

格子ボルツマン法と有限体積法のマルチグリッド法による 非圧縮性流れの定常計算の高速化

永野勝尋ⁱ

Acceleration of Steady State Calculation of Incompressible Flow by Multigrid Method of Lattice Boltzmann Method and Finite Volume Method

Katsuhiro NAGANO

格子ボルツマン法はアルゴリズムがシンプルで並列計算に向いていることから流体解析の多くの場面で用いられるようになってきた。定常解を求める場合、有限体積法にマルチグリッド法を適用した例は航空分野を中心に数多くあるが格子ボルツマン法に適用した例は少ない。本稿では非圧縮性流れの定常計算に格子ボルツマン法と有限体積法のマルチグリッド法を適用し両者の計算時間の比較を行った。

(キーワード):格子ボルツマン法, 有限体積法, マルチグリッド法, 非圧縮性流れ, 定常計算, 陽解法

1 はじめに

数値流体力学(CFD)はものづくりや防災, 環境問題など多様な分野で広く利用され, 研究開発や施策の検討などに不可欠のツールになっている。これまで CFD は Navier-Stokes 方程式を有限体積法(FVM)や有限要素法(FEM)などで離散化して解く巨視的な立場の計算法が大半であったが, 近年は流体の挙動を仮想粒子の並進と衝突でモデル化する微視的な立場の計算法である格子ボルツマン法(LBM)も利用されるようになってきた。LBM はアルゴリズムがシンプルで並列性が高く GPU でも高い性能が得られており, 大規模解析に向いている¹⁾。

CFD において定常解を高速に計算するニーズは今でもあり FVM ではマルチグリッド法による高速化の試みが古くからおこなわれている²⁾。圧縮性流れでは主に陽解法と組み合わせられ³⁾, 非圧縮性流れでは陰解法と組み合わせられてきた⁴⁾。非圧縮性流れでは圧力を陰的に解く処理の計算負荷が大きく, これを避けるために疑似圧縮性を導入して陽解法で解く方法も試みられている⁵⁾。今回は, この方法にマルチグリッド法を適用した。一方, LBM でもマルチグリッド法による定常計算の高速化の例が報告されている^{6),7),8)}。

本稿では非圧縮性流れの代表的なベンチマーク問題である正方キャビティフローを例に LBM と FVM のマルチグリッド法を適用し, 定常計算の計算時間を比較した。

2 格子ボルツマン法

2.1 シングルグリッド

LBM の粒子速度として図 1 に示す 9 速度の D2Q9 モデルを用いた。LBM では粒子分布関数 f_i の時間発展が次の式で計算される。

$$\begin{aligned} f_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i(\mathbf{x}, t) \\ = -\frac{1}{\tau} [f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)] \end{aligned} \quad (1)$$

ここで, \mathbf{x} は粒子の位置, t は時刻, \mathbf{e}_i は粒子速度, τ は単一緩和時間係数である。 f_i^{eq} は局所平衡分布関数であり, 平衡状態の粒子分布を表している。

$$f_i^{eq}(\mathbf{x}, t) = \omega_i \rho \left[1 + \frac{3\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u}}{c^2} + \frac{9(\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u})^2}{2c^4} - \frac{3\mathbf{u}^2}{2c^2} \right] \quad (2)$$

ω_i は図1の速度成分ごとに次のように与えられる。

ⁱ サイエンスソリューション部 社会インフラチーム 主席コンサルタント

$$\omega_i = \begin{cases} 4/9 & (i = 0) \\ 1/9 & (i = 1 \sim 4) \\ 1/36 & (i = 5 \sim 8) \end{cases} \quad (3)$$

c は粒子の移流速度で

$$c = \frac{\Delta x}{\Delta t} \quad (4)$$

であり、 τ と格子幅 Δx 、動粘性係数 ν の間に次の関係がある。

$$\tau = \frac{1}{2} + \frac{3\nu}{c\Delta x} \quad (5)$$

巨視的な物理量である密度 ρ 、運動量 $\rho\mathbf{u}$ は分布関数を用いて

$$\rho = \sum_i f_i \quad (6)$$

$$\rho\mathbf{u} = \sum_i f_i \mathbf{e}_i \quad (7)$$

から求められる。圧力 p は次の等温の状態方程式から求める。

$$p = \rho c_s^2 \quad (8)$$

ただし、 c_s は音速で、粒子の移流速度と次の関係がある。

$$c_s = \frac{c}{\sqrt{3}} \quad (9)$$

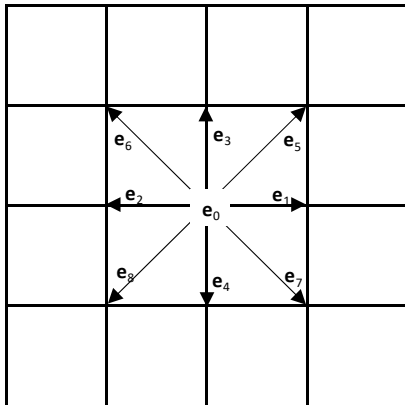
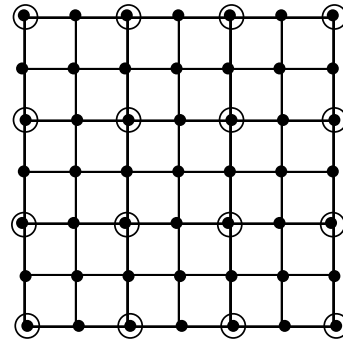


図1 D2Q9 モデルの分布関数

2.2 マルチグリッド法

解きたい格子を密格子、密格子を粗視化した格子をレベル1の粗格子と呼ぶことにする。レベル1の粗格子をさらに粗視化したものをレベル2の粗格子と呼び、以下、粗視化するたびに粗格子のレベルを示す数字が増えていくものとする。この粗視化は図2に示すように、黒丸の密格子の計算点に対し一つ飛びに中空の大きな丸である粗格子の計算点を設定す

るという単純な方法で行う。後で述べるFVMの粗格子とは異なりLBMでは密格子と粗格子の計算点は同じ位置を占める。



(黒丸が密格子、中空丸が粗格子の計算点)

図2 LBMの密格子と粗格子の計算点の対応

マルチグリッド法は密格子と粗格子の2種類の格子から構成される2グリッド法を再帰的に適用する手法であり、まず2グリッド法について述べる。2グリッド法は次の1)~5)に示す手順で計算する。

- 1) 密格子に緩和法を適用し、密格子の近似解と残差を計算する。

緩和法には減速Jacobi法を使用する。更新前の分布関数を f_i^n 、(1)式により更新した分布関数を f_i^* 、緩和後の分布関数を f_i^{n+1} とし、次の(10)式によって分布関数を不足緩和する。 γ は緩和係数で $0 < \gamma < 1$ である。

$$f_i^{n+1}(\mathbf{x}) = \gamma f_i^*(\mathbf{x}) + (1 - \gamma) f_i^n(\mathbf{x}) \quad (10)$$

- 2) 密格子の近似解と残差を粗格子に補間する。

粗格子の分布関数は同じ位置の密格子の分布関数の値をそのまま引き継ぐ(0次補間)。これが粗格子の緩和計算の初期値になる。残差の補間には自身を含む近傍の9点の残差に対する重み付き線形補間を適用する。補間の重みは(3)式の値を用いる。ここで、残差とは(1)式で更新した分布関数を用いて再度分布関数を計算したときの分布関数の変化量のことである。定常計算では当然だが残差は0になる。密格子から粗格子への補間は制限補間と呼ばれる。

- 3) 粗格子に緩和法を適用し、粗格子の近似解と解の修正量を求める。

粗格子の緩和計算も密格子と同様に行う。ただし、減速 Jacobi 法の不足緩和において(11)式に示すように D 項を付加する。

$$f_{iH}^{n+1}(\mathbf{x}) = \gamma[f_{iH}^*(\mathbf{x}) + D_{iH}] + (1 - \gamma)f_{iH}^n(\mathbf{x}) \quad (11)$$

D 項の具体的な式の形は次のようになる。

$$D_{iH} = R_i(I_h^H f_{iH}^{n+1}(\mathbf{x})) - 2I_h^H R_i(f_{iH}^{n+1}(\mathbf{x})) \quad (12)$$

ここで、添え字 h, H は密格子と粗格子を区別するためのもので、 h は密格子、 H は粗格子を示す。 I_h^H は密格子 h から粗格子 H への補間演算子である。また、 R は残差を計算する関数である。(12)式の右辺第 1 項は密格子の分布関数を粗格子に制限補間し粗格子上の残差を求めることを表し、右辺第 2 項は密格子で求めた残差を粗格子に制限補間することを表している。 D 項には二つの役割があり、一つは密格子の残差を粗格子に移して緩和することで密格子の残差を解消すること、もう一つは 2 グリッド法における密格子の解がシングルグリッドの解と一致することを保証することである。

4) 粗格子の解の修正量を密格子に補間し、密格子の近似解を修正する。

1)で求めた近似解 f に粗格子の緩和計算で得られた解の修正量を加える。

$$f_{iH}^{n+1}(\mathbf{x}) \leftarrow f_{iH}^{n+1}(\mathbf{x}) + I_h^H(f_{iH}^{n+1}(\mathbf{x}) - I_h^H f_{iH}^{n+1}(\mathbf{x})) \quad (13)$$

ただし、 I_h^H は粗格子から密格子への補間演算子である。粗格子から密格子への補間は延長補間と呼ばれ、距離による重み付けを伴う線形補間が適用される。

5) 密格子に緩和法を適用し、密格子の解を更新する。

1)と同様に(1)式と(10)式を用いて分布関数を更新する。

以上が 2 グリッド法の計算手順であるが、これを図化すると図 3 のようになる。

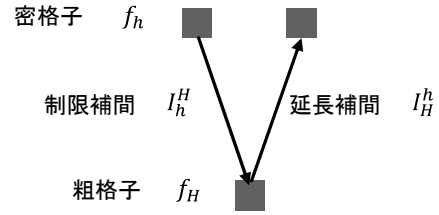


図 3 2 グリッド法の計算手順

2 グリッド法からマルチグリッド法への拡張は次のように行う。2 グリッド法における 3)の処理においてレベル 1 の粗格子の近似解を求めるためにレベル 1 の粗格子とレベル 2 の粗格子から成る 2 グリッド法を適用する。また、レベル 2 の粗格子の近似解を求めるために、レベル 2 の粗格子とレベル 3 の粗格子から成る 2 グリッド法を適用する。このように 2 グリッド法を再帰的に適用すると図 4 の左に示すような V サイクルマルチグリッド法が構築できる。2 グリッド法を二回続けて適用すると図 4 の右に示すような W サイクルマルチグリッド法が構築できる。

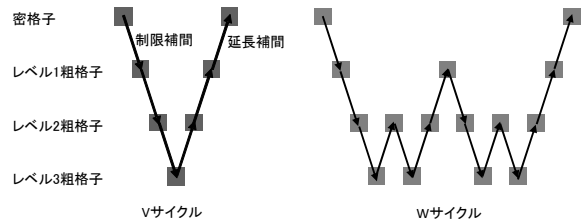


図 4 V サイクルと W サイクルマルチグリッド法

3 有限体積法

3.1 シングルグリッド

疑似圧縮性を導入した次の基礎方程式を解く。音速に実際の値を用いると時間刻み幅 Δt が小さくなりすぎるので、圧縮性の効果が顕在化しない範囲でなるべく小さな値を取る。一般にマッハ数が 0.1 以下程度であれば非圧縮とした場合との差異は小さい。

$$\frac{D\rho}{Dt} = -\rho \nabla \cdot \mathbf{u} \quad (14)$$

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} \quad (15)$$

$$p = c_s^2(\rho - \rho_0) \quad (16)$$

ここで、 $\boldsymbol{\tau}$ は粘性テンソル、 ρ_0 は基準密度である。空間離散化にはスタッガード格子を用い、勾配計算

には対流項も含めて2次精度の中心差分法を用いた。また、(14), (15)式の時間積分には3次精度の TVD Runge-Kutta 法を用いた⁹⁾。(14), (15)式を

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} \rho \\ u \\ v \end{bmatrix} \quad (17)$$

$$\frac{d\mathbf{U}}{dt} = L(\mathbf{U}) \quad (18)$$

のように表したとき、3次精度の TVD Runge-Kutta 法は次の3段階で解を更新する。

$$\mathbf{U}^{(1)} = \mathbf{U}^n + \Delta t L(\mathbf{U}^n) \quad (19)$$

$$\mathbf{U}^{(2)} = \frac{3}{4}\mathbf{U}^n + \frac{1}{4}(\mathbf{U}^{(1)} + \Delta t L(\mathbf{U}^{(1)})) \quad (20)$$

$$\mathbf{U}^{n+1} = \frac{1}{3}\mathbf{U}^n + \frac{2}{3}(\mathbf{U}^{(2)} + \Delta t L(\mathbf{U}^{(2)})) \quad (21)$$

3.2 マルチグリッド法

粗格子にもスタaggerド格子を適用する。図5の細線が密格子の圧力に関するコントロールボリューム(CV)、太実線が粗格子の圧力に関する CV、破線が粗格子の速度成分に関する CV である。圧力に関する制限補間は

$$p_{I,J} = \frac{1}{4}(p_{i,j} + p_{i+1,j} + p_{i,j+1} + p_{i+1,j+1}) \quad (22)$$

とし、x 方向速度成分 u の制限補間は

$$u_{i+1/2,j} = \frac{1}{8}(u_{i+1/2,j} + u_{i+1/2,j+1} + 2u_{i+3/2,j} + 2u_{i+3/2,j+1} + u_{i+5/2,j} + u_{i+5/2,j+1}) \quad (23)$$

とする。ただし、(i,j)は密格子の CV のインデックス、(I,J)は粗格子の CV のインデックスで、両者の位置関係は図5に示すとおりである。延長補間は、圧力に関しては

$$p_{i,j} = \frac{1}{16}(9p_{I,J} + 3p_{I-1,J} + 3p_{I,J-1} + p_{I-1,J-1}) \quad (24)$$

とし、x 方向速度成分 u に関しては

$$u_{i+1/2,j} = \frac{1}{46}(3u_{i+1/2,j+1} + 3u_{i-1/2,j+1} + 15u_{i+1/2,j} + 15u_{i-1/2,j} + 5u_{i+1/2,j-1} + 5u_{i-1/2,j-1}) \quad (25)$$

とする。

緩和計算には3次精度 TVD Runge-Kutta 法を用いるが LBM のように反復計算は行わない。また、粗格子の緩和計算では LBM の D 項と同様に次の強制項を(18)式の右辺に追加する。

$$\mathbf{F}_{iH} = R_i(I_h^H \mathbf{U}_{ih}^{n+1}(\mathbf{x})) - I_h^H R_i(\mathbf{U}_{ih}^{n+1}(\mathbf{x})) \quad (26)$$

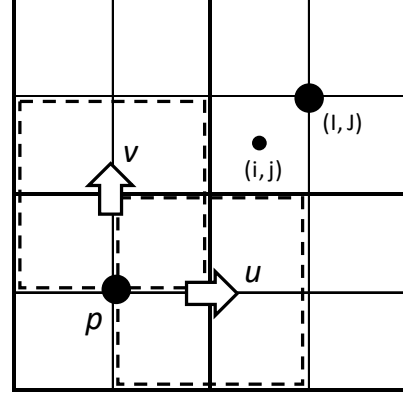


図5 FVMの密格子と粗格子

4 計算例

正方キャビティフローを対象に LBM と FVM のマルチグリッド法の計算時間を比較した。Reynolds 数は 100 で格子数は 512×512 とした。LBM の単一緩和時間係数 τ は 1.0 とし、FVM の音速は LBM と同じ Mach 数である 0.056 になるように決定した。FVM の Courant 数は 0.6 とした。マルチグリッド法の段数は 4 段(密格子と 3 段の粗格子)とし FVM には V サイクルを用いた。LBM は V サイクルでは十分な加速効果が得られなかったため W サイクルを用いた。LBM の減速 Jacobi 法の緩和係数は 0.5 とし、緩和計算の反復回数は格子が細かい順に 4,4,16,16 回とした。定常判定は水平方向の速度成分の相対変化量で行い、次の条件を用いた。

$$\frac{\sqrt{\sum_{i,j}(u_{i,j}^{n+1} - u_{i,j}^n)^2}}{\sqrt{\sum_{i,j}(u_{i,j}^{n+1})^2}} < 1.0 \times 10^{-8} \quad (27)$$

マルチグリッド法の定常解に関し鉛直中央断面における水平方向の速度分布を図6に示す。Ghia らの計算結果¹⁰⁾を併せて示しているが、LBM, FVM の計算結果とよく一致している。なお、Ghia らも定常解の計算にマルチグリッド法を用いているが、Ghia らは渦度・流れ関数法に適用している。

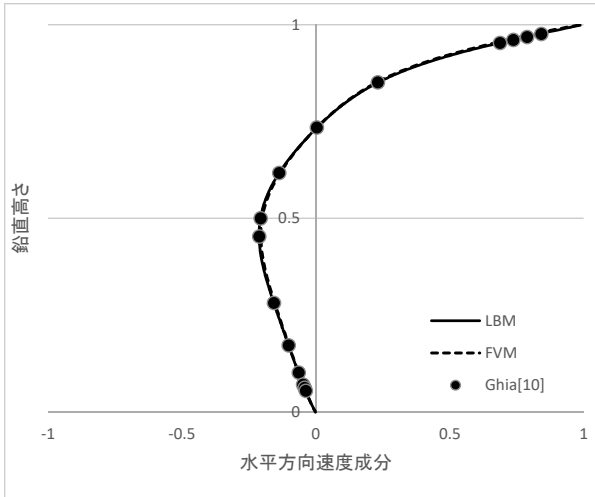


図6 正方キャビティフロー鉛直断面の水平方向速度成分の分布

図7はマルチグリッド法(MG)を用いないシングルグリッド(SG)の計算結果であり、横軸は計算開始からの経過時間(エラプス時間)、縦軸が(27)式の左辺の値である。LBMが1,339秒、FVMが2,238秒で、LBMがFVMに対し約1/1.67倍の計算時間で定常に達しており、シングルグリッドに関してはLBMの方が高速であった。ただし、これは今回の計算条件の中での結論であり、FVMの離散化スキームや時間積分法の選択によっては逆の結論になることも十分考えられる。

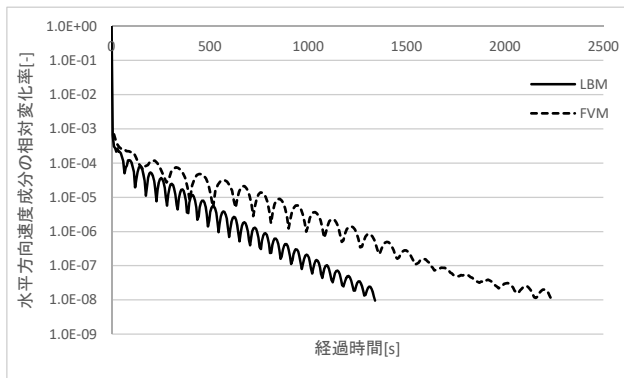


図7 LBMとFVMのSGの計算時間

図8はLBMのSGとMGの計算時間を比較したものである。MGはSGに対し1/3.42倍の計算時間で定常に達しておりマルチグリッド法の効果が見られる。

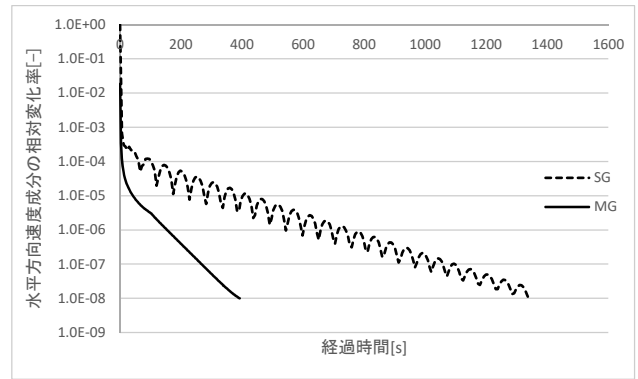


図8 LBMのSGとMGの計算時間

図9はFVMのSGとMGの計算時間を比較したものである。MGはSGに比べ計算時間は1/4.70倍に短縮しており、FVMに関してもマルチグリッド法の効果が見られる。

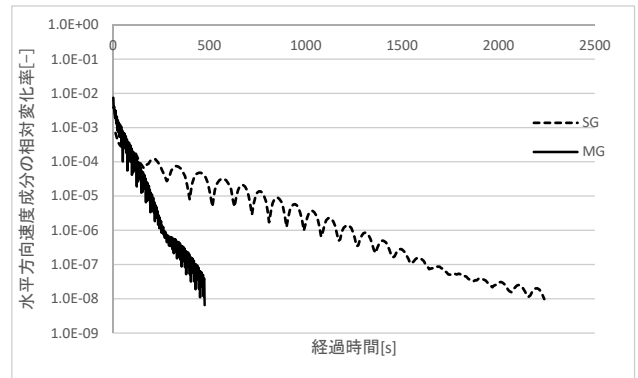


図9 FVMのSGとMGの計算時間

図10はLBMとFVMのMGの計算時間を比較したものである。SGでは1.67倍の差があったが、MGの加速率はFVMの方が高かったため、MGでは両者の差は縮まって1/1.21倍である。また、変化率の傾きもLBMとFVMではほぼ同じであり、同程度の収束特性を示している。

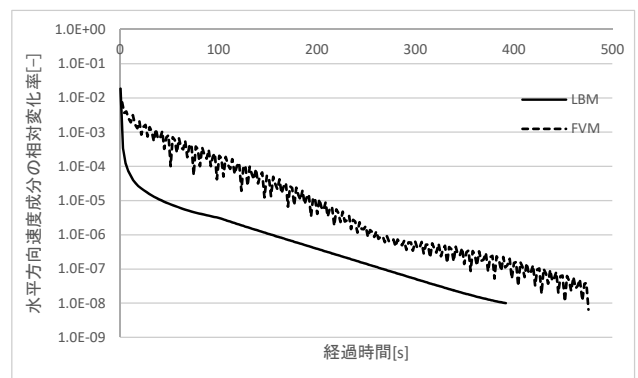


図10 LBMとFVMのMGの計算時間

5 おわりに

LBM と FVM にマルチグリッド法を適用し、正方キャビティフローの定常解の計算時間を比較した。マルチグリッド法を適用しない場合は LBM 対 FVM の計算時間は 1 対 1.7 で LBM の方が高速であった。マルチグリッド法を適用するとシングルグリッドに比べ計算時間は LBM が 1/3.43 倍、FVM が 1/4.70 倍に短縮された。マルチグリッド法を適用した場合の LBM 対 FVM の計算時間は 1 対 1.21 で、シングルグリッドに比べ差は縮まった。シングルグリッドもマルチグリッドも LBM の方が FVM より計算時間は短かったが、マルチグリッドに関してはパラメータの設定次第では逆転してもおかしくない程度の差であり、計算時間の点では優劣は付け難い。なお、今回は 2 次元問題で比較したが、本稿で紹介したマルチグリッド法は LBM, FVM とともに 3 次元問題への拡張が容易であり、かつ 3 次元問題では粗格子のレベルが 1 段上がるごとに計算量は 1/8 になるため 2 次元問題以上にマルチグリッド法の効果が高まることが期待できる。

引用文献

- 1) 小野寺, 青木, 下川辺, 小林: 格子ボルツマン法による 1m 格子を用いた都市部 10km 四方の大規模 LES 気流シミュレーション, 2013 年ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム, (2013) 123-131.
- 2) A. Brandt : A Multilevel Adaptive Solutions of Boundary Value Problems, *Mathematics of Computation*, 31(1977)333-390.
- 3) A. Jameson : Solution of the Euler Equations for Two-dimensional, Transonic Flow by a Multigrid Method, *Applied Mathematics and Computation*, 13(1983)327-356.
- 4) 荒川, ベルンハルト, ウォルフガング: 多重格子法によるナビエ・ストークス方程式の分離解法的高速化, 日本機械学会論文集(B 編)54 巻 498 号 (1988)290-296.
- 5) 大地, 越塚, 酒井: 自由表面流れ解析のための MPS 陽的アルゴリズムの開発, 日本計算工学会論文集, No.20100013(2010).
- 6) D. J. Mavriplis : Multigrid solution of the steady-state lattice Boltzmann equation, *Computers & Fluids*, 35 (2006) 793-804.
- 7) D. V. Patil, K. N. Premnath, S. Banerjee : Multigrid lattice Boltzmann method for accelerated solution of elliptic equations, *J.Comput. Phys.*, 265 (2014) 172-194.
- 8) C. Armstrong, Y. Peng : An MRT Extension to the Multigrid Lattice Boltzmann Method, *Commun. Comput. Phys.*, Vol.26, No.4(2019)1178-1195.
- 9) S.Gottlieb, C. Shu : Total Variation Diminishing Runge-Kutta Schemes, *NASA Contractor Report 201591 ICASE Report No.96-50*(1996).
- 10) U. Ghia, K.N.Ghia and C.T.Shin : High-Re Solutions for Incompressible Flow Using the Navier-Stokes Equations and a Multigrid Method, *J.Comput. Phys.*, 48(1982)387-411.