

$$\frac{du_i}{dt} = \frac{2}{\rho_i} \sum_j \left[\frac{\rho_j \rho_i}{\rho_i + \rho_j} \right] \Delta \left(\frac{\partial W}{\partial x} \right)_j \Delta W_{yj} \Delta W_{xj} \quad (17)$$

と置くことができる。ここで、 $\Delta(\partial W/\partial x)_j$ は j 粒子について区間 $x_j - h_j/2 \sim x_j + h_j/2$ で $\partial W/\partial x$ を積分した量、

$$\Delta \left(\frac{\partial W}{\partial x} \right)_j = \frac{1}{\sqrt{\pi}h} \left[e^{-\frac{(x_j+h_j/2-x_i)^2}{h^2}} - e^{-\frac{(x_j-h_j/2-x_i)^2}{h^2}} \right] \quad (18)$$

であり、また ΔW_{yj} は、 j 粒子について区間 $x_j - h_j/2 \sim x_j + h_j/2$ で W_x を積分した量、

$$\begin{aligned} \Delta W_{yj} &= \int_{x_j-h_j/2}^{x_j+h_j/2} \frac{1}{\sqrt{\pi}h} e^{-\frac{(x-x_i)^2}{h^2}} dx \\ &= \Phi \left[\frac{1}{h} \left(x_j + \frac{h_j}{2} - x_i \right) \right] - \Phi \left[\frac{1}{h} \left(x_j - \frac{h_j}{2} - x_i \right) \right] \end{aligned} \quad (19)$$

である。 ΔW_y 、 ΔW_x も同様である。式(19)の誤差関数の積分 Φ には、次の近似計算式を用いることができる。

$$\begin{aligned} \Phi(x) &= \frac{1}{2} + \frac{\text{sgn}(x)}{2} \left\{ 1 - \left[1 + 0.0705230784|x| \right. \right. \\ &\quad + 0.0422820123|x|^2 + 0.0092705272|x|^3 \\ &\quad + 0.0001520143|x|^4 + 0.0002765672|x|^5 \\ &\quad \left. \left. + 0.0000430638|x|^6 \right]^{-16} \right\} \end{aligned} \quad (20)$$

なお、式(16)、(17)が式(6)、(11)に較べて (-) 符号が無いのは、 $\partial W_i/\partial x_i$ を $\partial W_j/\partial x_i$ に変えたためである。

以上の考えで図2の粒子分布で求めた W の加算値を図7に示す。 h は4.1項の方式で定めた。 W の加算値は 10^7 の精度で1である。

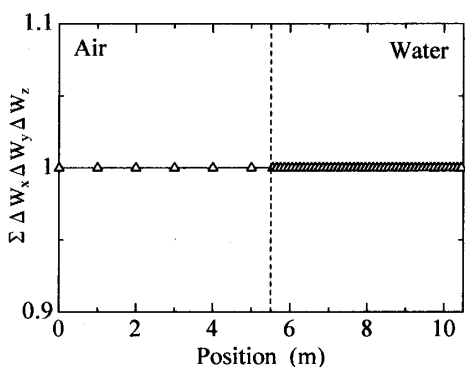


Fig.7 Integral of W

また、図2のモデルの場合の加速度を図8に示す。加速度の値は図6の3桁程度の誤差から50%程度に大幅に改善された。加算領域の広さが $3h$ では80%程度の誤差であったため、 $4h$ とした。数値計算誤差としてはま

だかなり大きい、計算が停止するほどの数値異常は発生しない。各粒子内での f の分布形が分かっており、 W だけでなく f の変化も入れて積分加算することができればより精度が向上するものと思われる。

図8は h の違いと密度の違いの、両方の影響を含んでいる。図9に h を変えずに密度比を変えた場合の加速度分布を示す。圧力勾配は式(10)に従い密度比に応じて変えている。密度比が1:1に近づくると誤差は小さくなる。密度比1:1の場合が純粋に h の違いの影響と考えられ、図から、その状態でも10%程度の誤差は残ることが分かる。また図10は h の比率を変えた場合である。 h の比率が1:1に近づくると誤差は小さくなり、 h が均等の場合には乱れは10%程度まで減少することがわかる。

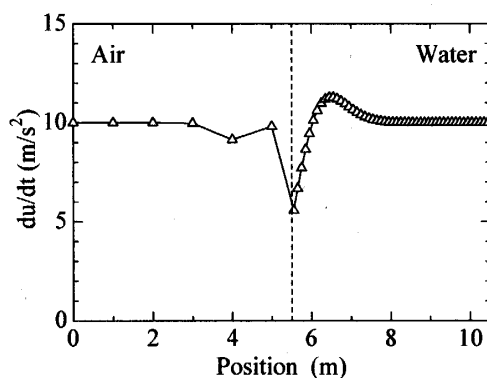


Fig.8 du/dt distribution

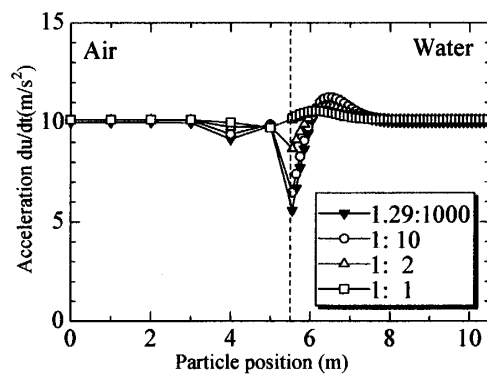


Fig.9 Influence of density ratio on du/dt

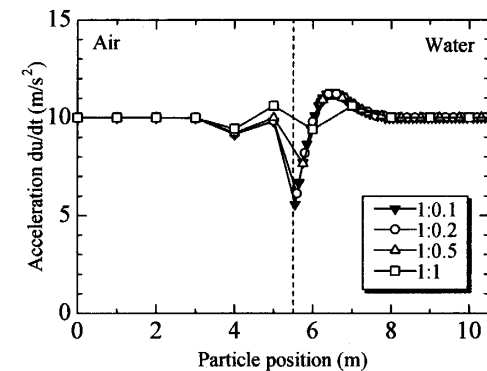


Fig.10 Influence of h ratio on du/dt

5. 解析例

以上の検討結果に基づき、気液2相問題の解析を行った。前報と同じく、初期条件として左に0.1 [MPa]の空気、右に0 [Pa]の水を与えたときの圧力変化を陽解法で計算した。図11に h 一様の場合の粒子配置モデルを示す。右半面を開放面、その他の面は3層の固定粒子を配置している。空気は断熱変化するものとする。解析は陽解法であるが、時間についてルンゲクッタギル法を用いた。人工粘性項は用いていない。固定粒子の圧力と速度には x 断面の圧力、速度の平均値を与えている。本来、固定粒子は空気や水粒子としてもよいが、ここでは緩和計算式の可能性を判断するため、あえて鉄の密度を与え、圧力、速度には、 x 断面における平均値を与えた。図12に $h=0.01$ [m]一様とした場合を示す。また、図13に空気及び固定壁を $h=0.01$ [m]、水を $h=0.001$ [m]とした場合の解析結果を示す。 $x=0\sim 0.02$ [m]は固定粒子、 $0.03\sim 0.07$ [m]は空気粒子、 0.08 [m]～は水粒子である。理論上はステップ状の圧力波が水中を右に伝播する。不均等分布の場合には均等の場合に較べ、境界面～水領域で大きな振動がみられるが、解析は可能であった。乱れは x 方向だけでなく z 方向にも存在する。固定壁と水の間密度及び h の違いによって z 方向の乱れが発生し、これに x 方向の乱れが重畳して全体に大きな数値乱れが生じたと推定される。

なお、この解析例の初期条件は緩和計算式の導出で仮定した準定常流れの条件を満たしていない。そのような状況でも、ここで提案した方式を用いると、従来困難であった、密度、粒子径などが大きく異なる場合の解析が可能になることが分かる。数値計算誤差が大きい、2相問題を、接触面を定義せずに扱うことができるから、FEM, FDMで取扱いが困難な複雑な事象の把握には有効と考えられる。

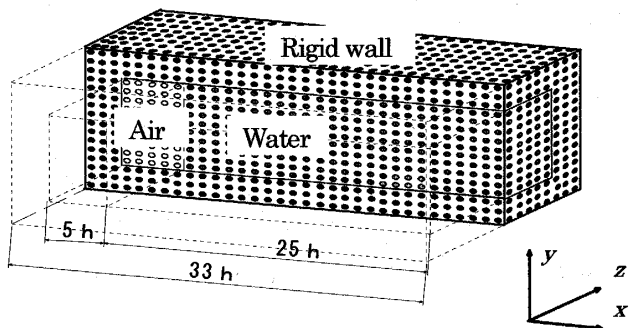


Fig.11 Three dimensional analyzed model

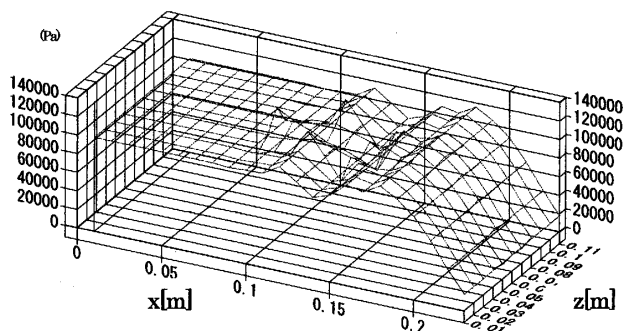


Fig.12 Pressure distribution (h : even, $t=36 \mu s$)

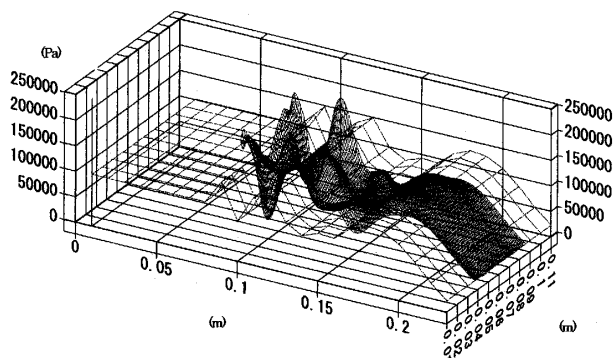


Fig.13 Pressure distribution (h : uneven, $t=36 \mu s$)

6. 結論

SPH法で不均等粒子分布の場合、平滑長さ h を一定とし、緩和計算式と積分加算を用いることにより、誤差が大幅に縮小され解析可能になることを示した。また運動量保存則を満たす、修正した加速度の緩和計算式を示した。

参考文献

- (1) Haruki Obara, Jhun Suemura and Mariko Honda : Fundamental Study of SPH Method (1st Report : Treatment of 2 Phase Flow), *Transactions of the Japan Society of Mechanical Engineers, Series B*, Vol.72, No.723, 2666-2671 (2006)
- (2) L. D. Libersky, A. G. Petschek, T. C. Carney, J. R. Hipp, F. A. Allahdadi : High strain Lagrangian Hydrodynamics, *Journal of Computer Physics*, 109, 67-75 (1993)
- (3) J. J. Monaghan : Particle Methods for Hydrodynamics, *Computer Physics Reports* 3, 71-124 (1985)