研究室セミナー 2013/1/16

牧野 淳一郎

今日のお話

今日のお話

例のSPH の非理想気体への拡張のさらに
拡張

今日のお話

- 例の SPH おさらい
- 非理想気体むけの拡張した定式化
  - 定式化
  - 問題—計算できる?
- まとめ

定式化(1)

粒子当りの内部エネルギーを

$$\boldsymbol{U_j = m_j u_j,} \tag{1}$$

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

$$\boldsymbol{q = \sum_j U_j W(x - x_j).} \tag{2}$$

で定義する。そうすると、他の物理量のカーネル推定は

$$\boldsymbol{\langle f \rangle(x) = \sum_j \frac{U_j f(x_j)}{q(x_j)} W(x - x_j),} \tag{3}$$

空間微分は

$$\boldsymbol{\langle \nabla f \rangle(x) = \sum_j \frac{U_j f(x_j)}{q(x_j)} \nabla W(x - x_j).} \tag{4}$$

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

$$\frac{du}{dt} = -\frac{P}{\rho}\nabla \cdot v. \tag{5}$$

速度の発散の SPH 表現は、今回は

$$\nabla \cdot v = \sum_j (v_i - v_j)\frac{U_j}{q_j}\nabla W(x - x_j). \tag{6}$$

P/ρ だが、圧力は

$$P_i = (\gamma - 1)q_i. \tag{7}$$

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

$$\rho_i = \frac{m_i q_i}{U_i}. \tag{8}$$

という関係式を使う。そうすると、エネルギー方程式が

$$\dot{U}_i = \sum_j (\gamma - 1) \frac{U_i U_j}{q_j} (v_i - v_j) \nabla W(x_i - x_j). \tag{9}$$

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

$$\dot{U}_{ij} + \dot{U}_{ji} = (\gamma - 1) U_i U_j \left(\frac{1}{q_i} + \frac{1}{q_j} \right) (v_i - v_j) \nabla W(x_i - x_j). \tag{10}$$

で、これが運動エネルギー変化

$$\frac{m_i m_j}{m_i + m_j} (v_i - v_j)(\dot{v}_i - \dot{v}_j). \tag{11}$$

と逆符号で絶対値が等しいので、速度変化が

$$(\dot{v}_i - \dot{v}_j) = -(\gamma - 1) \frac{m_i + m_j}{m_i m_j} U_i U_j \left(\frac{1}{q_i} + \frac{1}{q_j} \right) \nabla W(x_i - x_j), \tag{12}$$

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

$$m_i \dot{\boldsymbol{v}}_i = -\sum_j (\gamma - 1) U_i U_j \left(\frac{1}{q_i} + \frac{1}{q_j} \right) \nabla W(\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_j). \quad (13)$$

- 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。

非理想気体への一般化の思想

状態方程式が理想気体と違う時にどうすればいいか？

- 基本的な思想は接触不連続で自然に連続なものを連続にして、それを体積推定に使う。
- そうすると、自然な熱力学的量はそもそも圧力 p であって内部エネルギー密度 u じゃない
- (ここが拡張) よく考えると、別に p でなくても、例えば p だけの単調な関数であればいい。例えば、$y = p^\alpha$ みたいなの。

内部エネルギーの代わりに、「圧力の適当な関数に粒子当りの体積を掛けた量」yV を基本的変数にしてみる。理想気体の場合は比例係数が変わるだけで同じ式になるように気をつける。

圧力をさらに一般化する意図

- 圧力は変化幅が大きい。これは strong shock で問題になる。つまり、低圧力側の量が計算にきいてこないので、色々おかしなことになる。
- 圧力に依存するが変化幅の小さい量にすればこの問題は回避できそうな気がする
- 本当かね?まあとりあえず式を導出してみる

非理想気体への一般化(1)

y は、 p だけに依存する単調で微分可能な関数とする。
粒子当りの yV 項を Z_i と書く。この量の空間密度を

$$\boldsymbol{y = \sum_j Z_j W(x - x_j).} \tag{14}$$

で定義する。そうすると、他の物理量のカーネル推定は

$$\boldsymbol{\langle f\rangle(x) = \sum_j \frac{Z_j f(x_j)}{y(x_j)} W(x - x_j),} \tag{15}$$

空間微分は

$$\boldsymbol{\langle \nabla f\rangle(x) = \sum_j \frac{Z_j f(x_j)}{y(x_j)} \nabla W(x - x_j).} \tag{16}$$

一般化(2)—エネルギー方程式

なんだかよくわからないがとりあえずエネルギー方程式を書いて見る。

$$\frac{du}{dt} = -\frac{P}{\rho}\nabla\cdot v. \tag{17}$$

速度の発散の SPH 表現は、今回は

$$\nabla\cdot v = \sum_j (v_i - v_j)\frac{Z_j}{y_j}\nabla W(x - x_j). \tag{18}$$

P/ρ だが、圧力は p_i である。

一般化(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

$$\rho_i = \frac{m_i y_i}{Z_i}. \tag{19}$$

という関係式を使う。そうすると、
エネルギー方程式が

$$\dot{U}_i = \sum_j \frac{p_i Z_i Z_j}{y_i y_j}(v_i - v_j)\nabla W(x_i - x_j). \tag{20}$$

一般化(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

$$\dot{\boldsymbol{U}}_{ij} + \dot{\boldsymbol{U}}_{ji} = \frac{\boldsymbol{Z}_i \boldsymbol{Z}_j}{\boldsymbol{y}_i \boldsymbol{y}_j}(\boldsymbol{p}_i + \boldsymbol{p}_j)(\boldsymbol{v}_i - \boldsymbol{v}_j)\nabla \boldsymbol{W}(\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_j). \tag{21}$$

これから運動方程式にもってけば、結局

$$\boldsymbol{m}_i \dot{\boldsymbol{v}}_i = -\sum_j \frac{\boldsymbol{Z}_i \boldsymbol{Z}_j}{\boldsymbol{y}_i \boldsymbol{y}_j}(\boldsymbol{p}_i + \boldsymbol{p}_j)\nabla \boldsymbol{W}(\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_j). \tag{22}$$

- 理想気体の時にはエネルギー方程式も運動方程式も前のと同じ
- $y = p$ なら一般の状態方程式への拡張と同じ
- Z は一体何を表すのか？

一般化(6)—Zの方程式

$Z = yV$ から、Z の時間変化はでる。

$$\frac{dZ}{dt} = Z\left(\frac{dV}{V\,dt} + \frac{dy}{y\,dt}\right) \tag{23}$$

ここで、

$$\frac{dV}{V\,dt} = \nabla \cdot v \tag{24}$$

$$\frac{d\log p}{d\log V} = -\gamma \tag{25}$$

$$\frac{d\log y}{d\log p} = \alpha \tag{26}$$

ここで γ は局所的な比熱比、α も同様な局所的な値

一般化 (7)—Z の方程式続き

結局

$$\dot{Z}_i = Z_i(\alpha\gamma_i - 1)\sum_j \frac{Z_j}{y_j}(v_i - v_j)\nabla W(x_i - x_j). \tag{27}$$

と、理想気体の場合のエネルギー方程式と同じ形になる (はず)。
エネルギー方程式も積分して、内部エネルギーの値がそっちになるように Z を補正することを考える

Z の補正

以下の手順で U と Z の矛盾を解消できると考えられる。
与えられた状態方程式から、 y は u、 ρ だけの関数

$$y = y(u, \rho) \tag{28}$$

これから、 ρ を u、 y の関数として求められる。そうすると、これは粒子の量として、 y, U が与えられると Z が計算可能ということを意味する。つまり

$$Z_i = f(y, U_i) \tag{29}$$

という形で計算できる。但し、ここで y は

$$y = \sum_j Z_j W(x - x_j). \tag{30}$$

Z の補正 (2)

なので、Z, y を求めるのに以下の反復をする。

$$
\begin{aligned}
Z_{i,new} &= f(y_{i,old}, U_i) && (31)\\
y_{i,new} &= \sum_j Z_{j,new} W(x - x_j). && (32)
\end{aligned}
$$

最初の y は Z を時間積分して求めたものを使う。

y に何を使う？

- なんとなく自然な形は $y = p^{\alpha}$ で、 α は正で 1 より小さい $(1/5$ とか $1/10)$ に取ること？
- 意味: 変化幅を小さくする
- 実験必要､､､

反復の収束性の問題

この反復は $\alpha < 1/2$ で収束しないことがわかる。
$pV = U$ と $p = y^{1/\alpha}$ から
$U = Vy^{1/\alpha} \rightarrow V = Uy^{-1/\alpha}$
従って
$Z = yV = Uy^{1-1/\alpha}$
ここの y のべきの絶対値が 1 より大きいと単純代入では誤差のノルムが大きくなる。
修正量を小さくすればいいが収束が遅い。
α をすごく小さくしたいわけで、これでは駄目？

y を消去して Z の反復にすると条件は良いはず (あとでもうちょっと詳しく)

と思ってたわけですが、

- ここで極限を考える(とにかく極限でどうなってるか理解しろ!というのが先人の教え)
- 色々ありえるが、 $\alpha = 0$ の極限を。
- そうすると $y = 1$
- つまり、

$$\sum_j Z_j W(x - x_j) = 1. \tag{33}$$

この式はなに？

$$\sum_j \boldsymbol{Z_j W(x - x_j) = 1}. \tag{34}$$

- Z_i は粒子があるところでは恒等的に “1” になる量を与える。
- ということは、「体積要素そのもの」ということ？体積と思うなら $\boldsymbol{V_i}$ と書くことにしよう。というわけで、

$$\sum_j \boldsymbol{V_j W(x_i - x_j) = 1} \tag{35}$$

- そもそも V_i は求まるか？安定か？
- これで SPH の式はでてくるか？
- それはなんかいいことがあるか？

V_i は求まるか？安定か？

以下とりあえず h 一定の場合、、、

$$\sum_j V_j W(x_i - x_j) = 1 \tag{36}$$

- これは V_j についての線型連立方程式
- 各要素が正の対称行列で、対角要素が最大
- 解はある。解が正である保証は一般にはないが大丈夫そう？
- どうやって解けるか

どうやって解けるか

- 前処理つき CG 法とか使えば絶対解ける。
- これは多分正定値なので、 SOR でも収束するはず
- ということは、Red-black SOR でも大丈夫かも？
- 粒子の分布が規則的だと、固有関数がフーリエモードになって、固有値が 1 より小さいので、単純反復でも収束 (長波長成分の収束は遅い)
- マルチグリッド的なことをしたい？

これで SPH の式はでてくるか？

特に問題なくそれらしい式がでてくる。
エネルギー方程式は多分

$$\dot{U}_i = \sum_j \boldsymbol{p_i V_i V_j (v_i - v_j) \nabla W (x_i - x_j)}. \tag{37}$$

運動方程式は

$$\boldsymbol{m_i \dot{v}_i} = -\sum_j \boldsymbol{V_i V_j (p_i + p_j) \nabla W (x_i - x_j)}. \tag{38}$$

というようになる (少し違う形もありえる)

体積要素の時間発展

原理的には、連立方程式を解かなくても、 V_i の時間発展を十分精度良く積分すればいいような気もする。これは

$$\dot{V}_i = -V_i \sum_j V_j (v_i - v_j) \nabla W(x_i - x_j). \tag{39}$$

となるような気がする。(constant h の場合)
これと red-black 反復を1-2回くらいでどうかなあ？

それはなんかいいことがあるか？

- 接触不連続で問題を起こし得ない
- strong shock でも上手くいくような気がする
- 「表面」が定義できる可能性あり

表面

- 規則的に粒子並べて、そのまま計算して表面でどうなるかを考えると、体積要素が表面近くの粒子で大きくなってしまう
- 但し、この時に、必ず自分の位置と自分の周りの粒子の平均位置 (カーネル使って計算) がずれる。
- ずれから、「本当はこの体積にしかならない」という量を計算できるはず
- なので、その量になるように決める。

多分起きるような気がする問題: 数値不安定。

まとめ

- 一般化した pressure form SPH をさらに一般化して、「圧力の任意の関数」によって体積要素を定義してみた。
- そうすると、「任意の関数」の中に「定数」もあるということに気が付いた
- これにもとづいて体積要素を計算することはできる。反復法で求められそうだし、時間発展も書ける。
- 接触不連続もショックも、原理的に上手くいきそうな気が。
- どうでしょう？