高精度DEM-MPS法のための計算安定スキームの提案

Dynamic stabilizer for an accurate DEM-MPS method

鶴田修己¹・KHAYYER Abbas²・後藤仁志³

Naoki TSURUTA, Abbas KHAYYER and Hitoshi GOTOH

When armor stones are dumped into water from a hopper above a water surface, a violent motion of water surface may arise from violent entries of stones. These violent behaviors bring a problem of numerical instability even in computation by particle methods. A stability of semi-implicit schemes, such as MPS or ISPH, depends on control of unphysical pressure fluctuations. Hence accurate particle methods are necessary in computation of solid-liquid two-phase flow with violent motion of water surface. In particular, around interface of solid and liquid phases, a pressure fluctuation is apt to be locally high. In this study, the DS (Dynamic Stabilization) scheme is introduced into the DEM-MPS method in order to resolve the problem, and its validity is examined by some numerical benchmark tests through the comparison with results of the previous DEM-MPS method.

1. はじめに

底開式バージからの海中土砂投棄の基本モデルとしての粒子群の水中投下問題は自由水面を伴う大変形問題であることから、数値シミュレーションによって一連の流体・粒子挙動を追跡するには計算安定性への配慮が肝要である。これまで、数値シミュレーションを用いた粒子群水中投下問題に関する研究は多いが（例えば、重松ら、2001, Haradaら、2013）、水面上からの粒子群の水中投下問題については、計算の不安定をもたらす激しい水面変動の取り扱いの困難さから、十分な検討がされていない。この問題について、著者らはMPS法（Koshizuka・Oka, 1996）による高解像度型三次元固液混相流モデルを用いて、水面変動を含む粒子群水中沈降過程の検討を実施したが（鶴田ら、2012）、数値安定性の向上には斥力型の相互作用をベースとする高精度粒子法を用いており、負圧を含む実際の渦構造を忠実に再現しきれなかった。標準型MPS法を含む、従来の斥力型の計算安定化スキームは、引力の作用を表現できないことに加え、圧力分布に依存した人工的補正項が導入されることから、不連続面近傍などの圧力分布が局所的に急変する領域において補正値が不適切に算出され、粒子の非物理的な挙動をもたらすことがある。この問題を解決するには、精度の高い安定化スキームの開発が必須である。

本研究では、負圧を含む包括的な計算に有効な高精度粒子法（Khayyer・Gotoh, 2011）をベースに、計算安定性を向上させた新スキーム（Dynamic Stabilization: DS,

Tsurutaら、2013）を導入することで、混相流場を安定かつ精度よく解くためのDEM-MPS法の枠組みを提案する。また、固相粒子の水中沈降・堆積過程を対象に数値シミュレーションを実施し、既往のモデルによるシミュレーション結果との比較を通してモデルの再現性を検討する。

2. 数値シミュレーションモデル

本研究では、既往の高精度DEM-MPS法に、Khayyer・Gotoh（2011）による非圧縮条件満足のための補正スキーム（MPS-ECS）と負圧場の計算に有効な圧力勾配モデル（GC）、さらにTsurutaら（2013）の計算安定化スキーム（DS）を導入して固液混相モデル（DEM-MPS-HS-HL-ECS-GC-DS法）を新たに構成した。

(1) 固液混相流モデル（DEM-MPS法）

DEMとMPS法の連成手法について、本研究では以下の二つのモデルを採用する。

A. 物理量投影型DEM-MPS法（後藤ら、2012）

異なる離散化空間（DEM）で解かれる固相要素の各物理量を、MPS離散化空間へ投影することで混相粒子が作成され、固相間の衝突を表現しつつ、高解像度に流れ場が解かれる（図-1参照）。

図-1 物理量投影型DEM-MPS法における混相粒子の概要図

1 学生会員	修(工)	京都大学大学院工学研究科博士後期課程・日本学術振興会特別研究員DC
2 正会員	博(工)	京都大学准教授 工学研究科社会基盤工学専攻
3 正会員	博(工)	京都大学教授 工学研究科社会基盤工学専攻

B. 二流体型DEM-MPS法（後藤ら，2003）

DEMから算出される固相・固相間相互作用力を流体の運動方程式に導入することで、粒子流としての流れ場が解かれる。

(2) 計算安定化スキーム

はじめに、従来の斥力型の相互作用に基づく圧力勾配モデルを概観し、その問題点を示す。

Koshizukaら（1998）は、粒子間の作用力が常に斥力となるように、以下の式で勾配モデルを構成した。

$$\langle \nabla p \rangle_i = \frac{D_s}{n_0} \sum_{j \neq i} \frac{p_j - \hat{p}_i}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|^2} (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i) w(|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|) \quad \dots (1)$$

ここに、 p ：圧力、 $\hat{p}_i$ ：粒子 i の近傍粒子における圧力最小値、 D_s ：空間次元数、 $\mathbf{r}$ ：座標ベクトル、 $w(r)$ ：重み関数、 n_0 ：基準粒子数密度で、下付き添字 i と j はそれぞれ計算粒子とその近傍粒子を表す。

一方、高精度粒子法の一つであるCMPS法（Khayyer・Gotoh, 2008）では、粒子間相互作用力がanti-symmetricとなるように式（1）に改良が施されている。

$$\langle \nabla p \rangle_i = \frac{D_s}{n_0} \sum_{j \neq i} \frac{(p_i + p_j) - (\hat{p}_i + \hat{p}_j)}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|^2} (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i) w(|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|) \quad \dots (2)$$

式（1）、（2）は、以下のように整理される。

$$\langle \nabla p \rangle_i = \frac{D_s}{n_0} \sum_{j \neq i} \frac{(p_j - p_i)}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|^2} (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i) w(|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|) + \frac{D_s}{n_0} \sum_{j \neq i} \frac{(p_i - \hat{p}_i)}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|^2} (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i) w(|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|) \quad \dots (3)$$

$$\langle \nabla p \rangle_i = \frac{D_s}{n_0} \sum_{j \neq i} \frac{(p_j - p_i)}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|^2} (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i) w(|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|) + \frac{D_s}{n_0} \sum_{j \neq i} \frac{(p_i - \hat{p}_i) + (p_i - \hat{p}_j)}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|^2} (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i) w(|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|) \quad \dots (4)$$

式（3）、（4）の右辺第一項は運動方程式に適合した圧力勾配の表記であることから、余剰項となる右辺第二項は数値安定性のための人工的補正項とみなすことができる。ここで、式（3）、（4）の各項分子の圧力差の部分に着目すると、

$$|(p_i - \hat{p}_i) + (p_i - \hat{p}_j)| \geq \begin{cases} |p_i - \hat{p}_i| \\ \text{or} \\ |p_i - \hat{p}_j| \end{cases} \geq |p_j - p_i| \quad \dots (5)$$

となり、式（3）、（4）の各補正項（第二項）が本来の圧力勾配項（第一項）を上回り、圧力勾配モデルにおいて支配的となることが分かる。こうした過剰な補正項は、計算粒子の非物理的な挙動を誘起し得る。

この問題への対応として、著者らは数値安定性のため

の補正項を過不足なく評価するためのDynamic Stabilizerを考案した（Tsurutaら，2013）。圧力勾配項および補正項 $\mathbf{F}_{ij}^{DS}$ は以下のように記述される。

$$\langle \nabla p \rangle_i = \frac{D_s}{n_0} \sum_{j \neq i} \frac{(p_j - p_i)}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|^2} (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i) w(|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|) + \frac{1}{n_0} \sum_{j \neq i} \mathbf{F}_{ij}^{DS} w(|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|) \quad \dots (6)$$

$$\begin{cases} \mathbf{F}_{ij}^{DS} = 0 & \text{if } |\mathbf{r}_{ji}^*| \geq d_{ji} \\ \mathbf{F}_{ij}^{DS} = -\rho_i \Pi_{ij} \mathbf{e}_{ji,\parallel} & \text{if } |\mathbf{r}_{ji}^*| < d_{ji} \end{cases} \quad \dots (7)$$

$$d_{ij} = \alpha_{DS} \frac{d_i + d_j}{2}, \quad \Pi_{ij} > 0 \quad \dots (8)$$

$$\Pi_{ij} = \frac{\rho_j}{\Delta t^2 (\rho_i + \rho_j)} \left(\sqrt{d_{ji}^2 - |\mathbf{r}_{ji,\perp}^*|^2} - |\mathbf{r}_{ji,\parallel}^*| \right) \quad \dots (9)$$

ここに、 $\mathbf{F}_{ij}^{DS}$ ：粒子 j から i へ作用する人工的な斥力ベクトル、 ρ ：密度、 Π_{ij} ： $\mathbf{F}_{ij}^{DS}$ のスカラ値、 $\mathbf{r}_{ji} = \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i$ 、 $\mathbf{e}_{ji,\parallel}$ ： $\mathbf{r}_{ji}$ の単位ベクトル、 d ：粒子径、 α_{DS} ：DSの有効半径を決定するパラメータ（＝0.9）で、上付き添字*は本来の圧力勾配による粒子の速度および座標の更新後の物理量を表す。 $\mathbf{r}_{ji}^*$ の平行ベクトル $\mathbf{r}_{ji,\parallel}^*$ および垂直ベクトル $\mathbf{r}_{ji,\perp}^*$ は、

$$\begin{cases} \mathbf{r}_{ji,\parallel}^* = \mathbf{r}_{ji} + \frac{\Delta \mathbf{r}_{ji}^* \cdot \mathbf{r}_{ji}}{|\mathbf{r}_{ji}|} \mathbf{e}_{ji,\parallel} \\ \mathbf{r}_{ji,\perp}^* = \frac{|\Delta \mathbf{r}_{ji}^* \times \mathbf{r}_{ji}|}{|\mathbf{r}_{ji}|} \mathbf{e}_{ji,\perp} \end{cases}; \quad \Delta \mathbf{r}_{ji}^* = - \left(\frac{\langle \nabla p \rangle_j}{\rho_j} - \frac{\langle \nabla p \rangle_i}{\rho_i} \right) \Delta t^2 \quad \dots (10)$$

で表される。ここに、 $\mathbf{e}_{ji,\perp}$ ： $\mathbf{r}_{ji,\perp}$ の単位ベクトルである。

本スキームでは、図-2に示すように、DSの有効半径内で重複する粒子に対して、互いに粒子が隣接する形で距離を保つよう、逆向き等大の斥力が粒子間に作用する。

3. 計算モデルの検討

(1) DKT（Drafting, Kissing and Tumbling）現象

従来の斥力型のDEM-CMPS-HS-HL-ECS法と本研究で

図-2 Dynamic Stabilizationの概念図

図-3 DKT現象の数値シミュレーション結果の固相粒子のsnapshotおよび流速ベクトル図

開発したDEM-MPS-HS-HL-ECS-GC-DS法を用いて、DKT現象を対象に数値シミュレーションを実施し、計算安定性のための補正項が計算場に与える影響を検討した。なお、DEMとMPSの連成には物理量投影型DEM-MPS法を採用した。0.3×0.1mの水槽を作成し、静水中に配置された密度 $\rho_s = 2,650\text{kg/m}^3$ の固相粒子A、Bを静かに沈降させ、DKT現象を追跡する。初期配置はそれぞれ粒子A：(0.075, 0.264m)、粒子B：(0.075, 0.240m)で、固相粒子径 $d_s = 0.02\text{m}$ 、液相粒子径 $d_l = 0.0025\text{m}$ と設定した。

図-3に各数値シミュレーション結果の、(A)固相粒子の沈降過程のsnapshotと、(B)固相粒子の沈降過程終了時($t = 1.0\text{s}$)における流速ベクトルを示す。snapshotを見ると、DEM-CMPS-HS-HL-ECS法は $t = 0.4\text{s}$ 以降、固相粒子の運動が急激に不活発となり、粒子が完全には沈降せず、水中に停滞する(粒子B)。また、沈降過程終了後の流速ベクトル図からは、流速に非物理的なノイズが多く含まれることが分かる。一方、DEM-MPS-HS-HL-ECS-GC-DS法では、粒子の停滞や流速のノイズ等の非物理的な挙動は確認されない。

図-4に粒子Bの移動速度の時系列を示す。DEM-MPS-HS-HL-ECS-GC-DS法では、Drafting過程($t < 0.3\text{s}$)において鉛直方向速度の擾乱が比較的小さく、粒子移動速度についても導入した高精度粒子法がノイズ成分の抑制に効果的に働いていることが示唆される。

図-5に固相構成粒子に作用する計算安定性のための補正項と運動方程式に適合した圧力勾配項との比率の時系列を示す。DEM-CMPS-HS-HL-ECS法では、補正項が過剰となって圧力勾配項において支配的となっており、実際の運動方程式と乖離した状況が計算されていることを示唆している。一方、DEM-MPS-HS-HL-ECS-GC-DS法

図-4 固相粒子Bの移動速度の時系列

図-5 固相構成粒子に作用する補正値の寄与率

では、補正項は十分に小さく、運動方程式により忠実な計算が進められていることが分かる。

(2) 水面上からの多数粒子群の水中投下問題

より実務的な側面からモデルの適用性を検討するため、バージ船底からの捨石投下の基本モデルとしての多数粒子群の沈降・堆積過程を対象に数値シミュレーションを実施した。前節同様、物理量投影型のDEM-MPS連成手法をベースに、DEM-CMPS-HS-HL-ECS法(以下、sim.B)とDEM-MPS-HS-HL-ECS-GC-DS法(以下、sim.C)の二つのモデルを用いた。なお、ここで用いた固相粒子

図-6 水面上からの粒子群投下問題の (A) 計算条件と, (B), (C) 各数値シミュレーション結果の粒子配列および流速ベクトル

は粒径 $d_s = 0.01$ m, 密度 $\rho_s = 2,650$ kg/cm³, 液相粒子は粒径 $d_l = 0.0025$ m で密度 $\rho_l = 1,000$ kg/cm³ であり, ホッパー上には固相粒子および, その構成粒子である液相粒子を図-6 (A) のように配置した。

図-6 に, 多数粒子沈降・堆積過程の (A) 計算条件の概要と, (B) sim.B と, (C) sim.C によるシミュレーション結果の粒子配列および流速ベクトル図を示す。 $t = 0.4$ s では, sim.B で見られる流速ベクトルのノイズが sim.C において効果的に抑制されている。また, sim.C は $t = 0.5$ s において投下粒子群の先頭部が水槽壁面方向へと向きを変えて広がる様子が見られるが, これは一般的に水理実験で観察される粒子群の挙動と一致している。 $t = 2.0$ s では, sim.B で多数の粒子が沈降せず, 水中に停滞しているのに対し, sim.C では粒子群が底面上に沈降・堆積し, Sim.B の問題点が改善されている。圧力値が局所的に増大する壁面近傍や, 粒子数密度が十分でない水表面近傍における固相粒子の非物理的な挙動は MPS の検討課題の一つであり, 本シミュレーション結果からは, この問題の解決が期待される。

(3) 粒子群の水中沈降・堆積過程

前述した従来の安定化スキームが含む検討課題が, DEM-MPS 間の連成手法に依存しない汎用的な問題であることを示すため, DEM-MPS 連成の基本モデルとして広く用いられる後藤ら (2003) の二流体型 DEM-MPS 法を用いて, 粒子群の水中沈降・堆積過程を対象に数値シミュレーションを実施した。図-7 (A) に示される通り,

0.25×0.13 m の水槽に水位 0.12 m で満たされた静水中より, 水槽中央部を挟んで左右両側に配置された $\rho_l = 2,650$ kg/m³ の液相粒子群 L と $\rho_s = 2,650$ kg/m³ の固相粒子群 S の水中沈降・堆積過程を追跡する。用いたシミュレーションモデルは, 前節同様, DEM-CMPS-HS-HL-ECS 法 (以下, sim.B) と DEM-MPS-HS-HL-ECS-GC-DS 法 (以下, sim.C) である。計算粒子径は $d = 0.0025$ m と設定した。

図-7 (B), (C) に, 代表的な時間における各数値シミュレーション結果のスナップショットを示す。物理量投影型 DEM-MPS 法と同様, sim.B では流速ノイズの顕在化と沈降粒子群非物理的な停滞が示されるのに対し, sim.C では, 流速と沈降粒子群挙動ともに改善が見られる。

図-8 に, 各沈降粒子群に作用する計算安定性のための補正項と運動方程式に適合した圧力勾配項との比率の時系列を示す。本シミュレーションにおいても, sim.B では補正項が本来の圧力勾配項を上回っており, 運動方程式と乖離した計算が進められていることが理解できる。また, DEM の計算プロセスを含む固相粒子群 S は液相粒子群 L と比較して補正項の勾配モデルにおける支配率が高く, DEM 導入によって, この問題が顕在化していることが確認できる。

以上, 二流体型 DEM-MPS 法においても, 従来の高精度 DEM-MPS の問題点と本研究で開発したシミュレーションモデルの有効性が示された。

図-7 粒子群の水中沈降・堆積過程の (A) 計算条件と, (B, C) 各数値シミュレーション結果の粒子配列および流速ベクトル

4. 結言

本研究では, MPS法における従来の計算安定化スキームが含む問題点を示すとともに, その改善案として, より精度の高いDynamic Stabilizer (MPS-DS)を導入することで, 負圧を含む包括的な計算を安定的に解く高精度DEM-MPS法の枠組みを構築した。また, 構築したモデルの妥当性を検証するため, DKT現象, 水面上からの粒子群の水中投下問題, 粒子群の静水中沈降・堆積過程の3つを対象に, 構築したモデルを用いて数値シミュレーションを実施し, 物理量投影型DEM-MPS法と二流体型DEM-MPS法二つの連成手法から, モデルの汎用的な有効性を示した。数値シミュレーションモデルの精度・安定性の大幅な向上により, 粒子群の水中投下問題への計算力学的アプローチの礎が築けたと言える。今後, 計算コードを3次元へ拡張し, 複雑な水面変動を含む粒子群の沈降・堆積過程の運動機構を計算力学的観点から検討したい。

謝辞: 本研究の一部は, 日本学術振興会特別研究員奨励費(課題番号: 24-4720, 研究代表者: 鶴田修己)による成果であり, ここに謝意を表する。

参考文献

- 重松孝昌・廣瀬真由・錦織陽一・小田一紀 (2001): DEM法とVOF法を併用した三次元固液混相流解析モデルの開発とその適用例, 海岸工学論文集, 第48巻, pp.6-10.
 後藤仁志・林 稔・安藤 怜・酒井哲郎 (2003): 固液混相流解析のためのDEM-MPS法の構築, 水工学論文集, 第47巻, pp.547-552.

図-8 各粒子群に作用する補正値の寄与率

- 後藤仁志・鶴田修己・原田英治・五十里洋行・久保田博貴 (2012): 固液混相流解析のためのDEM-MPS連成手法の提案, 土木論文集B2 (海岸工学), Vol. 68, No.2, pp.21-25.
 鶴田修己・後藤仁志・五十里洋行・原田英治 (2012): 高精度3D-DEM-MPSによる多数粒子群非定常沈降過程の計算力学的検討, 土木学会論文集B2 (海岸工学), Vol.68, No.2, pp.851-855.
 Harada, E., Tsuruta, N. & Gotoh, H. (2013): Two-phase flow LES of the sedimentation process of a particle cloud, *Journal of Hydraulic Research* (online).
 Koshizuka, S. and Oka, Y. (1996): Moving particle semi-implicit method for fragmentation of incompressible fluid, *Nuclear Science and Engineering*, 123, pp.421-434.
 Koshizuka, S., Nobe, A. and Oka, Y. (1998): Numerical Analysis of Breaking Waves Using the Moving Particle Semi-implicit Method, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, vol.26, pp.751-769.
 Khayyer, A. & Gotoh, H. (2008): Development of CMPS method for accurate water-surface tracking in breaking waves, *Coast. Eng. J.*, 50(2), 179-207.
 Khayyer, A. & Gotoh, H. (2012): A 3D higher order Laplacian model for enhancement and stabilization of pressure calculation in 3D MPS-based simulations, *Applied Ocean Res.*, Vol. 37, pp.120-126.
 Tsuruta, N., Khayyer, A. and Gotoh, H. (2013): A short Note on Dynamic Stabilization of Moving Particle Semi-implicit Method, *Computers & Fluids*, Vol. 82, pp.158-164.