研究室セミナー 2010/6/18

牧野 淳一郎

Center for Computational Astrophysics

今日のお話

今日のお話

あなたも
energy form SPH で
幸せになりませんか？

今日のお話

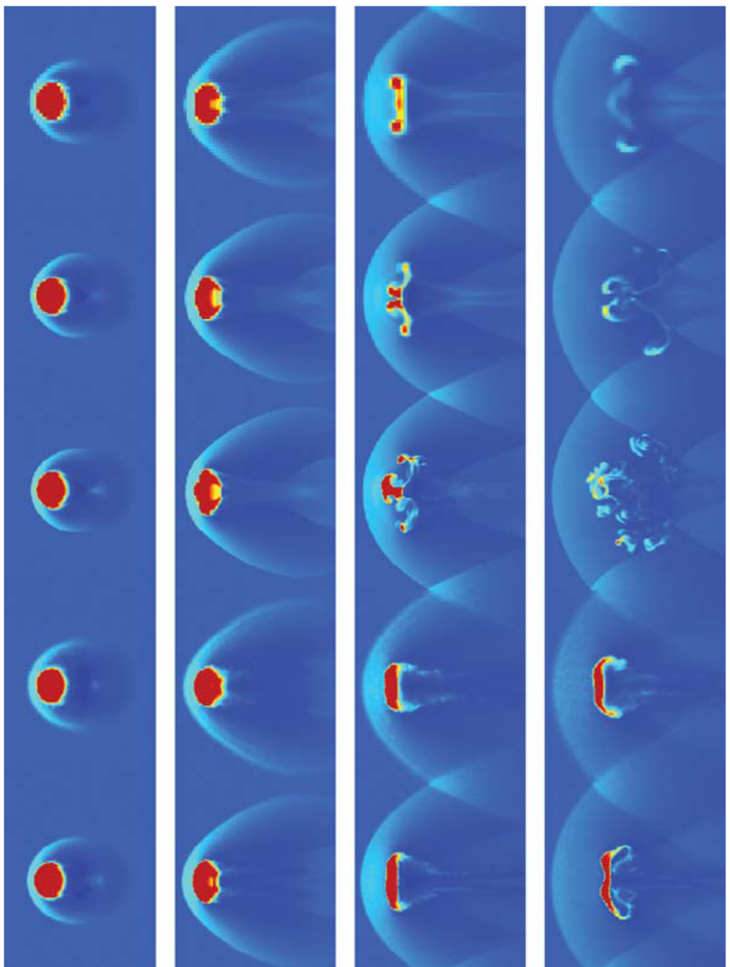
- SPH と接触不連続、KH 不安定
- 何故問題が起こるか？
- これまでに提案されている対応
- 新しい提案
  - 思想
  - 原理
  - 定式化
  - 数値実験
- まとめ

SPH と接触不連続、KH 不安定

Agertz et al (MN 2007, 380, 963)

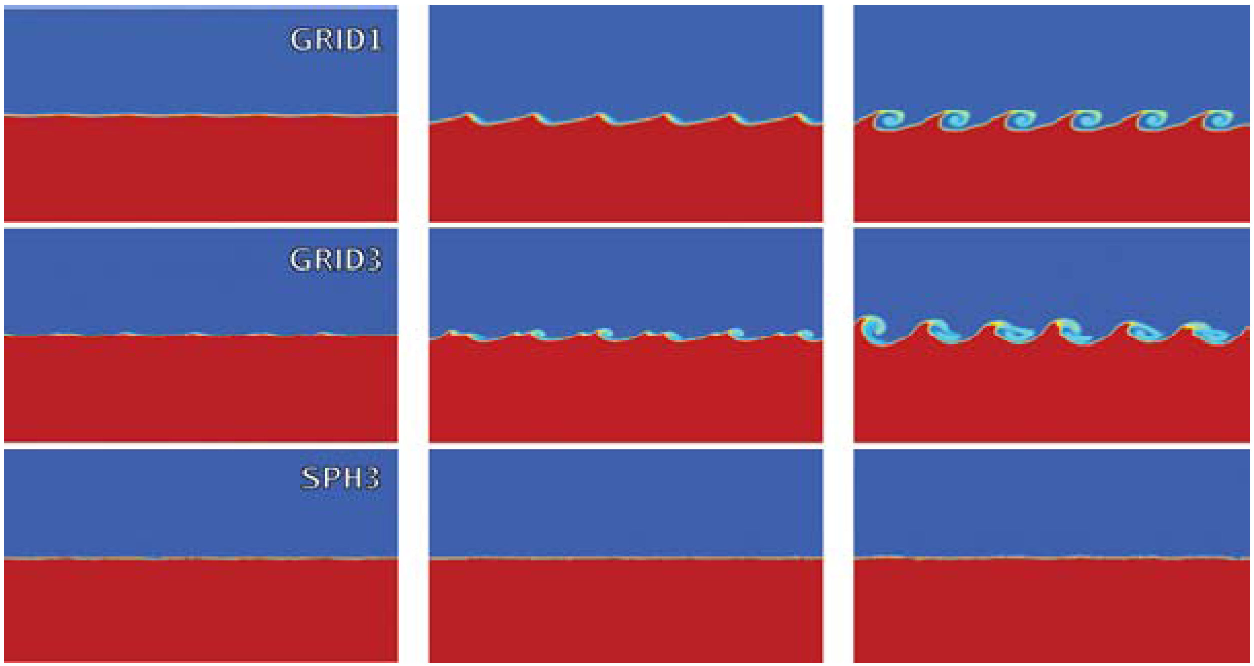
- SPH と Grid コードで、「Brob test」の答が全然違う
- もっと簡単な Kelvin-Helmholtz 不安定 (計算は 3 次元) でも全然違う
- SPH だめじゃん

どれくらい違うか (1)



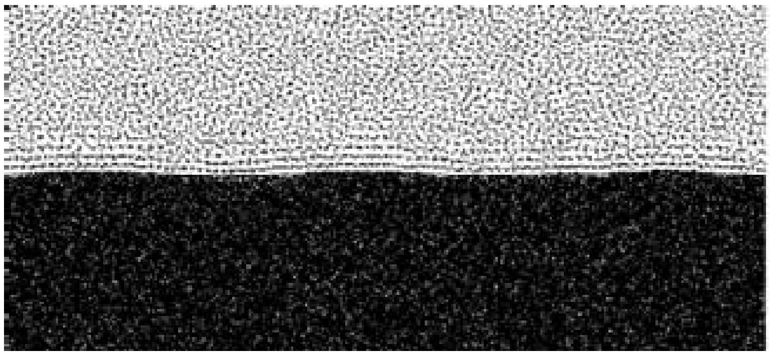
- 周りよりつめたい (温度 1/10、、密度 10 倍) ガスの球を超音速で動かす
- 上から 3 個は Grid
- 下の 2 つは Gasoline (下は 10M 粒子)
- SPH では 境界での不安定が起きないで、冷たい流体が固まりのまま。

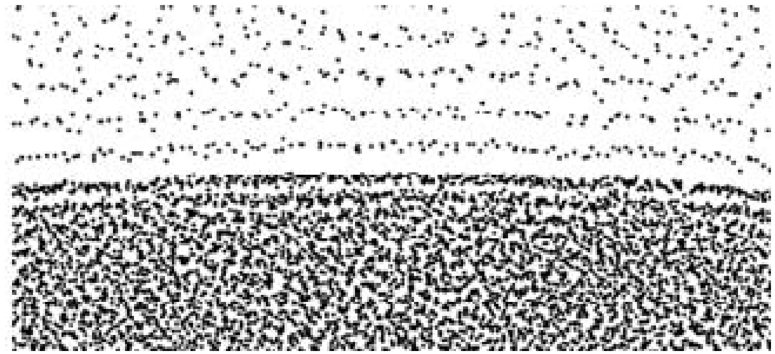
どれくらい違うか (2)



SPH では KH 不安定が起きない。

どれくらい違うか (3)





2 流体の境界面で妙な隙間ができる。このため力が働かない？

何故そんなことが起きるか？

基本的には、 SPH の運動方程式自体の問題、ということになっているらしい。

SPH の基本式おさらい

密度の推定

$$\rho(x) = \sum_j m_j W(x - x_j), \tag{1}$$

ある物理量 f の推定

$$\langle f \rangle(x) = \int f(x')W(x - x')dx'. \tag{2}$$

SPH の基本おさらいのつづき (1)

f の微分: $\langle\nabla f\rangle = \nabla\langle f\rangle$ で、以下の恒等式

$$1 = \sum_j m_j \frac{1}{\rho(x)} W(x - x_j). \tag{3}$$

を使って、さらにもうちょっと近似して

$$\langle\nabla f\rangle(x) \sim \sum_j m_j \frac{f(x_j)}{\rho(x_j)} \nabla W(x - x_j). \tag{4}$$

SPH の基本おさらいのつづき (2)

運動方程式は $-\frac{1}{\rho}\nabla P$ **を計算する。この時に恒等式**

$$\frac{1}{\rho}\nabla P = \frac{P}{\rho^2}\nabla\rho + \nabla\frac{P}{\rho^2}. \tag{5}$$

を使って対称化すると

$$\dot{v}_i = -\sum_j m_j \left(\frac{P_i}{\rho_i^2} + \frac{P_j}{\rho_j^2}\right)\frac{\partial}{\partial x_i}W(x_i - x_j), \tag{6}$$

になる。

密度不連続面での振る舞い

通常の SPH では、ここまでの変形の 2 箇所で ρ の微分可能性を仮定している。以下の 2 つの「恒等式」である

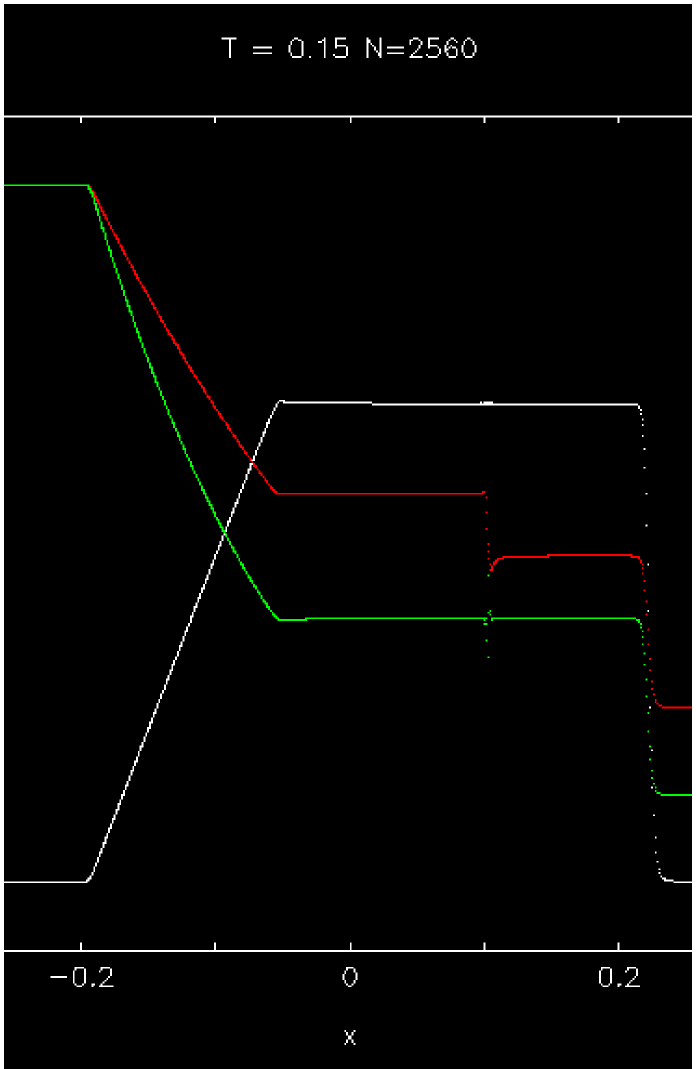
$$1 = \sum_j m_j \frac{1}{\rho(x)} W(x - x_j). \tag{7}$$

$$\frac{1}{\rho}\nabla P = \frac{P}{\rho^2}\nabla\rho + \nabla\frac{P}{\rho^2}. \tag{8}$$

SPH でカーネル推定した密度は滑らか。このため、

- 接触不連続の低密度側では、密度を過大推定、高密度側では過小推定する
- その結果、圧力、その空間微分もデタラメになる。結果として粒子が再配置される

1次元ショックチューブ



私が大昔に書いた SPH コードでの計算例

- 赤:密度、緑:圧力、白:速度 (だったと思う)
- 接触不連続で密度、圧力に不自然なジャンプがある
- 誰のどんなコードでもここはこうなる。

対策

「根本的」な理由:

ρ は滑らかだけど u (内部エネルギー) はジャンプがあるまま。

この観点では、u を滑らかにすればよい。色々提案あり。

- u にもカーネル推定した量を使う
- u を拡散させる (人工熱伝導)
- 質量密度でない密度 (数密度とか) を使う

それぞれ、それなりにうまくいくケースもある。

新しい提案 — 思想

圧力が本来変わってないのに、密度が不連続なだけでおかしなことが起こるのは何故か？

物理量 (とその微分) の推定式に密度を使うから:

$$\langle f\rangle(x) = \sum_j \frac{m_j f(x_j)}{\rho(x_j)} W(x - x_j). \tag{9}$$

ここでやっていることは、本質的には体積要素 dx を $m_j/\rho(x_j)$ で置き換えているだけ。

粒子の占める体積の推定さえできれば別に何を使ってもいいはず (但し、色々論文をみてもこれ以外の方法をやっているものはみたことがない)

新しい提案 — 原理

質量密度の代わりに何を使うか？

気体 (理想気体) は状態方程式 $PV = nRT$ で規定される。ここにはそもそも質量密度とかない。右辺は本質的には熱エネルギー (に比熱による係数かけたもの)

内部エネルギー密度 (結局圧力と同じ) を使えばどうか？
粒子当りの内部エネルギーは今の SPH でも時間発展させる量なので、単位体積当りの内部エネルギー、つまり圧力の空間分布は質量密度を使わなくても計算できる。
接触不連続では圧力は (もちろん) 連続なので、変なことは起きないかもしれない。

energy form SPH ということにする。

フランクフルトで飛行機待ってる時に思い付いたような気が。

定式化(1)

粒子当りの内部エネルギーを

$$U_j = m_j u_j, \tag{10}$$

で定義(u は単位質量当り) して、内部エネルギーの空間密度を

$$q = \sum_j U_j W(x - x_j). \tag{11}$$

で定義する。そうすると、他の物理量のカーネル推定は

$$\langle f \rangle(x) = \sum_j \frac{U_j f(x_j)}{q(x_j)} W(x - x_j), \tag{12}$$

空間微分は

$$\langle \nabla f \rangle(x) = \sum_j \frac{U_j f(x_j)}{q(x_j)} \nabla W(x - x_j). \tag{13}$$

定式化 (2)—エネルギー方程式

普通は運動方程式を先に導くが、どっちかを決めるともう片方が決まるので簡単なこっちを先に。エネルギー方程式は

$$\frac{du}{dt} = -\frac{P}{\rho}\nabla \cdot v. \tag{14}$$

速度の発散の SPH 表現は、今回は

$$\nabla \cdot v = \sum_j (v_i - v_j)\frac{U_j}{q_j}\nabla W(x - x_j). \tag{15}$$

P/ρ だが、圧力は

$$P_i = (\gamma - 1)q_i. \tag{16}$$

定式化(3)—エネルギー方程式つづき

密度がでてくるように見えるのは、左辺が単位質量当りだから。これを U の微分に直すには、形式的には

$$\rho_i = \frac{m_i q_i}{U_i}. \tag{17}$$

という関係式を使う。そうすると、エネルギー方程式が

$$\dot{U}_i = \sum_j (\gamma - 1) \frac{U_i U_j}{q_j} (v_i - v_j) \nabla W(x_i - x_j). \tag{18}$$

定式化(4)—運動方程式

エネルギー方程式があるので、エネルギー保存から運動方程式を導く。2 粒子の、2 粒子の相互作用による内部エネルギー変化は

$$\dot{\boldsymbol{U}}_{ij} + \dot{\boldsymbol{U}}_{ji} = (\gamma - 1)\boldsymbol{U}_i\boldsymbol{U}_j\left(\frac{1}{\boldsymbol{q}_i} + \frac{1}{\boldsymbol{q}_j}\right)(\boldsymbol{v}_i - \boldsymbol{v}_j)\nabla\boldsymbol{W}(\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_j). \quad (19)$$

で、これが運動エネルギー変化

$$\frac{\boldsymbol{m}_i\boldsymbol{m}_j}{\boldsymbol{m}_i + \boldsymbol{m}_j}(\boldsymbol{v}_i - \boldsymbol{v}_j)(\dot{\boldsymbol{v}}_i - \dot{\boldsymbol{v}}_j). \quad (20)$$

と逆符号で絶対値が等しいので、速度変化が

$$(\dot{\boldsymbol{v}}_i - \dot{\boldsymbol{v}}_j) = -(\gamma - 1)\frac{\boldsymbol{m}_i + \boldsymbol{m}_j}{\boldsymbol{m}_i\boldsymbol{m}_j}\boldsymbol{U}_i\boldsymbol{U}_j\left(\frac{1}{\boldsymbol{q}_i} + \frac{1}{\boldsymbol{q}_j}\right)\nabla\boldsymbol{W}(\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_j), \quad (21)$$

定式化(5)—運動方程式つづき

重心が保存するように分配しなおすと

$$\boldsymbol{m_i \dot{v}_i} = -\sum_j (\gamma - 1) U_i U_j \left(\frac{1}{q_i} + \frac{1}{q_j} \right) \nabla W(\boldsymbol{x_i - x_j}). \quad (22)$$

- 割合具合よさそうな対称化された形が何故かでてくる。
- 右辺には質量に依存する量がない。
- $1/q_i$ は対称化のためにでてくる項。SPH 近似の範囲で恒等的に 0。

定式化(6)—細かい話

- γ が違う流体がある時には？
  - 自然な量は q でなくて圧力 $P = (\gamma - 1)q$ なので、初めから $(\gamma - 1)U$ を使えばいいはず
- 状態方程式が non-ideal だったら？
  - 結局 P を使えばいいはずだが、状態方程式を局所的にべき近似とかする必要があるかも。
- 非圧縮は扱えるか？
  - どうでしょう??

人工粘性

これは、多分従来通りにやればよい。速度を止める必要があるので、質量に依存した力が必須。

数値実験

- **実装の詳細**
- 1D shock tube
- **接触不連続**

実装の詳細

密度ループ

```
real weight = symmetrized_kernel(rij,h,pj->h);
rho += pj->mass*weight;
q += pj->mass*pj->u*weight; (これ追加)
```

発展方程式 普通の

```
accterm = -(poverrho2+pj->poverrho2);
acc+= accterm*pj->mass*kernel_gradient;
uterm = -accterm*(vel-pj->vel)*kernel_gradient;
udot += 0.5*pj->mass*uterm;
```

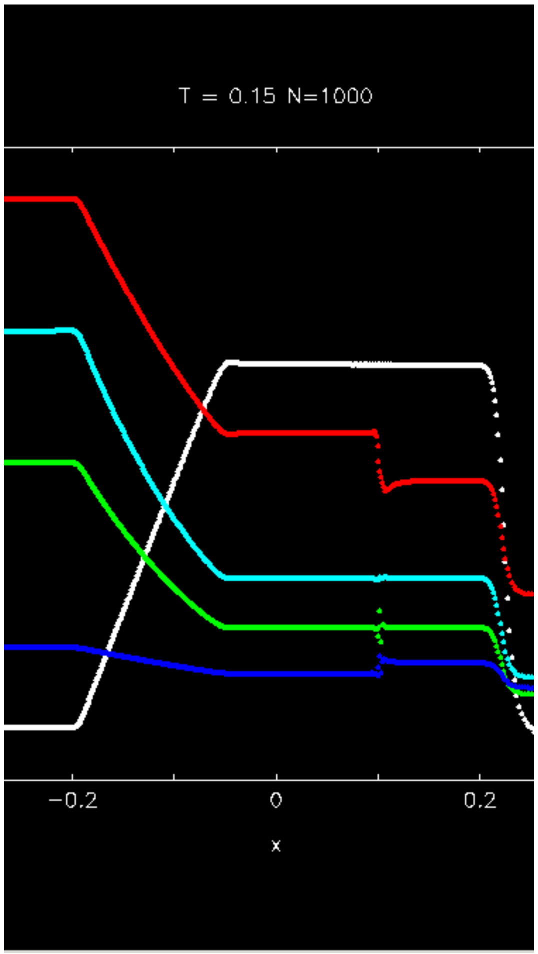
energy form

```
accterm = -(Gamma-1)*u*pj->u*(1.0/q+1.0/pj->q);
acc+= accterm*pj->mass*kernel_gradient;
uterm = (Gamma-1)*(1.0/pj->q)*(vel-pj->vel)*kernel_gradient;
udot += u*pj->mass*pj->u*uterm;
```

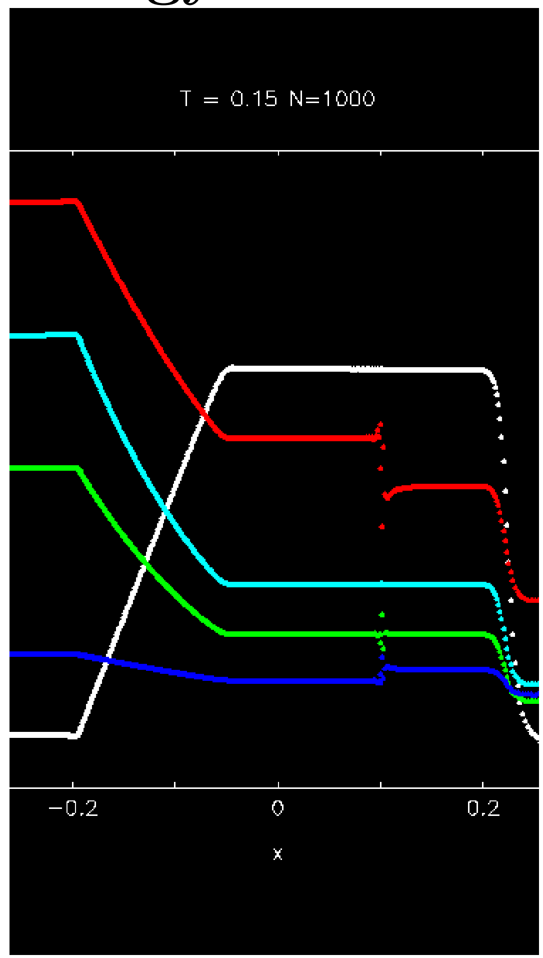
これだけ。

数値実験 – 1D shock tube

普通の



energy form



白: 速度、赤: 密度、緑:圧力、青:内部エネルギ、水色:内部エネルギ密度

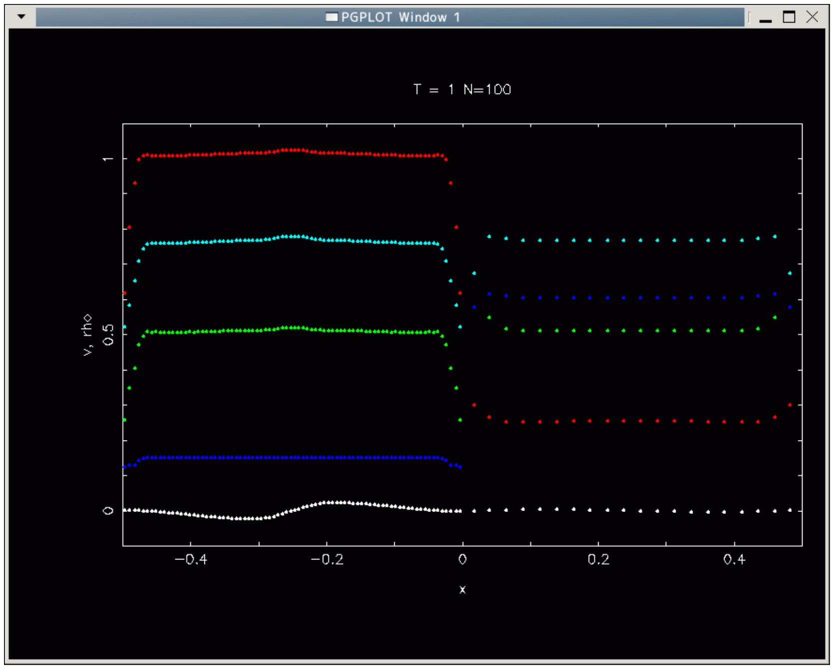
1D shock tube (2)

あんまり違わない？ 密度はシャープに変化
密度、圧力は使ってないので、実は気にしなくてもよい。そう思うと、左では圧力にジャンプがあるが、右では内部エネルギー密度にジャンプがない。良くなっているのではないか？

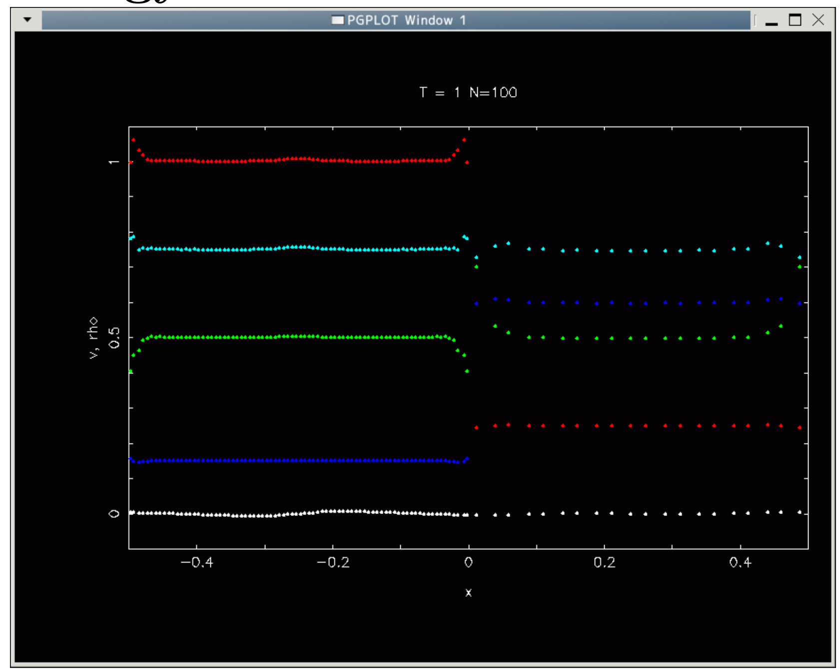
もうちょっと簡単な例として、初期に接触不連続をおいたらどうか？

接触不連続

普通の



energy form



水色の内部エネルギ密度のジャンプは小さくなる (緑の圧力は使ってない)

速度は小さい (本来 0)

密度にはオーバーシュートがでる (時間発展には関係ない)

内部エネルギーのジャンプがなくならない理由

いくつあるみたいだが、主要なのは

- SPH カーネルの中に有限個の粒子があり、その分布が非対称である効果
- variable h の効果

constant h だと不連続面「では」ジャンプがでないので、variable h の効果が大きい。
不連続面での対称化、規格化の方法に工夫の余地があるのかもしれない。

この形式は新発明か？

Ritchie and Thomas MN 2001, 323, 743

$$\boldsymbol{q = \sum_j U_j W(x - x_j).} \tag{23}$$

を使って、密度を

$$\boldsymbol{\rho_i = \frac{m_i q_i}{U_i}.} \tag{24}$$

で定義し、これを

$$\boldsymbol{\dot{v}_i = -\sum_j m_j \left(\frac{P_i}{\rho_i^2} + \frac{P_j}{\rho_j^2}\right) \frac{\partial}{\partial x_i} W(x_i - x_j),} \tag{25}$$

にいれる。でも、これだと別に嬉しいわけではない。

この形式は新発明か？

さらに、

$$\frac{1}{\rho}\nabla P = \frac{P}{\rho^2}\nabla\rho + \nabla\frac{P}{\rho^2}. \tag{26}$$

の代わりに

$$\frac{1}{\rho}\nabla P = \frac{1}{\rho}\nabla P + \frac{P}{\rho}\nabla 1 \tag{27}$$

という謎な恒等式 (右辺第二項は 0、、、) を使って、 $\nabla 1$ をカーネル微分に置き換えると

$$m_i\dot{v}_i = -\sum_j(\gamma-1)m_im_j\left(\frac{u_j}{\rho_i}+\frac{u_i}{\rho_j}\right)\nabla W(x_i-x_j). \tag{28}$$

がでてくる。密度が残っていて駄目そうに見えるが、これは実は我々が今回導いたものと丸め誤差を除いて等価な式。

我々の導出との違い

最大の違いは

$$\langle f\rangle(x) = \sum_j \frac{U_j f(x_j)}{q(x_j)} W(x - x_j), \tag{29}$$

が論文のどこにもでてこないこと。つまり、質量ではなく内部エネルギー密度 (あるいは圧力) から体積要素を求める、という解釈ではなく、密度や運動方程式にアドホックな変更を加える、という解釈になっている。
但し、数値的に計算されるものは同じ。

RT01 のテスト

- ショックチューブ: RT01 でやってる。確かに接触不連続 OK
- KH: Price (2008) でやっている。かなり良いが境界面で粒子がばらつく。

Price08

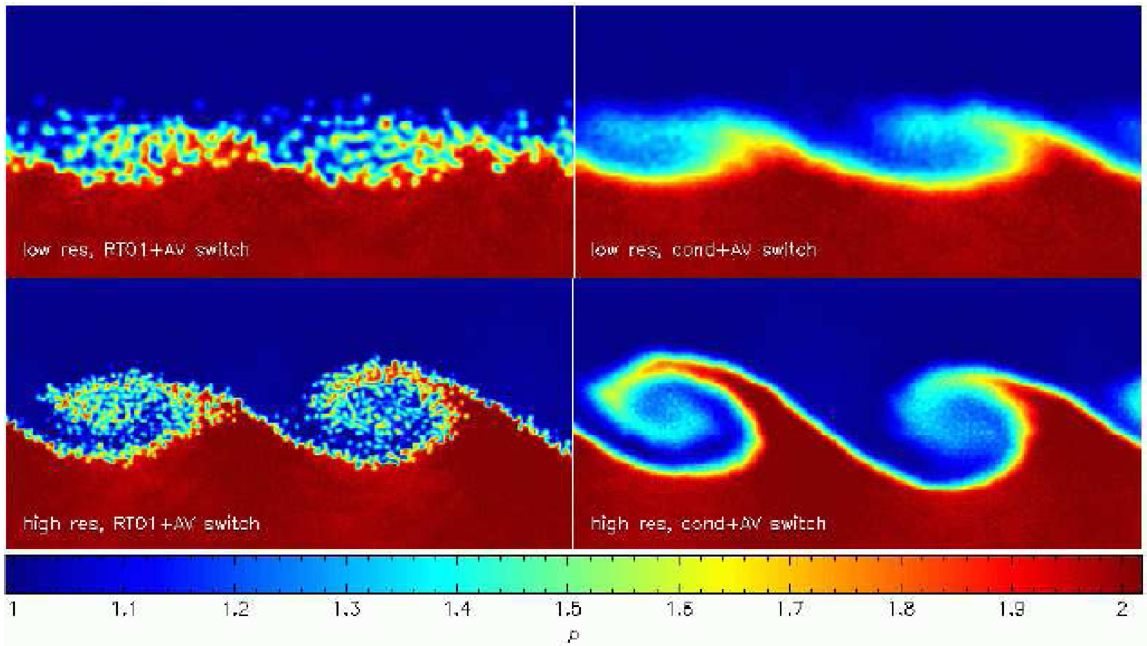


Fig. 8. Zoom up of selected panels from Figures 5 and 7 at $\tau_{KH} = 2$, highlighting the vortex rolls produced using the RT01 formulation (left panels) to a standard SPH formulation using our thermal conductivity term (right panels). The RT01 method works by effectively blurring the discontinuity, which though it helps to resolve the Kelvin-Helmholtz instability, also results in considerable particle noise at the interface.

左: RT01 **右:普通のSPH+人工熱伝導**

多分初期条件が悪い。境界面で最初に振動しているはず。

まとめ

- 密度の代わりに内部エネルギー密度を基本量とする新しい SPH の定式化「energy form」を導いた
- 接触不連続での圧力や密度のジャンプは原理的に発生しえない
- 実際、改善されているような気がする (カーネル推定自体の誤差は残る)
- 精神は違うが式は RT01 と同じ。

まとめ

- 密度の代わりに内部エネルギー密度を基本量とする新しい SPH の定式化「energy form」を導いた
- 接触不連続での圧力や密度のジャンプは原理的に発生しえない
- 実際、改善されているような気がする (カーネル推定自体の誤差は残る)
- 精神は違うが式は RT01 と同じ。
- KH も解ける (もうちょっと数値実験必要)。

まとめ

- 密度の代わりに内部エネルギー密度を基本量とする新しい SPH の定式化「energy form」を導いた
- 接触不連続での圧力や密度のジャンプは原理的に発生しえない
- 実際、改善されているような気がする (カーネル推定自体の誤差は残る)
- 精神は違うが式は RT01 と同じ。
- KH も解ける (もうちょっと数値実験必要)。
- 完璧 (多分)。

あなたも
energy form SPH で
幸せになりませんか？