

格子の質と計算の高精度化と高速化

白山 晋 ((株) ソフテック)

Effect of Grid Quality on the Accuracy and Convergency of Computations

by

Susumu SHIRAYAMA, SofTek Systems Inc.

It is difficult to know a priori whether or not a flow solver works well on a generated grid system. In the study of grid generation, this has become bottle-neck of progress. This paper describes an effect of grid quality on the accuracy and convergency of computations. Firstly, we introduce simple model equations with a characteristic feature of the Navier-Stokes equations. Secondly, we focus on a simple diagnosis for the quality of the grid system. Finally, we propose an adaptive gridding technique as a prescription, in which errors estimated by the simple model equations are regarded as a weighting function.

1. はじめに

格子生成アルゴリズム自身の高速化は従来からの課題であるが、一方で複雑な三次元境界形状をもつ流れ場を解析する場合、格子生成の大部分が境界の形状モデリングに費やされ、空間の格子点分布は半自動的に行われているという事実も見逃してはならない。

そして、その後の計算や可視化作業も、ある程度決められた手順で行われているため、可視化後からの格子形成へのフィードバックという作業が計算の精度を高めるためには必要不可欠となっている。手順が確定しているというものの、この一連の作業の計算負荷は小さいとは言いがたい(特に非定常計算の場合)。

このため、格子の質を前もって判断することが重要となるのだが、格子の質を判断するための基準は、直交性、滑らかさ、集中度合い(最近では格子のアスペクト比が着目されている)とその線形結合が用いられることが多く、結局は見た目という研究者の経験が計算負荷の軽減と計算の高精度化を成しえている。

著者は格子の質と診断法という課題で、いくつかの基本的な方程式を解いて、本計算の前にフィードバックをかけるという方法を従来からの判断基準に加えた[1]。さらに、Grid Visualization という概念を紹介し、その重要性についてふれた。しかしながら、この方法も診断法にとどまり、実際に格子を変更する場合、格子の質は研究者の経験が左右するという状況を解決するまでには至らなかった。本研究では、文献1で提唱した方法の他にも格子の質を判断する評価関数を探るとともに、その評価関数をもとに、モニター量をつくり、最適合格子の手法を用いることで

主観によらない格子の質の向上が可能かどうかを計算の高精度化と高速化を念頭において議論する。また、高速化を考えた場合、解くべき行列の性質と局所的な格子の質を直感的に把握する手段としての Matrix Visualization という考えが重要になることを示す。

2. 格子の質のための評価関数

格子の質は基本的には直交性、滑らかさ、集中度合いで判断されてきた。領域全体の指標で表すと(簡単のため二次元一般座標系とする)、

$$I_o = \int (\nabla \xi \nabla \eta)^2 J^3 dx dy,$$

$$I_s = \int (\nabla \xi)^2 + (\nabla \eta)^2 dx dy,$$

$$I_v = \int w(x, y) J dx dy,$$

ここで、 I_o は直交性、 I_s は滑らかさ、 I_v は集中度、 $w(x, y)$ は重み関数である。すべての条件を満足する格子を得ることはかなり難しいので、通常はこの三つの量の線形結合(例えば、 $I = \alpha I_o + \beta I_s + \gamma I_v$)で格子が評価されるわけである。これにより、格子の質が決定されるように思えるが、実際は全体の量よりも空間分布が重要である。このため、生成された格子を用いた計算まで考慮すると、すべての領域で質の高い格子を実現することは不可能と言わざるをえない。結局のところ、見た目が善し悪しを左右

しているといってもよい。しかしながら、直交性、滑らかさ、集中度合いは基本となる評価関数でありうる。この三つの量に格子セル形状を加えて、直交性、滑らかさ、集中度合い、格子セル形状を格子の質を決める四つの一次量と呼ぶことにする。ここで格子セル形状を独立して扱ったのは、例えば、格子のアスペクト比や、有限要素法の一次要素ならば正三角形に対する近似の度合いで誤差評価が可能な場合が存在するためである。但し、これらの量から直接、格子の質を判断できないことは先述した通りである。

とはいうものの流れ場の解析後は、これらの量を基準にして、格子の質をある程度は明らかにできる（さらに流れの解析後の格子の修正というのは、格子生成からみた解適合格子の概念であると言える）。

しかし、流れを解析する前にある程度格子の性質を把握しておくか、流れの性質を予測して格子を修正しておくことは計算の高精度化と高速化に欠かすことができないだろう。

流れを解析する前にある程度格子の性質を把握しておくことは解析に用いる方法の精度と安定性にも関わっている。特に非一様格子での誤差は不安定性ばかりでなく虚偽の物理現象を導くことが報告されている [2]。計算方法の非一様格子での誤差とその振る舞いを数学的に見積もることは難しいので、何らかの量とその分布を用いて、格子の質との関係を調べていく必要がある。そういった量の中で直接的に一次量の付随するものとしては局所的な CFL 数の予測や数値拡散の大きさの分布がある（主として集中度）。さらに次のような解くべき方程式（この場合は非圧縮性 NS 式）を単純化した方程式を解いてみて判断するという方法がとられる [1]。

$$\frac{\partial u^l}{\partial t} + u^i \cdot \frac{\partial u^l}{\partial x^i} = 0. \quad (1)$$

$$\frac{\partial u^l}{\partial t} = \frac{1}{Re} \cdot \frac{\partial^2 u^l}{\partial x^i \partial x^i}. \quad (2)$$

これは、一次量の解釈と流れの性質を予測することにもつながる。つまり、解析にとって重要となる部分を推論し、重要となりそうな部分に対し四つの一次量またはその空間変動を調べれば、それらの関連性を見つけることができる。さらに処方箋として一次量のいずれかを補正するという方法も考えられるかもしれない。

式 (1) の場合、一定の速度での移流とすると、まず、一様流の捕捉条件が問題となるだろう。この条件は、基底ベクトルの空間の変化に起因した座標変換行列に対する制限である。例えば、 u_0 を定数ベ

クトルとすると、

$$du_0 = dU^i a_i + U^j da_j = 0 \quad (3)$$

である。ここで、 a_i は共変基本ベクトルであり、 a^i を反変基本ベクトルとすると、 U の成分 U^i は $U^i = a^i u_0$ である。また、

$$da_j = \left\{ \begin{matrix} i \\ j & k \end{matrix} \right\} d\xi^k a_i,$$

$$\left\{ \begin{matrix} i \\ j & k \end{matrix} \right\} = \frac{1}{2} g^{il} \left(\frac{\partial g_{lj}}{\partial \xi^k} + \frac{\partial g_{lk}}{\partial \xi^j} - \frac{\partial g_{jk}}{\partial \xi^l} \right). \quad (4)$$

よって

$$\frac{\partial U^i}{\partial \xi^j} + \left\{ \begin{matrix} i \\ j & k \end{matrix} \right\} U^k = 0 \quad (5)$$

が導出される。この場合、計量の空間変化が問題となるので、格子の滑らかさと集中度の補正が必要になる。式 (5) の評価は、ラグランジュ的に移流方程式 (1) を解くことに相当するので、適当な一様流を与え、厳密解と比較すれば、格子を修正すべき箇所がわかる [1]。さらにその差を評価関数として最小問題を考えれば格子が自動的に修正されるだろう。また、一様流が十分捕捉されるとして、適当な移流速度分布を与えて、本計算に使用するスキームで計算すれば、不安定化する部分や数値拡散項の分布が求められるので、それぞれを評価関数として考えれば、それらを緩和する格子点分布に格子を修正することが可能であろう。

式 (2) の場合は 1 成分に着目し物体面にソースをおけば物体面を基準にした距離空間をスカラー量として表すことができる。これを評価関数として格子の集中化を考えれば良い。余談ではあるがこの評価関数は複雑形状の場合の代数的乱流モデルの距離の指標になる可能性を含んでいる。

非圧縮性流れを解析する場合、次のポアソン型の方程式を高速に解く必要が生じる。簡単のため、二次元で示すと

$$\frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 p}{\partial y^2} = f. \quad (6)$$

この方程式を一般曲線座標系（非保存型で変換）で扱うと格子の性質を考える上で重要な量が現れる。

$$g^{11} \frac{\partial^2 p}{\partial \xi^2} + 2g^{12} \frac{\partial^2 p}{\partial \xi \partial \eta} + g^{22} \frac{\partial^2 p}{\partial \eta^2} + \Delta \xi \cdot \frac{\partial p}{\partial \xi} + \Delta \eta \cdot \frac{\partial p}{\partial \eta} = f. \quad (7)$$

(7)式において $\Delta\xi \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial^2\xi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\xi}{\partial y^2}$, $\Delta\eta \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial^2\eta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\eta}{\partial y^2}$ である。また、 $\Delta\xi$, $\Delta\eta$ は、よく知られた楕円型の偏微分方程式系の格子生成法の中に現れる量である。

ここで着目したいのは、ラプラス方程式を用いた格子の平滑化によっても、多くの格子ではこれらの二項が値をもつ領域が残るということである。この項を評価関数として、さらに適合格子の考えを用いて制御することで、質のよい格子が得られることを次節以降示していく。さらに、式(7)を解く場合、この評価関数が高速化に因与することを示す。

3. 適合格子

前節で示した評価関数の最適化問題を考えれば自動的に質のよい格子が生成されそうであるが、すべての評価関数を、例えば最小化するような定式化は難しい(この定式化については別稿で議論する予定である)。少なからず試行を繰り返すこともあるが、これまでの診断法を一步進めて、積極的に格子の質を向上させる方法を考える。この目的のために適合格子の考えを用いる。

モニター量による格子の集中化が適合格子の基本的なアイデアである。通常、モニター量は流れ場を解いて求めるのだが、知識の積み重ねによって前もって予測することもできる。なかでも境界適合格子はそうした方法でもっとも成功した例であろう。ここでは流れ場のモニター量よりも前節で述べた評価関数をもとに適合格子をつくり、格子の質を向上させることを考える。実際に適合格子を生成する場合、様々な方法が用いられるが[3]、本稿では、松野の適合格子生成法[4]を採用した。この方法は、二次元ならば、

$$\Delta\xi = P, \quad \Delta\eta = Q, \quad (8)$$

という偏微分方程式系の格子生成法の利用に帰着する。 P, Q というソース項を局所的に変化させることで、四つの一次量が制御された格子生成が可能となる。一般的には、適合格子の場合、集中化に重きが置かれる場合が多い(例えば、松野の方法では、物理量の変化の大きいところに応じた重み関数をソース項の分布に対応させることで集中化を行っている)。

本稿では、前節で示した評価関数をモニター量として、ソース項を制御する場合と、ソース項自身から格子の性質を判断し、直接、 P, Q を変化させて、格子を再生成する場合の二通りの方法を示す。

以下の節では、ある程度、滑らかさ、直交性、集中度をふまえて生成した図1に示す格子(これを初期

格子と呼ぶ)をもとに、格子の質の判断と質を向上させる方法について考える。

4.1 直接量

一次量から直接的に見積もることができる量として局所的な CFL 数がある。図2は一様流を与えた場合の局所的な CFL 数の分布である。黒い部分が CFL 数が1以下を表している。図2(a)は一様流の迎角(α)が 0° 、時間刻み幅(Δt)が0.01の場合、図2(b)は、 $\alpha = 30^\circ, \Delta t = 0.05$ を示している。実際の計算では、流れは物体に沿って流れ、粘性流では境界層の影響があるために CFL 数の分布は、このようにはならないが、計算の前段階での時間刻み幅の見積りのための格子のチェックには役立つであろう(実際の計算に近づけるために、ポテンシャル流れを用いた CFL 数の分布という方法も考えられる)。格子の質を判断する上で一次量と直接関連するものに格子のアスペクト比がある。格子のアスペクト比によるスキームの安定性、収束への影響については、いくつかの研究報告がある。

4.2 一様流の捕捉性

迎角を持つ一様流を与えて、生成された格子がどの程度(5)式を満たすか調べてみる。図3は迎角が 0° と 30° の場合の誤差を示している(格子は図1のものを用いた)。誤差の分布から格子図を見てみると角の部分の滑らかさに問題があることがわかる。これを定量的に調べるために、 $\Delta\xi, \Delta\eta$ を調べてみよう。先述したように、ラプラス方程式によって格子生成を行ったとしても、 $\Delta\xi, \Delta\eta$ が0であることは稀である。そこで、初期格子に対して

$$\Delta\xi = P_0, \quad \Delta\eta = Q_0, \quad (9)$$

のように、ソース項が分布しているものとする。 P_0, Q_0 は、与えられた格子から直接 $\Delta\xi, \Delta\eta$ を計算すれば求められる。 P_0, Q_0 の分布を見てみよう(図4)。図中、黒く塗られた部分は、絶対値があるしきい値よりも大きい部分である。この図からも角の部分でのソース項が急激に大きくなっていて格子が歪んでいることがわかる。より明確にするために $|\frac{\partial P_0}{\partial \xi}|, |\frac{\partial Q_0}{\partial \eta}|$ を表示してみる(図5)。これにより、格子の質としては問題があることがより明確に示される。そこで、この格子の質を向上させる方法を提案する。 $|\frac{\partial P_0}{\partial \xi}|, |\frac{\partial Q_0}{\partial \eta}|$ に比例して、 P_0, Q_0 を平滑化して、 P, Q を求める。そうして得られた P, Q の分布が図6である。この P, Q を用いて、

(8)式を解くと格子は図7に示すように滑らかなものとなった。修正された格子を用いた計算では角における不要な圧力振動が抑えられ同じ格子点数で精度のよい計算が実現できた。

4.3 拡散方程式の利用

式(2)を利用した格子の改良の一例として、境界適合格子における物体境界近傍での直交性の改善法を提案する。あるスカラー s の二次元の拡散方程式を考える。

$$\frac{\partial s}{\partial t} = \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 s}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 s}{\partial y^2} \right). \quad (10)$$

物体表面で $s = 1$ 、その他の領域で $s = 0$ として、(10)式を解くと図8となる。あるしきい値で領域を分けたのが図8(b)である。一般的に格子の全領域で格子線を直交化させることは困難なので、通常は物体境界で直交性を高め、遠方に行くに従って直交化による歪みを緩和するようにする。このことから、 s 分布の利用の一例としてはしきい値によって分けられたどちらかの領域で直交化を行うという方法が考えられる。また、スカラー値そのものを緩和のための係数として用いてもよい。楕円型の格子生成法を用いる場合は、

$$\Delta \xi = P + \tilde{P}, \quad \Delta \eta = Q + \tilde{Q}, \quad (11a)$$

のように、直交化前のソース項に直交化のためのソース項の変動分を付加すればよい。図9は、スカラー値そのものを緩和のための係数として

$$\Delta \xi = P + s\tilde{P}, \quad \Delta \eta = Q + s\tilde{Q}, \quad (11b)$$

として直交化した例である。

4.4 数値粘性からみた格子の質 1

前節で求めたスカラー s の分布は物体からの距離の指標として用いることができる。格子の質とは直接関連しないが代数的乱流モデルの計算に使えるかもしれない。ここでは物体境界の影響と数値誤差の判断を組み合わせることで格子の質を判断する方法について考える。

近年の数値計算において、4次以上の数値粘性が重要な役割をしているが格子が粗い部分では、物理的な粘性項よりも卓越する場合がある(三次の風上差分の場合、4次の数値粘性と物理粘性の比は大まかに見積ると $\sqrt{J} \cdot Re$ となる)。図10は迎角 0°

の一樣流を与えた場合の物理的な粘性項が4次の数値粘性よりも卓越している部分を示している。一番外側がレイノルズ数1000、物体近傍の黒く塗られた部分が5000の場合である。この格子でレイノルズ数が5000以上の流れを計算する場合、物体の近傍を除いて物理的な粘性項が正しく評価されない可能性がある。しかし、この場合、流れ場の境界層の影響がどの程度まで及んでいるかを合わせて考えないと、やみくもに格子点数を増やすことになり、効率的な計算ができなくなる。前節で求めたスカラー s の分布と数値誤差分布を利用すると効率的に格子点数を増した格子が生成できる。

4.5 数値粘性からみた格子の質 2

粘性流を計算する場合、渦の挙動を正しく捉えるための格子を生成する必要がある。特に、剥離渦を精度よく計算するためには物体近傍に渦と物体の干渉を解像するだけの格子点数が必要となる。計算の前に必要とされる格子点数が分布しているか、大まかに見積もるために Vortex Seeds という概念を導入する。発生から時間の経過した粘性渦を任意の場所において、格子点上で速度場を計算し、その影響範囲を調べる。二次元の場合について、速度の絶対値を表示してみた(図11(a))。渦中心から一番外側の黒く塗られた部分が、無次元速度の絶対値0.01から0.11の部分である。この速度場を用いて、4次の数値粘性と物理粘性の比を求めたのが図11(b)である。黒い部分で物理的な粘性項が4次の数値粘性よりも卓越している。

4.6 ポアソン型方程式の解法の高精度化と高速化

解適合格子の多くが高精度化に重きを置いて、結果として効率のよい計算を実現している。しかし、格子を集中させる場合、高精度化と高速化が相反する場合がある。ここではポアソン方程式を解く場合を例にとって高精度化と高速化の相反について考えてみる。(7)式を離散化すると次の連立一次方程式が得られる。

$$A_p = f. \quad (12)$$

式(7)から予想されることは $\Delta \xi$, $\Delta \eta$ は対角項以外の成分に寄与するため、格子点が滑らかでない部分(集中化によって生じる場合が多い)で、行列の性質が悪くなっている可能性があるということである。まず、 A の成分を a_{ij} として、初期格子に対して、 $\frac{\max_{i,j} |a_{ij}|}{\sum_{j \neq i} |a_{ij}|}$ を示してみる(図12)。黒く塗られた部分が、1か

ら 1.1 部分である。A は対角優越であるが、角の部分に問題があると思われる。さらに行列の性質を調べるには別の量を表示する必要があるが紙面の都合でここでは触れることができない。このような Matrix Visualization も格子の質を判断する上で重要な情報を与える。

補足として、一次元の方程式を用いて少し理論的に解析してみる。

$$\frac{\partial^2 p}{\partial x^2} = f. \quad (13)$$

(13) 式は、座標変換によって、また、 $P = \frac{\partial^2 \xi}{\partial x^2}$ として、

$$\frac{1}{x_\xi^2} \frac{\partial^2 p}{\partial \xi^2} + P \frac{\partial p}{\partial \xi} = f, \quad (14)$$

となる。次に $(x_{i-2}, x_{i-1}, x_i, x_{i+1}, x_{i+2})$ の 5 点の離散空間上で (14) 式を離散化する。 $h = x_\xi, p_{i-2} = p_{i+2} = 0$ とすると、

$$\begin{Bmatrix} -\frac{2}{h^2} & \frac{1}{h^2} - \frac{P}{2} & 0 \\ \frac{1}{h^2} - \frac{P}{2} & -\frac{2}{h^2} & \frac{1}{h^2} + \frac{P}{2} \\ 0 & \frac{1}{h^2} + \frac{P}{2} & -\frac{2}{h^2} \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} p_{i-1} \\ p_i \\ p_{i+1} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} f_{i-1} \\ f_i \\ f_{i+1} \end{Bmatrix}. \quad (15)$$

行列の性質を見る場合、重要な量として条件数がある。これは、最大固有値と最小固有値の比に関係する。式 (15) の固有値は

$$\lambda = -\frac{2}{h^2}, -\frac{2}{h^2} \pm \sqrt{\frac{2}{h^4} + \frac{P^2}{2}},$$

である。 $P = 0$ の場合、すなわち、一様に格子が分布している場合の固有値の分布が最も良い。

結論

格子の質を向上させるためには、より多くの評価関数を見つけることとどこをどのように修正するかというノウハウの集積が本質的である。本研究では 'どのように' の部分で、松野の適合格子生成法 [3] の応用を考えた。偏微分方程式系の方法のため小さな計算機システムでは計算負荷が大きい計算を統合的に考え全体として精度を上げ高速化を考えるとモデリングの部分を除いた格子生成にはもっと時間をかけてもよいように思える。

この研究で得られた知見をまとめると次のようになる。

・格子の質を向上させるには、より多くの評価関数を見つけることが重要である。また、そのためのモデル方程式を探すことも大切である。

- ・格子の制御は楕円型方程式のソース項の修正によるものがアイデアとして容易である。逆にソース項の分布を調べることで格子の性質がわかる。
- ・格子の質の改善のためには解適合の考えが利用できる。楕円型方程式を用いるものが容易ではあるが実際の作業の効率がよいとは言えない。この意味で非構造型格子の検討が必要かもしれない。また、改善の作業において滑らかさと集中化が特に大切となる。
- ・効率のよい計算には解析のフィードバックが必要不可欠である (流体力学の知識が重要である)。
- ・初期格子後の格子生成作業にもっと時間をかけてもよい。
- ・非構造型格子の場合、非構造型格子をもとに部分的に構造型格子を作り本稿で述べたような方法で格子の質を向上させた後、再び、非構造型格子に戻すという方法も考えられる。

参考文献

1. Shirayama, S., "Simple Diagnosis for the Quality of Generated Grid Systems", Proceedings of the 3rd International Conference on Numerical Grid Generation in CFD and Related Fields, June, 1991, pp.547-555.
2. Shirayama, S., "Construction of modified third-order upwind schemes for stretched meshes", AIAA Journal, vol.30, no.5, 1992, pp.1237-1242. (AIAA Paper-91-0727, January, 1991).
3. 例えば、"格子形成法とコンピュータグラフィックス", 東京大学出版会.
4. Matsuno, K. and Dwyer, H. A., "Adaptive Method for Elliptic Grid Generation", J. Comp. Phys., vol.77,1988, p.40.

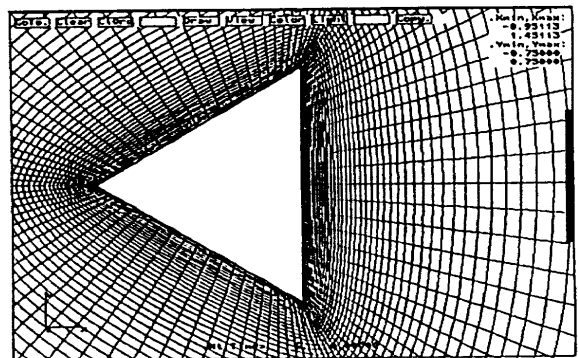


図1 初期格子

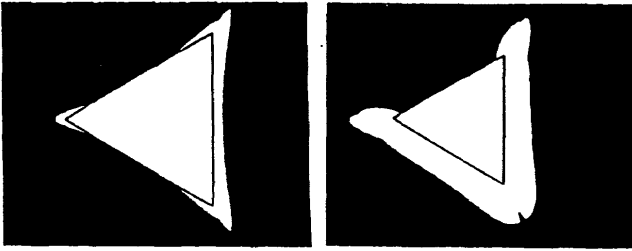


図 2(a) $\alpha = 0^\circ, \Delta t = 0.01$ 図 2(b) $\alpha = 30^\circ, \Delta t = 0.05$

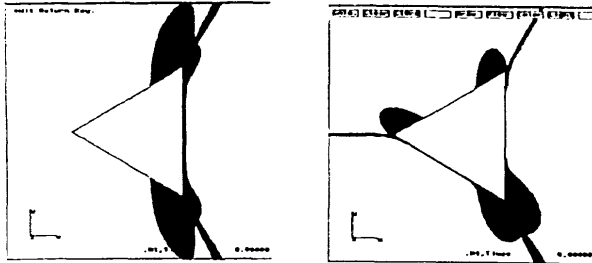


図 3(a) 一様流の捕捉性 ($\alpha = 0^\circ$) 図 3(b) $\alpha = 30^\circ$

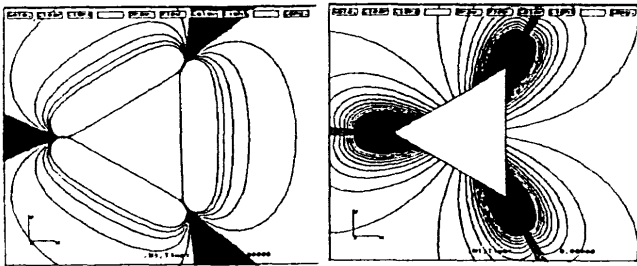


図 4 P_0, Q_0 分布

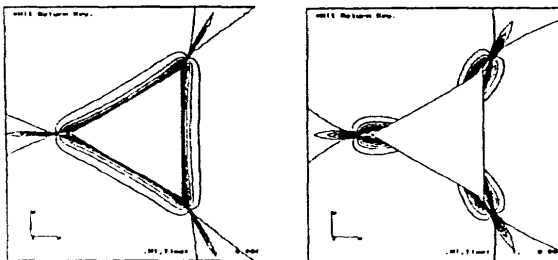


図 5 $|\frac{\partial P}{\partial \xi}|, |\frac{\partial Q}{\partial \eta}|$ 分布

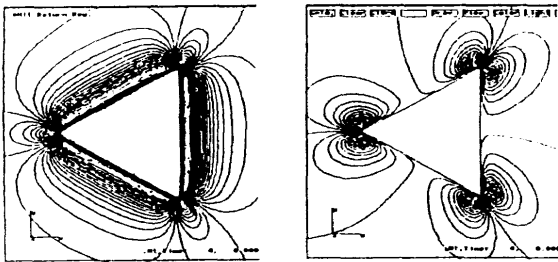


図 6 修正後の P, Q 分布

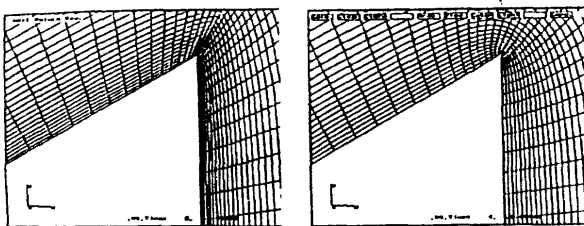


図 7(a) 初期格子

図 7(b) 修正後の格子

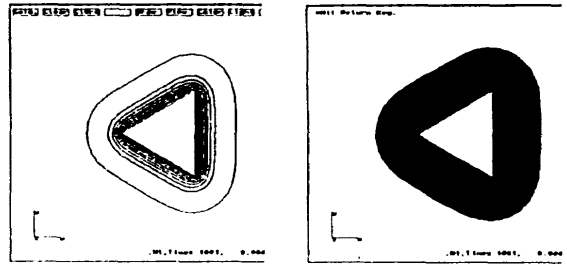


図 8(a) s 分布

図 8(b) しきい値による s 分布

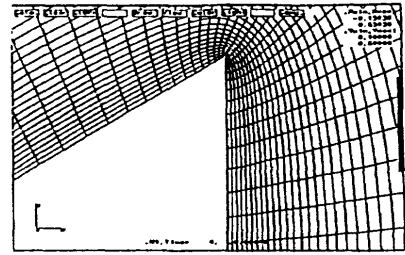


図 9 修正後の格子

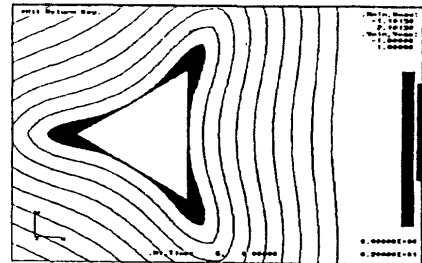


図 10 物理的な粘性項と数値粘性項の比の分布

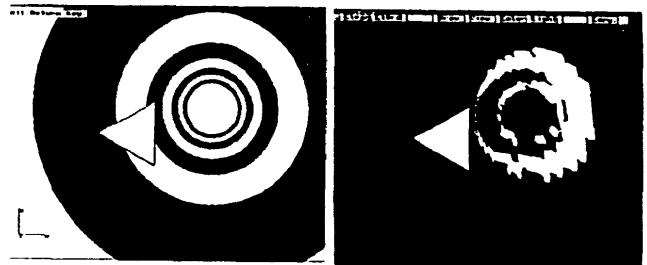


図 11(a) 速度の絶対値の分布 図 11(b) 粘性項の比

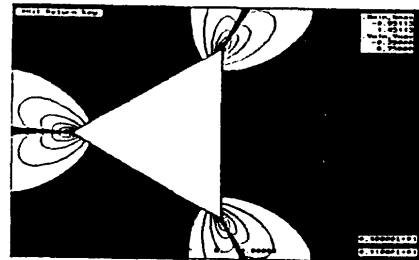


図 12 $\frac{|a_{ij}|}{\sum_{j \neq i} |a_{ij}|}$ 分布