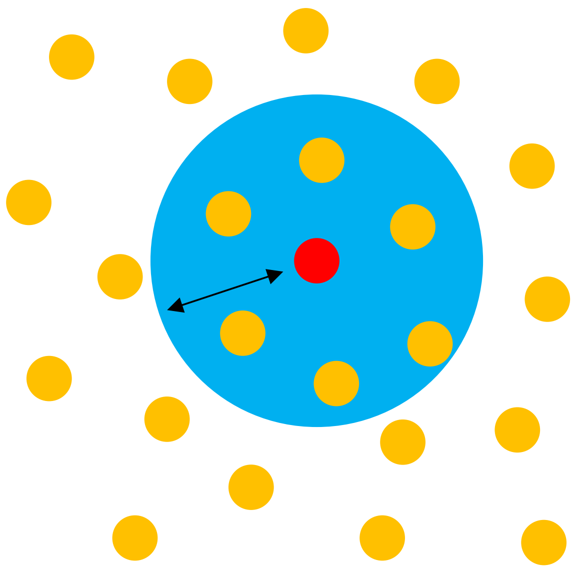
SPH法の数値粘性を抑制する新しいアプローチ

筑波大学M2 藤原隆寛

Smoothed Particle Hydrodynamics

- Lucy (1977)とGingold & Monaghan (1977)によって宇宙物理の問題を解くために開発された**流体力学の数値解法**
- 流体を粒子で離散化 (粒子法)
- ラグランジュ法
- SPH粒子の数密度が質量密度に対応するため、高密度領域が高解像度
- 重力との組み合わせが簡単



- 欠点も様々あって、改良が進められている。

流体力学の基礎方程式

- 連続の式

$$\frac{d\rho}{dt} = -\rho\nabla\cdot\boldsymbol{v}$$

- 運動方程式 (圧縮性・非粘性流体)

$$\frac{d\boldsymbol{v}}{dt} = -\frac{1}{\rho}\nabla p$$

- エネルギー方程式

$$\frac{du}{dt} = -\frac{p}{\rho}\nabla\cdot\boldsymbol{v}$$

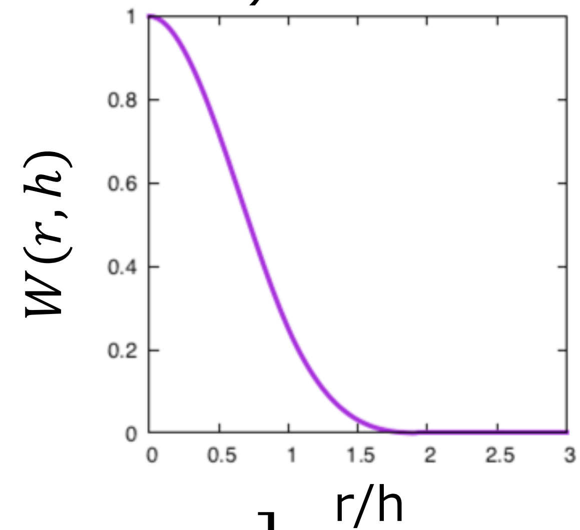
- 状態方程式

$$p = (\gamma - 1)\rho u$$

ρ: 密度
$\boldsymbol{v}$: 速度
p: 圧力
u: 単位質量当たり
内部エネルギー
γ: 比熱比

これらの方程式を数値的に解くために
粒子を使って離散化

SPH法の方程式 (e.g. Springel & Hernquist 2002)



- 密度 (連続の式に対応)

$$\rho_i = \sum_j m_j W_{ij}(h_i)$$

- 運動方程式

$$\frac{d\boldsymbol{v}_i}{dt} = -\sum_j m_j \left[f_i \frac{p_i}{\rho_i^2} \nabla W_{ij}(h_i) + f_j \frac{p_j}{\rho_j^2} \nabla W_{ij}(h_j) \right]$$

- エネルギー方程式

$$\frac{du_i}{dt} = f_i \frac{p_i}{\rho_i^2} \sum_j m_j (\boldsymbol{v}_i - \boldsymbol{v}_j) \cdot \nabla W_{ij}(h_i)$$

流体に加わる力を粒子間相互作用で表現

$$f_i \equiv \left(1 + \frac{h_i}{3\rho_i} \frac{\partial \rho_i}{\partial h_i} \right)^{-1}$$

$$W_{ij}(h_i) \equiv W(\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j, h_i)$$

SPH法の欠点

- 人工粘性
  - 衝撃波を扱うために必要な人工的な項
    (=元のオイラー方程式からは出てこない)
  - シアー領域で人工的な偽の角運動量輸送を生む。
- 接触不連続面の圧力ジャンプ
  - 不連続となるべき密度が滑らかになる影響が圧力に現れる。
  - 流体不安定性 (e.g. Kelvin-Helmholtz不安定性、Rayleigh-Taylor不安定性)が抑制される主な原因
- 空間ゼロ次の誤差
  - 流体の方程式を有限個の近傍粒子で離散化するときに現れる誤差項
  - 近傍粒子数を増やすと誤差は減るが計算量が増える

SPH法の欠点に対する解決策

- 人工粘性

→ 人工粘性係数を状況に応じて変化 (e.g. Balsara 1995; Morris & Monaghan 1997; Rosswog et al. 2000; Cullen & Dehnen 2010)

→ Godunov SPH法 (Inutsuka 2002; Cha & Whitworth 2003)

- 接触不連続面の圧力ジャンプ

→ 人工熱伝導 (Price 2008)

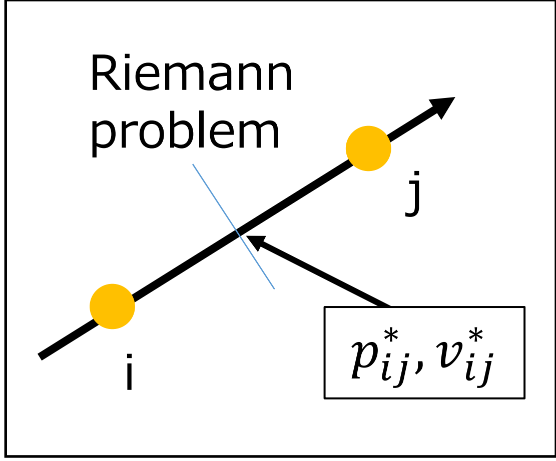
→ Density Independent SPH (Saitoh & Makino 2013; Hopkins 2013)

→ Godunov SPH法

- 空間ゼロ次の誤差

→ Integral Approach (Garcia-Senz et al. 2012)

Godunov SPH (GSPH)法



- 流体粒子間の相互作用を計算するときにRiemann solverを使用

$$\frac{d\boldsymbol{v}_i}{dt} = -\sum_j m_j p_{ij}^* \left[\frac{1}{\rho_i^2}\nabla W_{ij}(h_i) + \frac{1}{\rho_j^2}\nabla W_{ij}(h_j)\right],$$

$$\frac{du_i}{dt} = -\sum_j m_j p_{ij}^* (\boldsymbol{v}_{ij}^* - \boldsymbol{v}_i) \cdot \left[\frac{1}{\rho_i^2}\nabla W_{ij}(h_i) + \frac{1}{\rho_j^2}\nabla W_{ij}(h_j)\right]$$

(Cha & Whitworth 2003)

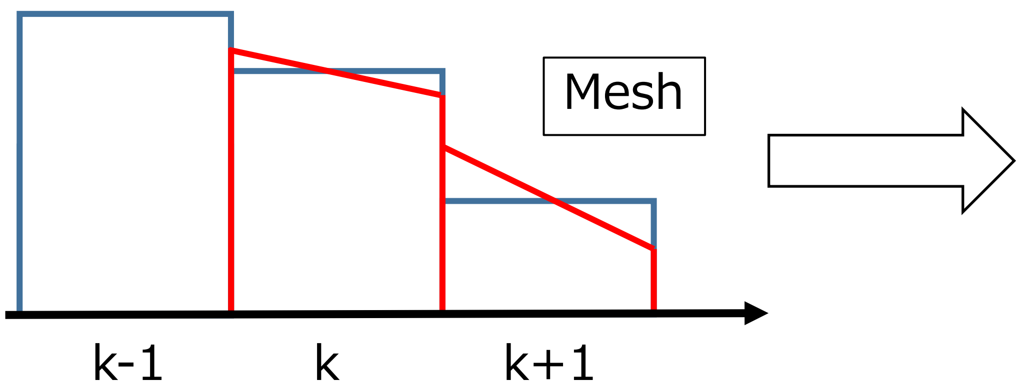
- 必要な散逸が自動的に入る
  - 人工粘性が必要ない
  - 接触不連続面も扱える

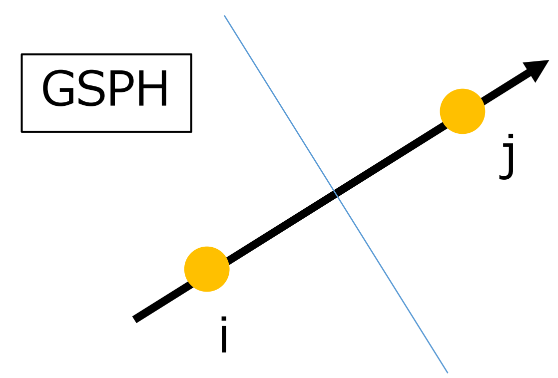
(Cha et al. 2011; Murante et al. 2011)

- MUSCL法 (物理量を線形補間)とFlux limiter (衝撃波領域では精度を落とす)で高次精度化

MUSCL法による高次精度化

- MUSCL法
  - Riemann問題を解くときに、粒子の持つ物理量を線形補間
  - 元々はメッシュ法の空間高次精度化に使用 (van Leer 1979)
  - GSPH法に応用 (Murante et al. 2011)



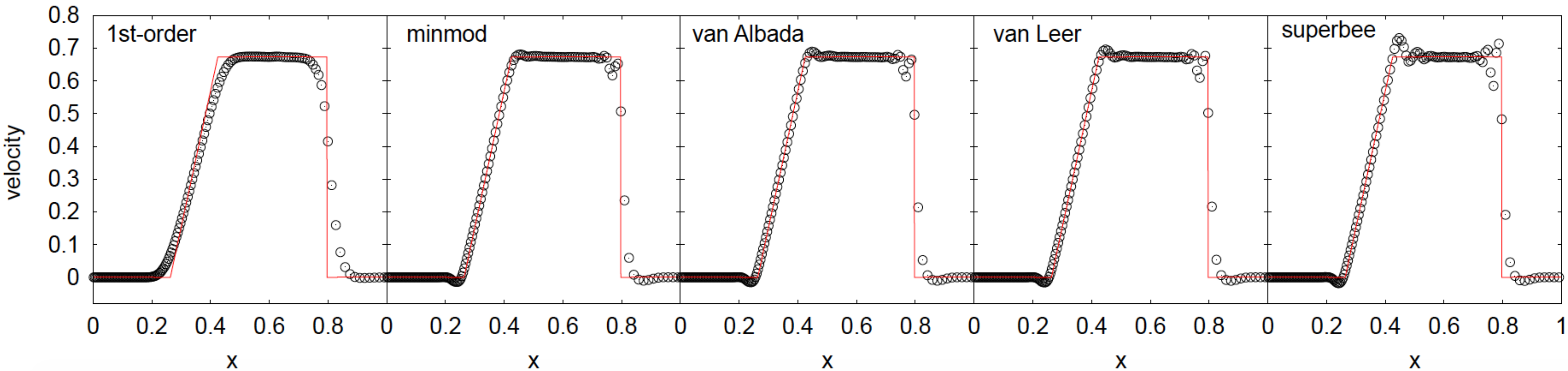


- Flux limiter
  - 衝撃波面などで数値振動を抑えるために使う関数
  - 線形補間する際に勾配を適切に与える

Flux limiter

- 加わる数値粘性の強さを決める関数
- 精度と安定性に関わる

衝撃波管問題



- 数値粘性
  minmod > van Albada > van Leer > superbee

Integral Approach (IA)

- 数値粘性を抑えて1階微分をより高精度に (Garcia-Senz et al. 2012; Rosswog 2015; Valdarnini 2016)

- SPH法の方程式に現れる1階微分の項を新しい方法で計算 (Garcia-Senz et al. 2012)

$$\boldsymbol{I}(\boldsymbol{r}) = \int F(\boldsymbol{r}')(\boldsymbol{r}' - \boldsymbol{r}) W(|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'|, h) d^3 r' \ ,$$

$$= \underbrace{\left[\int (\boldsymbol{r}' - \boldsymbol{r}) \otimes (\boldsymbol{r}' - \boldsymbol{r}) W(|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'|, h) d^3 r' \right]}_{= \boldsymbol{\tau}(\boldsymbol{r})} \nabla F(\boldsymbol{r})$$

$$\nabla F(\boldsymbol{r}) = [\boldsymbol{\tau}(\boldsymbol{r})]^{-1} \boldsymbol{I}(\boldsymbol{r})$$

IAのSPH法への適用

- IAの微分の計算式を離散化 $(d^3r' \sim \Delta V = m/\rho)$

$$\nabla F_i = \boldsymbol{\tau}_i^{-1}\boldsymbol{I}_i$$
$$= \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} F_j \boldsymbol{\tau}_i^{-1}\left(\boldsymbol{r}_j - \boldsymbol{r}_i\right) W_{ij}(h_i)$$

- 一般のSPH法 $\nabla F_i = \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} F_j \nabla W_{ij}(h_i)$

$$\nabla W_{ij}(h_i) \rightarrow \boldsymbol{\tau}_i^{-1}\left(\boldsymbol{r}_j - \boldsymbol{r}_i\right) W_{ij}(h_i)$$

- 運動方程式 + IA

$$\frac{d\boldsymbol{v}_i}{dt} = -\sum_j m_j \left[f_i \frac{p_i}{\rho_i^2} \boldsymbol{\tau}_i^{-1} \boldsymbol{r}_{ji} W_{ij}(h_i) + f_j \frac{p_j}{\rho_j^2} \boldsymbol{\tau}_j^{-1} \boldsymbol{r}_{ji} W_{ij}\left(h_j\right) \right]$$

GSPH法 + IA → ？？？

- 衝撃波や接触不連続面を人工的な散逸項無しに扱えるGSPH法

- 数値粘性を抑えて空間精度を上げるIA

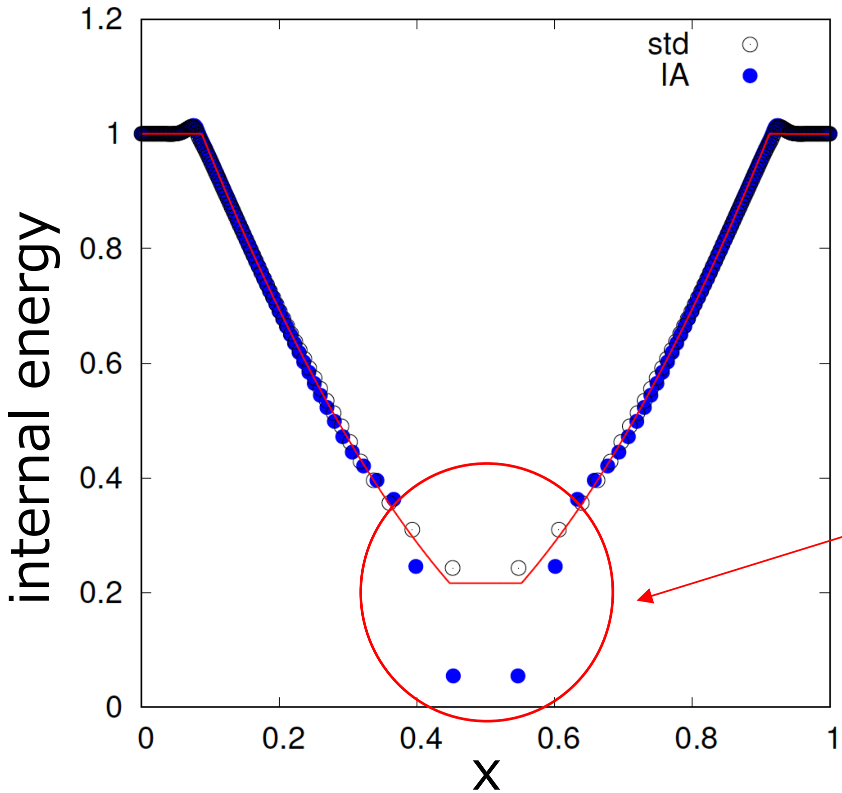
これらを組み合わせると、より精度が高く、様々な問題に適応できるスキームができるのではないか

しかしながら、IAにある欠点を発見

IAの欠点

- 膨張波問題 (123 problem; Einfeldt et al. 1991)

$$(v, \rho, p) = \begin{cases} (-2, 1, 0.4) & x < 0.5 \\ (2, 1, 0.4) & x \geq 0.5 \end{cases}$$



○: Standard SPH

●: Standard SPH + IA

IAでは内部エネルギーが過小評価

Fujiwara & Mori in prep.

なぜ、IAでは内部エネルギーが小さくなるのか

- 計算に使用した行列 $\boldsymbol{\tau}$

$$\boldsymbol{\tau}(\boldsymbol{r}) = \int (\boldsymbol{r}' - \boldsymbol{r}) \otimes (\boldsymbol{r}' - \boldsymbol{r})\, W(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}', h)$$

- 離散化

$$\boldsymbol{\tau}_i = \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} \left(\boldsymbol{r}_j - \boldsymbol{r}_i\right) \otimes \left(\boldsymbol{r}_j - \boldsymbol{r}_i\right) W_{ij}(h_i)$$

密度差が大きい場所では行列 $\boldsymbol{\tau}$ の計算精度が落ちているのではないか

行列τとは？

- SPH法の畳み込み積分

$$\langle F(\boldsymbol{r})\rangle = \int F(\boldsymbol{r}')W(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}', h)$$

- 行列$\boldsymbol{\tau}$

$$\boldsymbol{\tau}(\boldsymbol{r}) = \langle(\boldsymbol{r}-\langle\boldsymbol{r}\rangle)\otimes(\boldsymbol{r}-\langle\boldsymbol{r}\rangle)\rangle$$

共分散行列と等価

$\Downarrow$

離散化に使用した粒子分布から共分散行列を
求め、行列τとして計算に使う

共分散行列による行列τの計算

$$\boldsymbol{\tau}_i^{\mathrm{cov}} = \sum_j \left(\boldsymbol{r}_j - \boldsymbol{r}_i\right) \otimes \left(\boldsymbol{r}_j - \boldsymbol{r}_i\right) P_{ij},$$

$$P_{ij} = \frac{W_{ij}(h_i)}{\sum_k W_{ik}(h_i)}, \qquad \sum_j P_{ij} = 1$$

- まとめると

$$\boldsymbol{\tau}_i^{\mathrm{cov}} = \frac{\sum_j \left(\boldsymbol{r}_j - \boldsymbol{r}_i\right) \otimes \left(\boldsymbol{r}_j - \boldsymbol{r}_i\right) W_{ij}(h_i)}{\sum_j W_{ij}(h_i)}$$

- すべてのSPH粒子が同じ質量を持つ場合

$$\boldsymbol{\tau}_i^{\mathrm{cov}} = \frac{m_i}{\rho_i} \sum_j \left(\boldsymbol{r}_j - \boldsymbol{r}_i\right) \otimes \left(\boldsymbol{r}_j - \boldsymbol{r}_i\right) W_{ij}(h_i)$$

j-IAとi-IAの関係

- Garcia-Senz et al. (2012)のオリジナル

$$\boldsymbol{\tau}_i = \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} \left(\boldsymbol{r}_j - \boldsymbol{r}_i\right) \otimes \left(\boldsymbol{r}_j - \boldsymbol{r}_i\right) W_{ij}(h_i)$$

- our IA

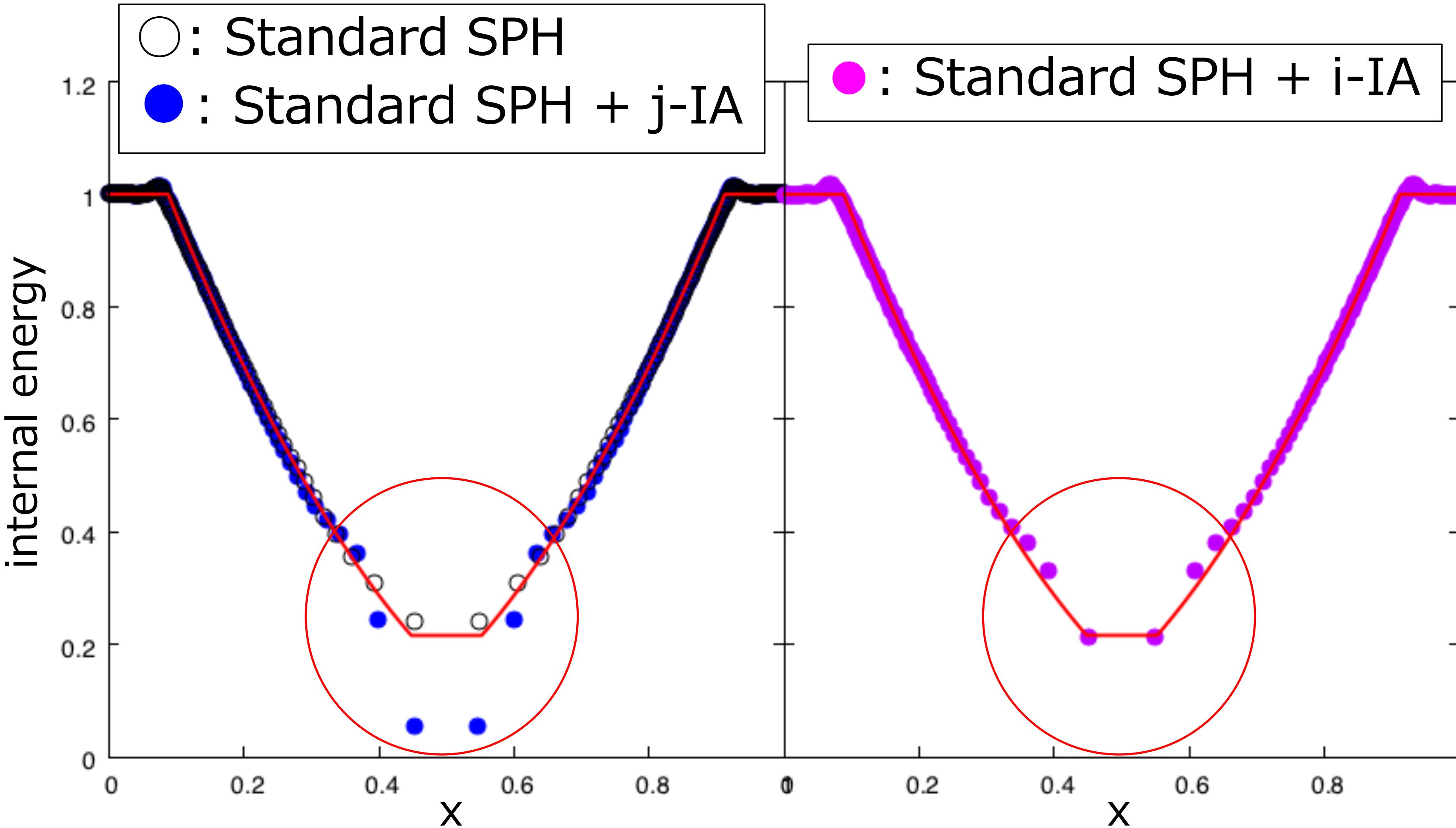
$$\boldsymbol{\tau}_i^{\mathrm{cov}} = \frac{m_i}{\rho_i} \sum_j \left(\boldsymbol{r}_j - \boldsymbol{r}_i\right) \otimes \left(\boldsymbol{r}_j - \boldsymbol{r}_i\right) W_{ij}(h_i)$$

離散化に使用する体積要素の
与え方の違いに帰着する

オリジナルのIA: **j-IA**
新しいIA: **i-IA**

i-IAの効果

123 problem



Fujiwara & Mori in prep.

エネルギー方程式の誤差の見積もり

- $\boldsymbol{v}_j \cong \boldsymbol{v}_i + (\boldsymbol{r}_{ji} \cdot \nabla)\boldsymbol{v}_i$ を代入 ($\boldsymbol{r}_i$のまわりで$\boldsymbol{v}_j$を展開)

$$\frac{du_i}{dt} = -\frac{p_i}{\rho_i}(\boldsymbol{R}_i \nabla) \cdot \boldsymbol{v}_i,$$

(grad-h termは無視)

$$\boldsymbol{R}_i = \frac{1}{\rho_i}\sum_j m_j \nabla W_{ij}(h_i) \otimes \boldsymbol{r}_{ji}$$

$\boldsymbol{R}_i = \mathbf{1}$ のとき元のエネルギー方程式 $\frac{du}{dt} = -\frac{p}{\rho}\nabla \cdot \boldsymbol{v}$と等しくなる

Standard SPH法では一般に$\boldsymbol{R}_i \neq \mathbf{1}$

- j-IAでは

$$\boldsymbol{R}_i = \boldsymbol{\tau}_i^{-1}\frac{1}{\rho_i}\sum_j m_j(\boldsymbol{r}_j - \boldsymbol{r}_i) \otimes (\boldsymbol{r}_j - \boldsymbol{r}_i) W_{ij}(h_i)$$

$$= \boldsymbol{\tau}_i^{-1}\boldsymbol{\tau}_i^{\mathrm{cov}} \neq \mathbf{1}$$

エネルギー方程式の誤差の見積もり

- i-IAでは

$$\boldsymbol{R}_i = [\boldsymbol{\tau}_i^{\mathrm{cov}}]^{-1} \frac{1}{\rho_i} \sum_j m_j (\boldsymbol{r}_j - \boldsymbol{r}_i) \otimes (\boldsymbol{r}_j - \boldsymbol{r}_i) W_{ij}(h_i)$$
$$= [\boldsymbol{\tau}_i^{\mathrm{cov}}]^{-1} \boldsymbol{\tau}_i^{\mathrm{cov}} = \mathbf{1}$$

$$\frac{du_i}{dt} = -\frac{p_i}{\rho_i} (\boldsymbol{R}_i \nabla) \cdot \boldsymbol{v}_i \rightarrow -\frac{p_i}{\rho_i} \nabla \cdot \boldsymbol{v}_i$$

エネルギー方程式の誤差が消える。

テスト問題

- Standard SPH (SSPH)法、Godunov SPH (GSPH)法にj-IAやi-IAを適用して計算

	通常の微分	j-IA	i-IA
Standard SPH	std SSPH	j-IA SSPH	i-IA SSPH
Godunov SPH	std GSPH	j-IA GSPH	i-IA GSPH

- GSPH法はFlux limiter関数を複数使って計算 (minmod, van Albada, van Leer, superbeeの4種類)

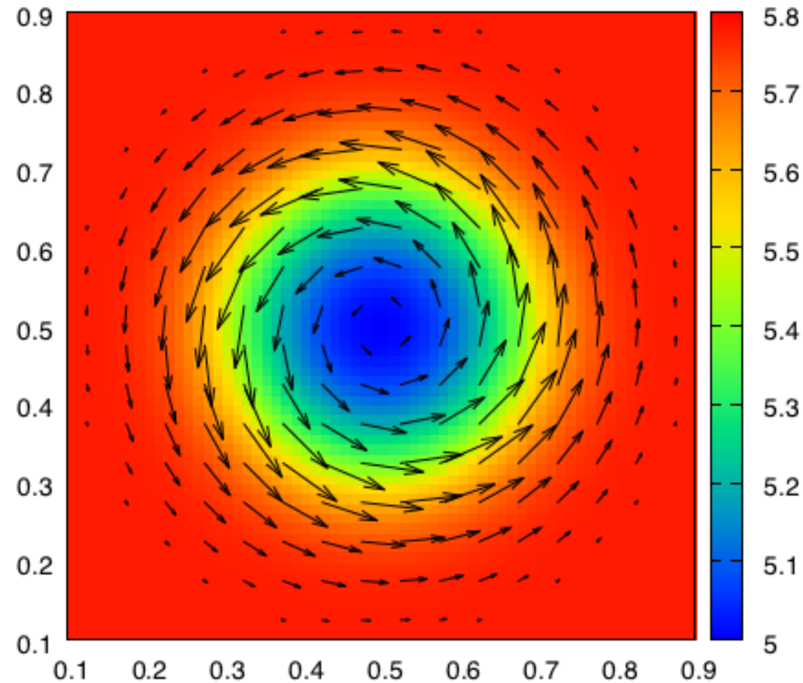
2D: Gresho-Chan vortex test

矢印: 速度
色: 圧力

- 初期条件
  - 接線方向の速度

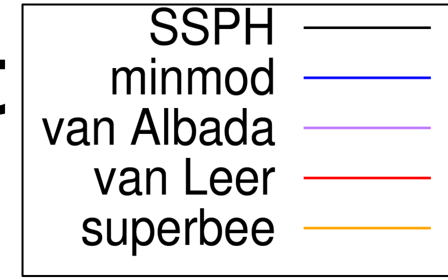
$$v_\phi(r) = \begin{cases} 5r & 0 \le r < 0.2 \\ 2 - 5r & 0.2 \le r < 0.4 \\ 0 & r \ge 0.4 \end{cases},$$

  - 遠心力と圧力勾配力が釣り合うように圧力を設定
  - 一様密度

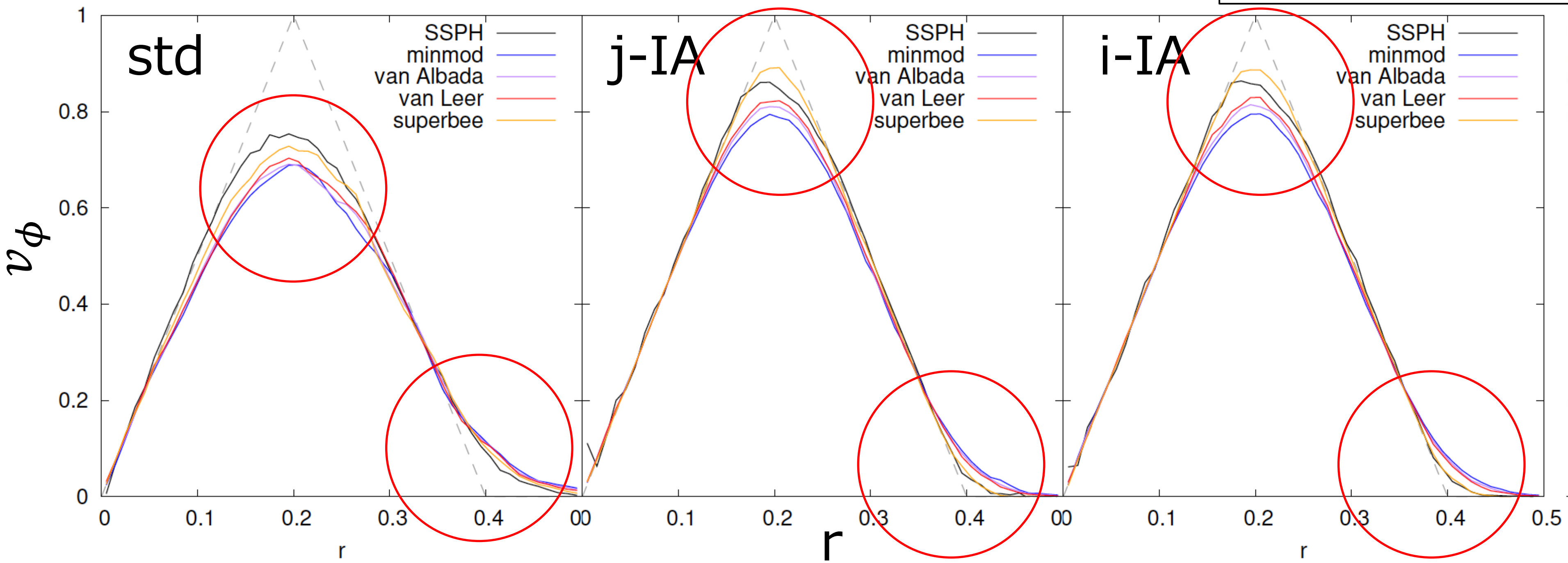


定常解となるはずだが、SPH法では数値粘性(人工粘性、離散化誤差など)によって物理量の分布が時間変化してしまう。

2D: Gresho-Chan vortex test



N=128^2



- r=0.2, 0.4周辺が著しく改善された

Fujiwara & Mori in prep.

- 密度変化が小さいので、j-IAとi-IAは同様の結果
- error
  - std: SSPH<superbee<van Leer<van Albada<minmod
  - IA: superbee<SSPH<van Leer<van Albada<minmod

2D: Gresho-Chan vortex test

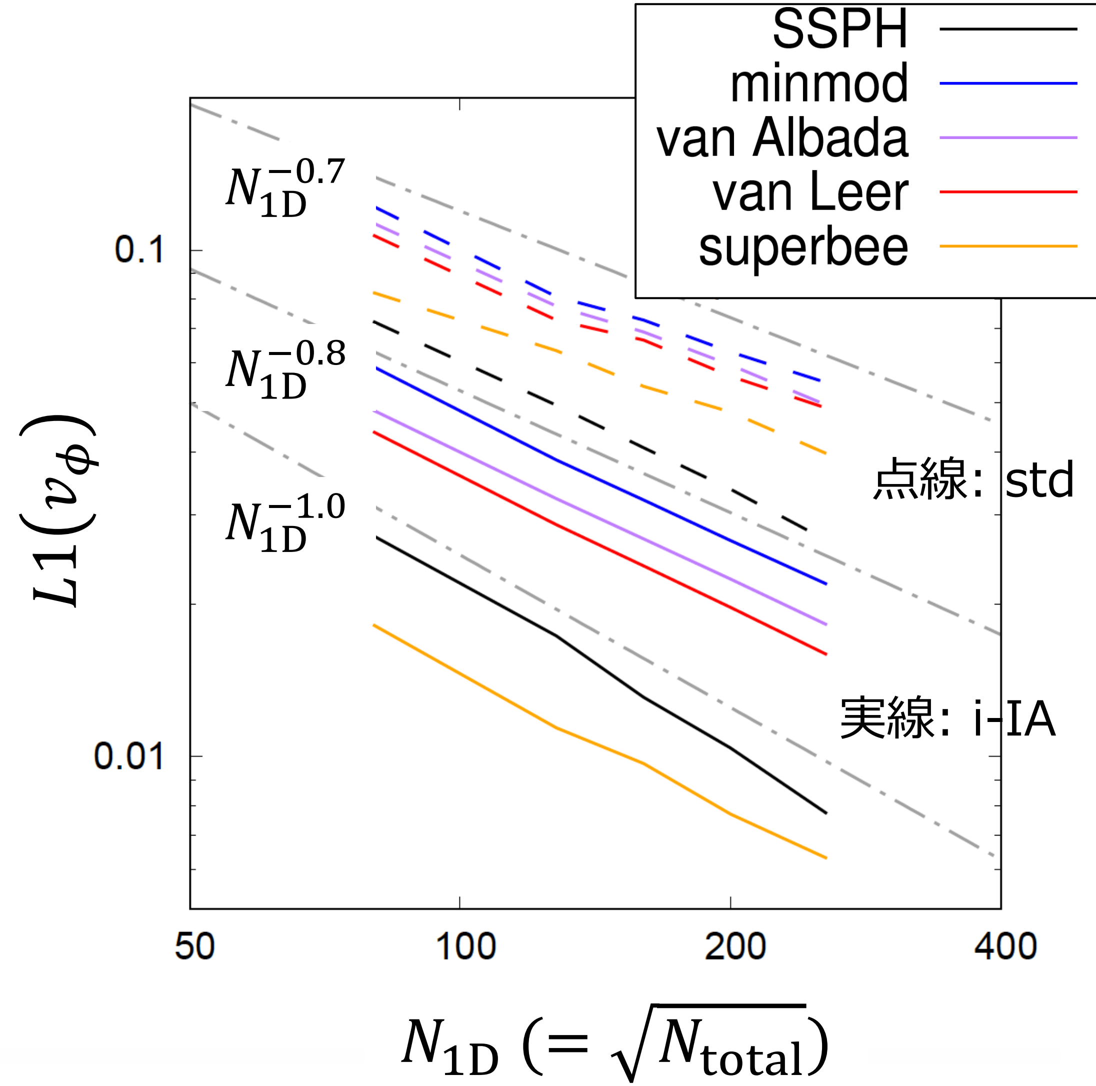
- L1 error
  誤差を定量的に評価

$$L1 = \frac{1}{N_{\mathrm{bin}}}\sum_i^{N_{\mathrm{bin}}} |\bar{v}_\phi(i) - v_\phi(r_i)|$$

$\bar{v}_\phi(i)$: 数値解

$v_\phi(r_i)$: 解析解

- SSPH
  $L1 \propto N_{\mathrm{1D}}^{-0.8} \rightarrow N_{\mathrm{1D}}^{-1}$
- GSPH
  $L1 \propto N_{\mathrm{1D}}^{-0.7} \rightarrow N_{\mathrm{1D}}^{-0.8}$



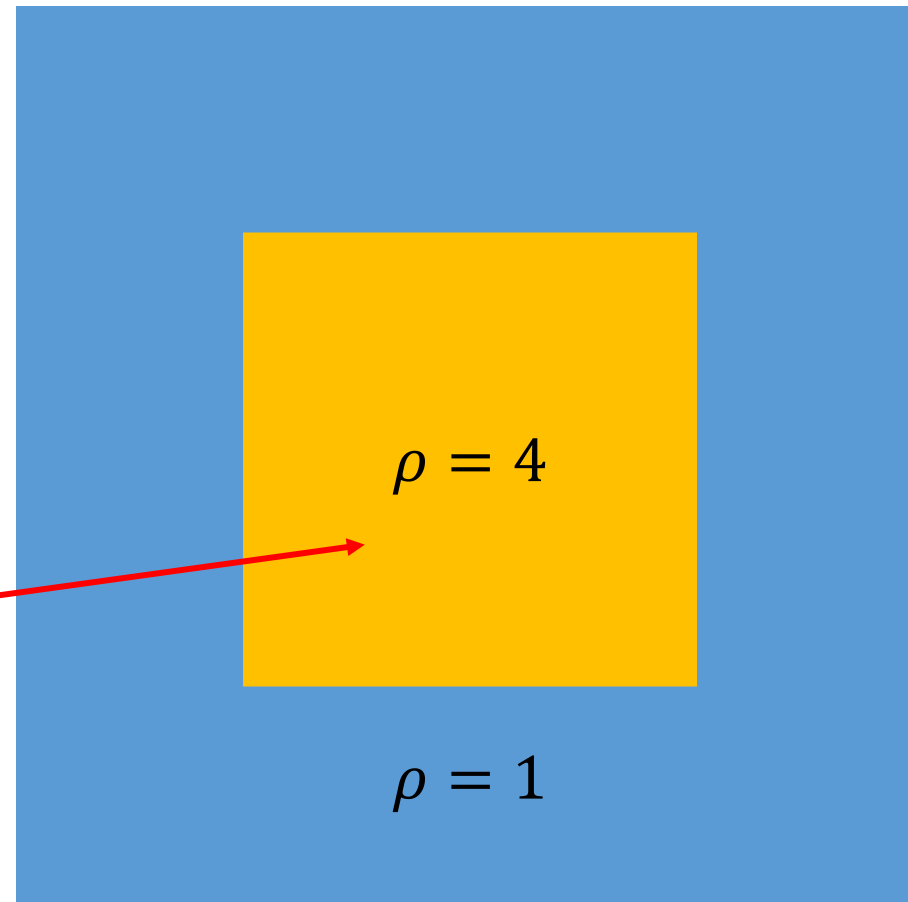
Fujiwara & Mori in prep.

2D: 静水圧平衡テスト

Saitoh & Makino (2013)

- 静水圧平衡 (圧力一定)
- 境界面は接触不連続面

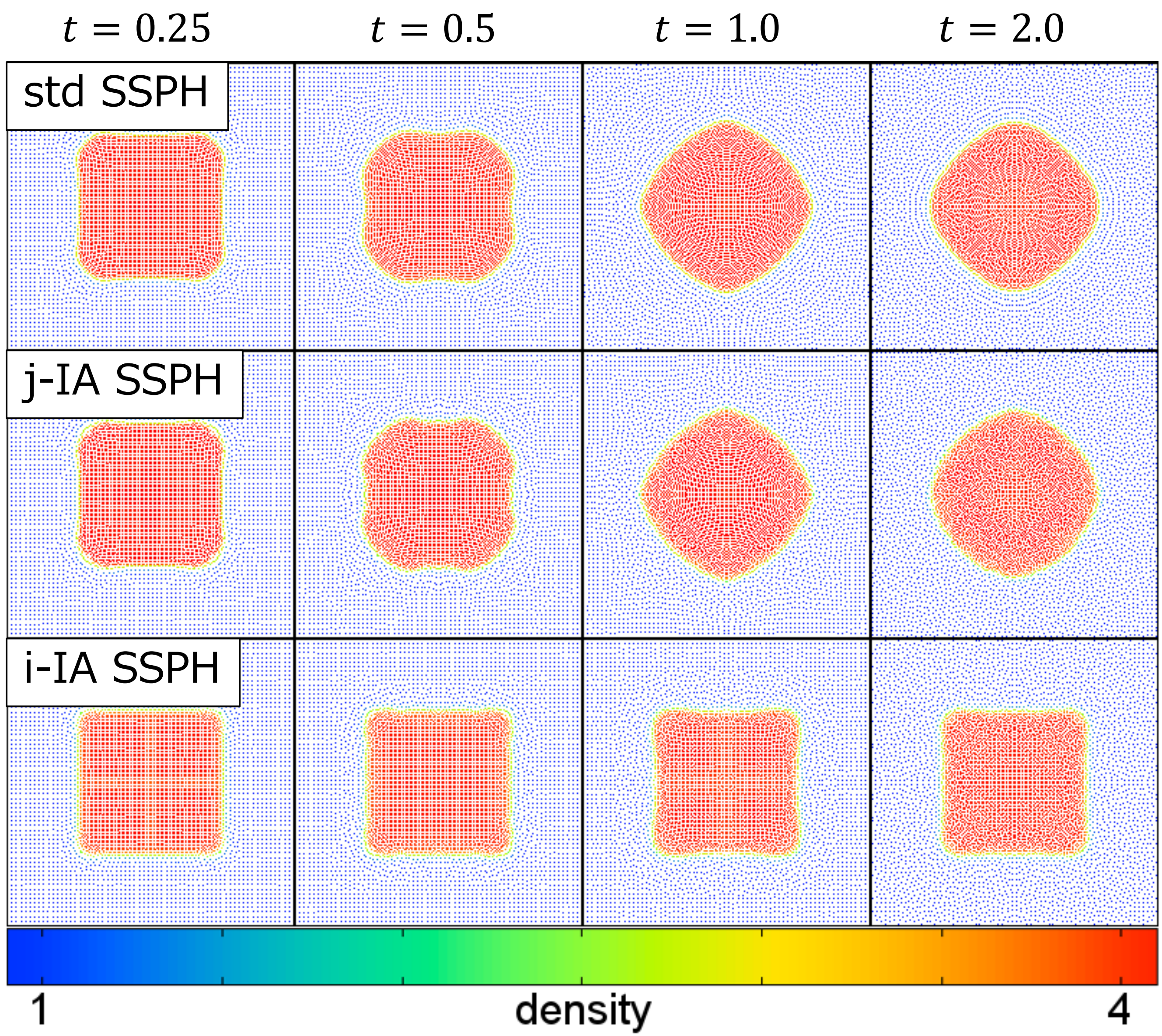
- 中心: 4,096粒子
- 周り: 3,072粒子



sound crossing time ~ 0.49

2D: 静水圧平衡テスト

sound crossing time ~ 0.49



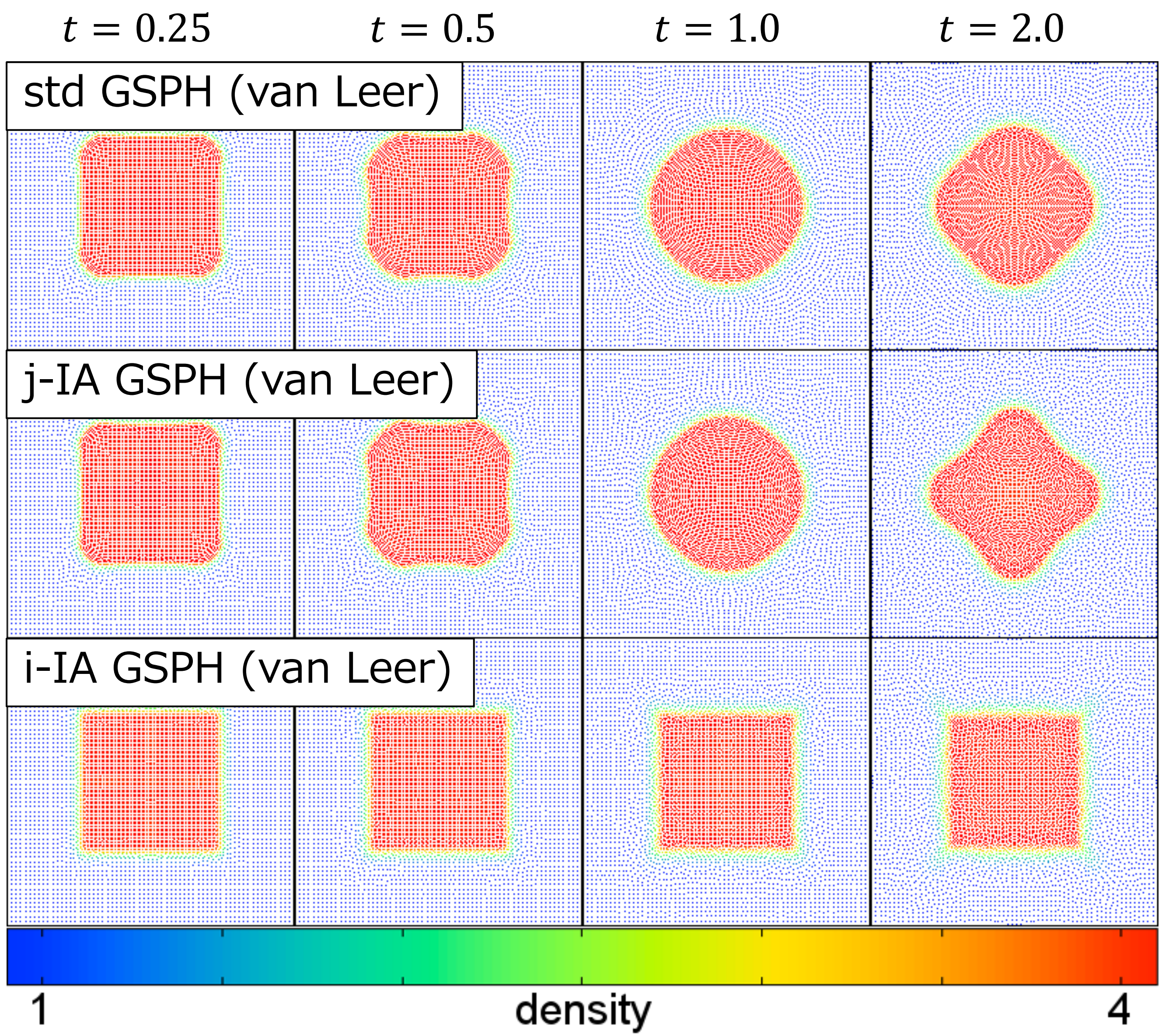
接触不連続面に発生する圧力ジャンプによって生じる偽の圧力勾配力で中心の正方形の形が変形

行列τ の与え方を変えると、密度が不連続な面をより正確に扱えるように

Fujiwara & Mori in prep.

2D: 静水圧平衡テスト

sound crossing time ~ 0.49



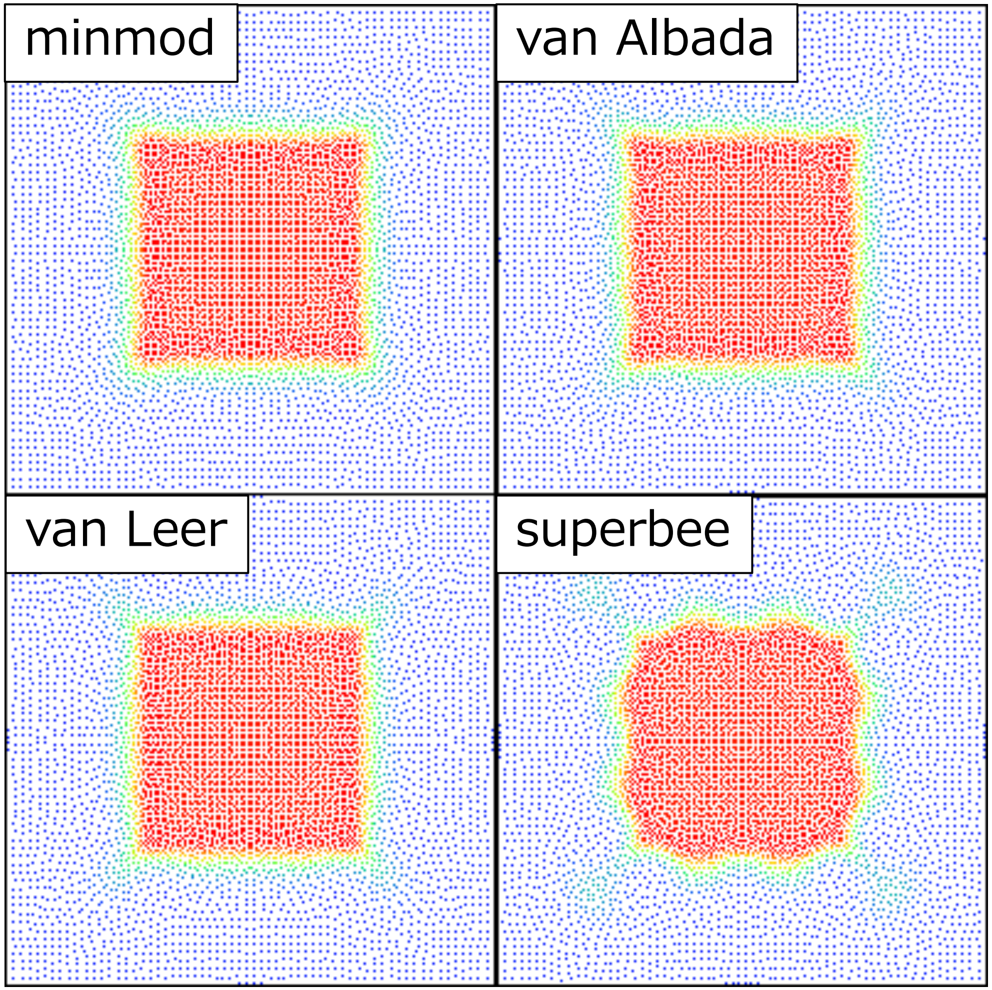
多めに入ってしまう散逸によって不連続面が鈍る→変形

散逸を抑え、不連続面をよりシャープに

Fujiwara & Mori in prep.

2D: 静水圧平衡テスト

- i-IA GSPH法のlimiterを変える



$t = 2.0$

superbeeでは
非物理的な振る舞い

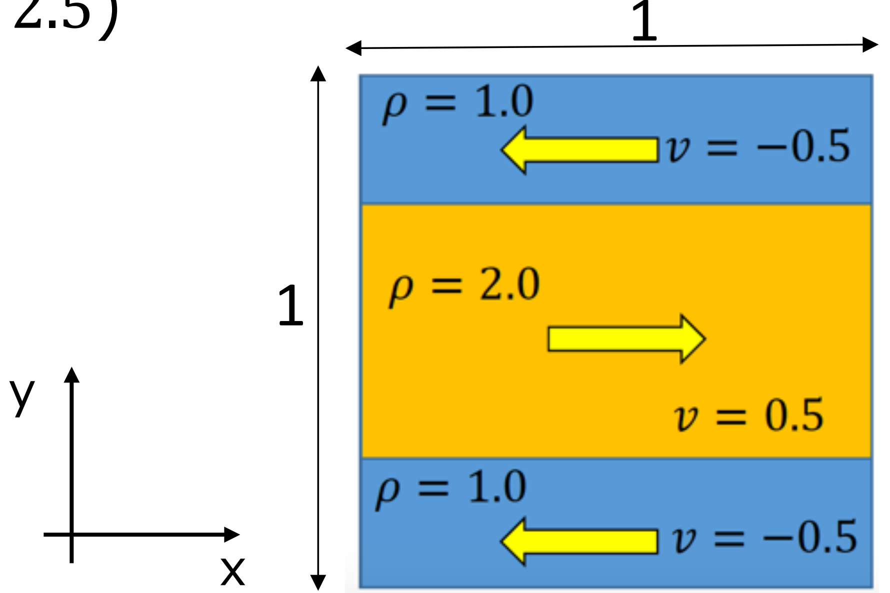
Fujiwara & Mori in prep.

2D: Kelvin-Helmholtz 不安定性

- 密度、速度が異なる2つの流体が接する接触不連続面に摂動を与えると、ゆらぎが成長して渦が発生する。
- 初期条件
  - y方向の速度

$$v_y = 0.025\sin(4\pi x)\left\{\exp\left[-\left(\frac{y-0.25}{0.05}\right)^2\right] + \exp\left[-\left(\frac{y-0.75}{0.05}\right)^2\right]\right\}$$

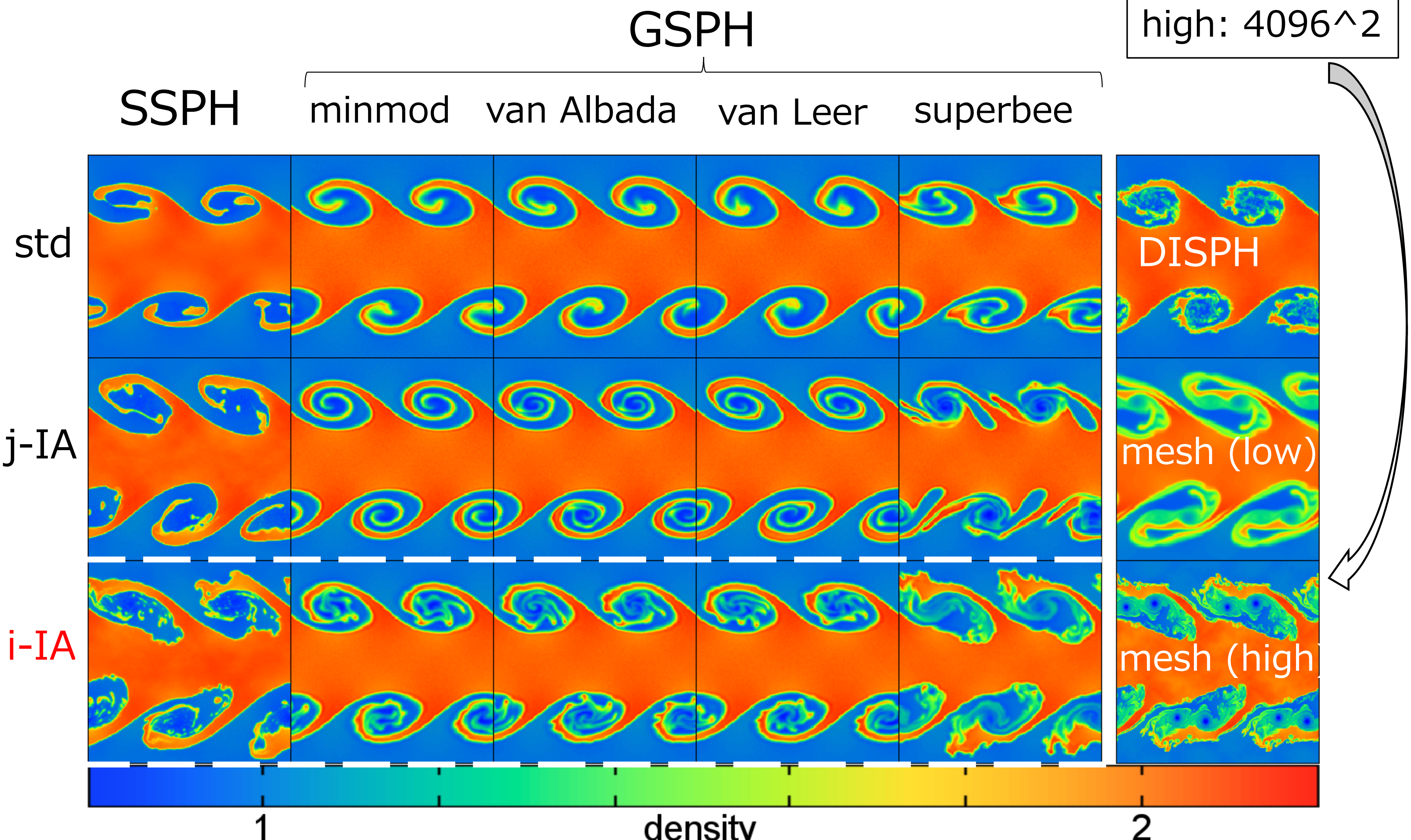
  - 圧力は全領域で一定 ($p = 2.5$)
  - $N = 196{,}608$



2D: Kelvin-Helmholtz 不安定性

$t = 2\tau_{KH}$ (τ_{KH}: KH不安定性の成長タイムスケール)

mesh
low: 440^2
high: 4096^2



3D: Sedov解

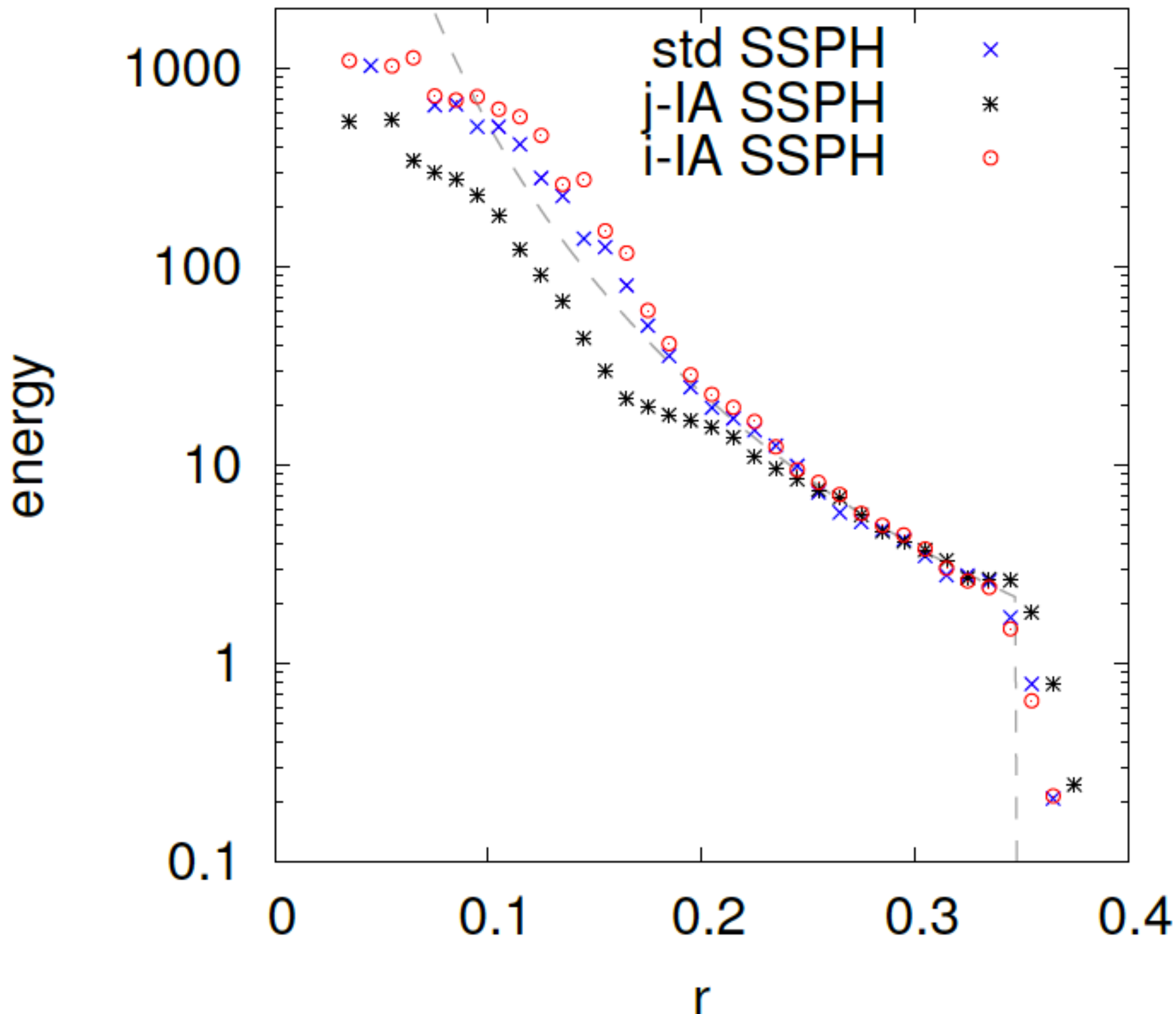
- 点源爆発
- 衝撃波面の位置 ($\gamma = 5/3$)

$$R(t) = 1.15 \left(\frac{E_0}{\rho_0}\right)^{1/5} t^{2/5}$$

- 初期条件
  - N=262,144(=64^3)
  - 密度 $\rho_0 = 1$
  - エネルギー $E_0 = 1$

3D: Sedov解

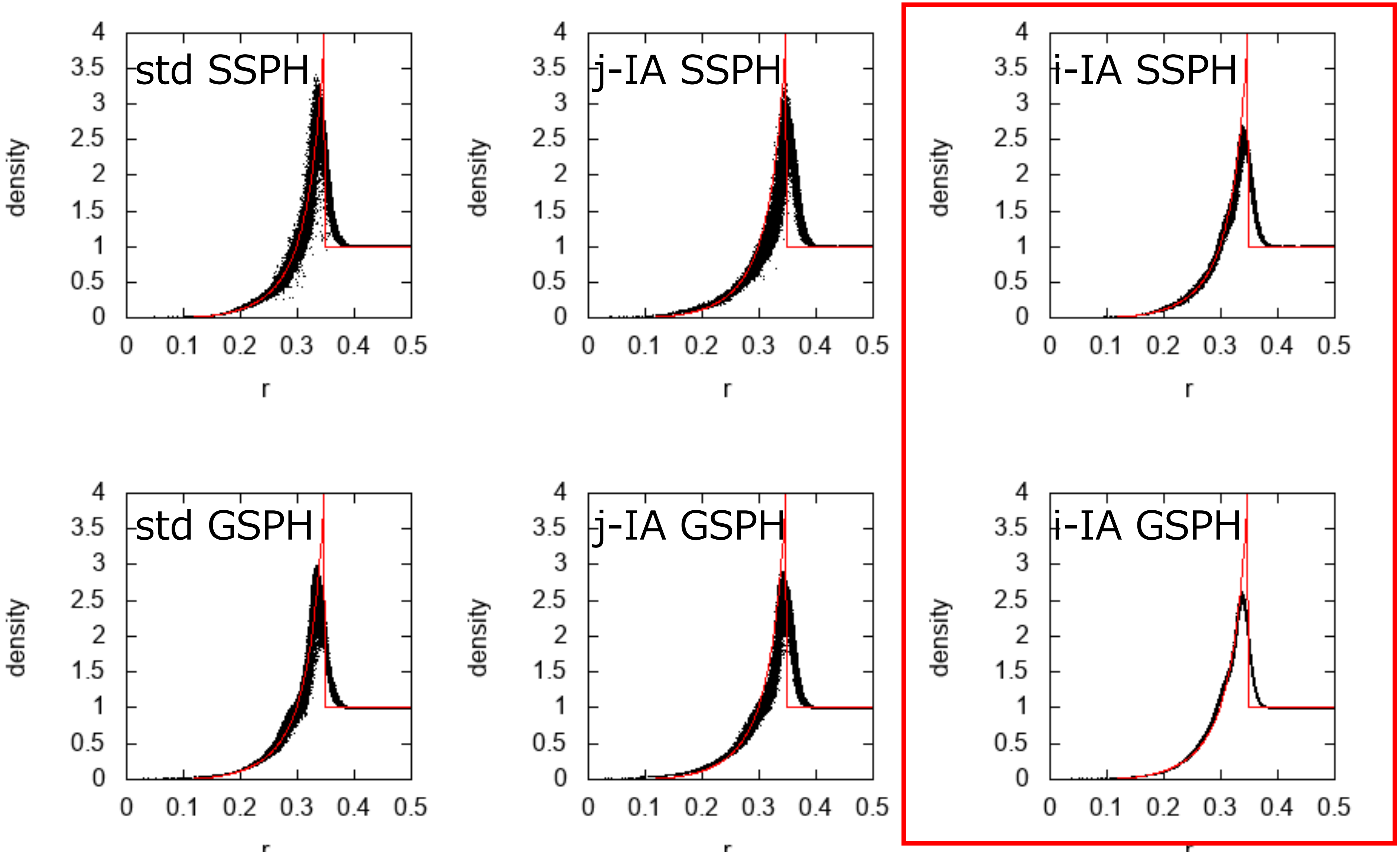
- 膨張波領域の内部エネルギー



Fujiwara & Mori in prep.

3D: Sedov解 (密度)

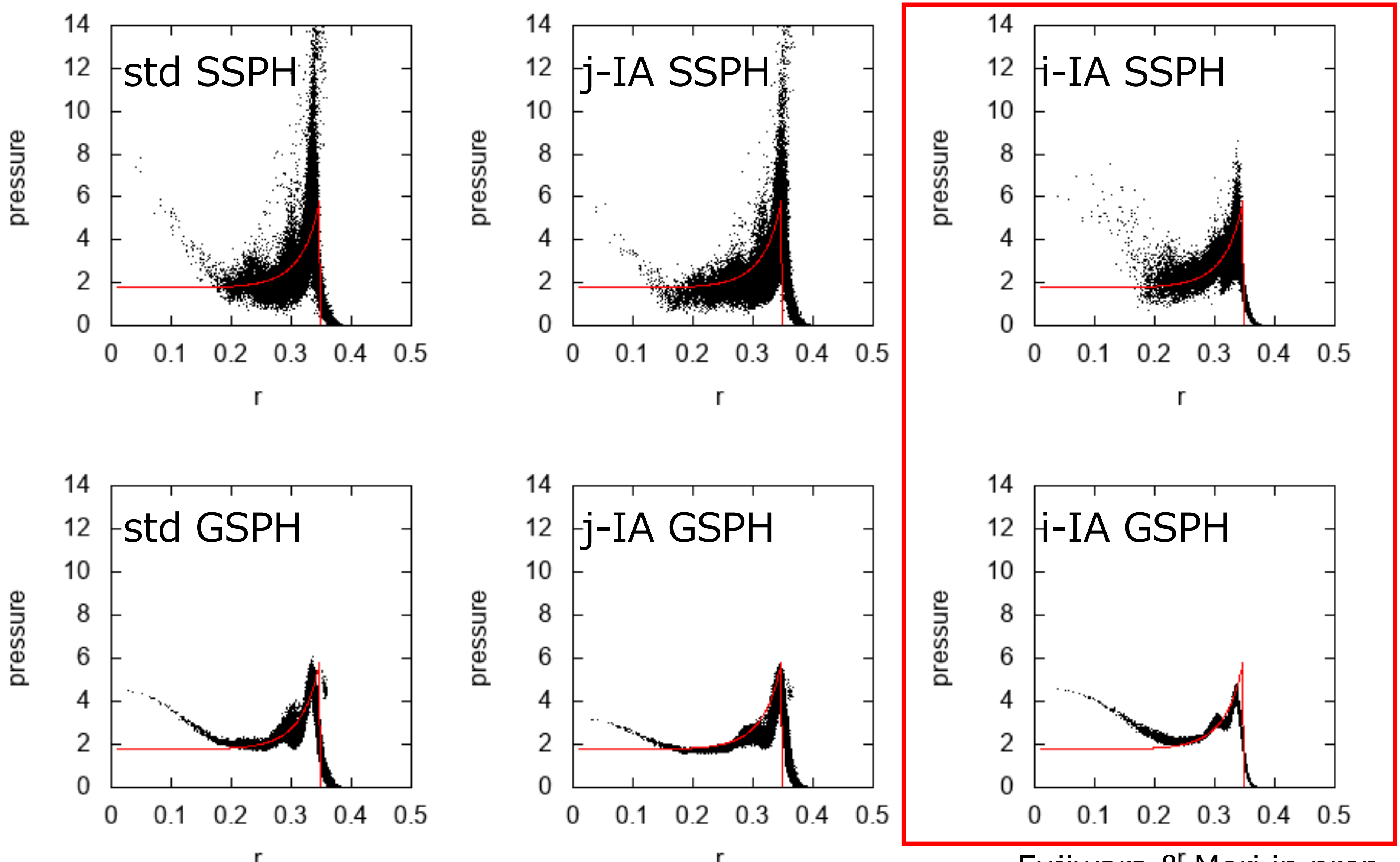
t=0.05



Fujiwara & Mori in prep.

3D: Sedov解 (圧力)

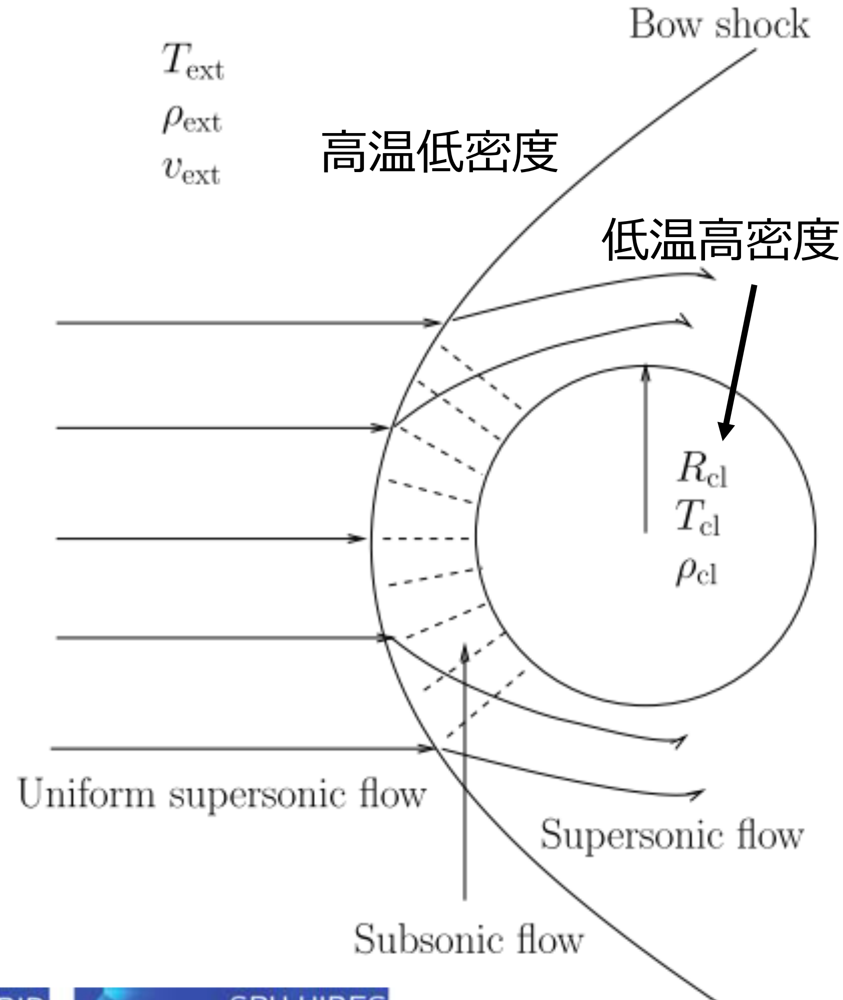
t=0.05

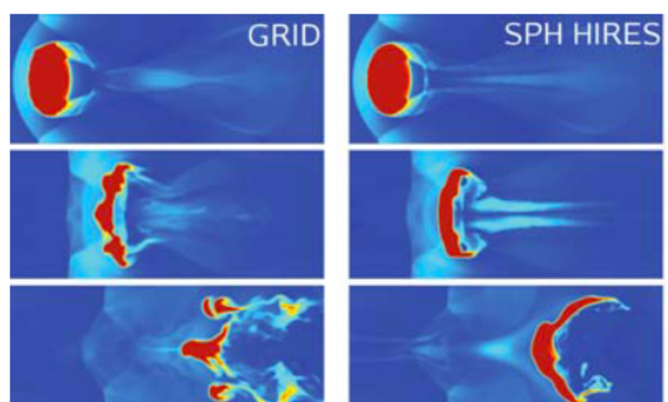


Fujiwara & Mori in prep.

3D: Blob test

- 低温高密度のクラウドに高温低密度のガスが吹き付ける問題
- 初期条件
  - 密度 $\frac{\rho_{ext}}{\rho_{cl}} = \frac{1}{10}$
  - 温度 $\frac{T_{ext}}{T_{cl}} = 10$
  - $v_{ext} = \mathcal{M} c_s, \ \ \mathcal{M} = 2.7$
  - $N = 1{,}555{,}408$
  - 境界面に摂動





Agertz et al. (2007)

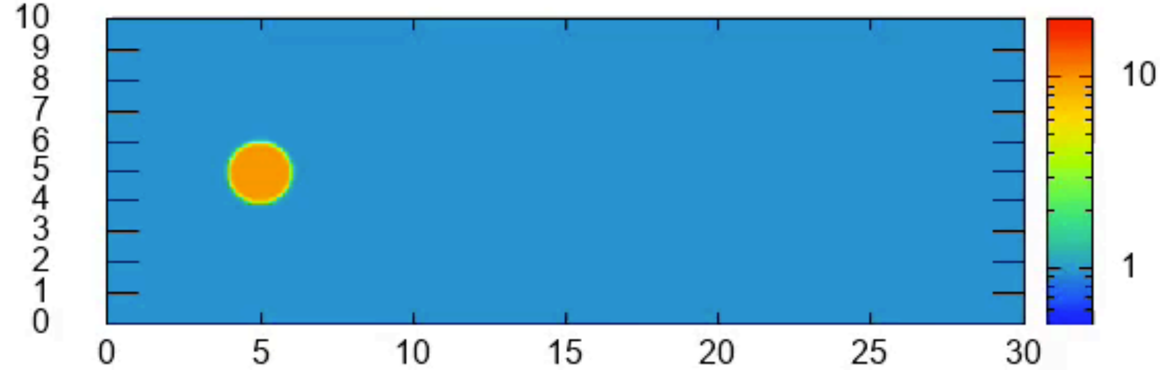
3D: Blob test

密度の時間進化

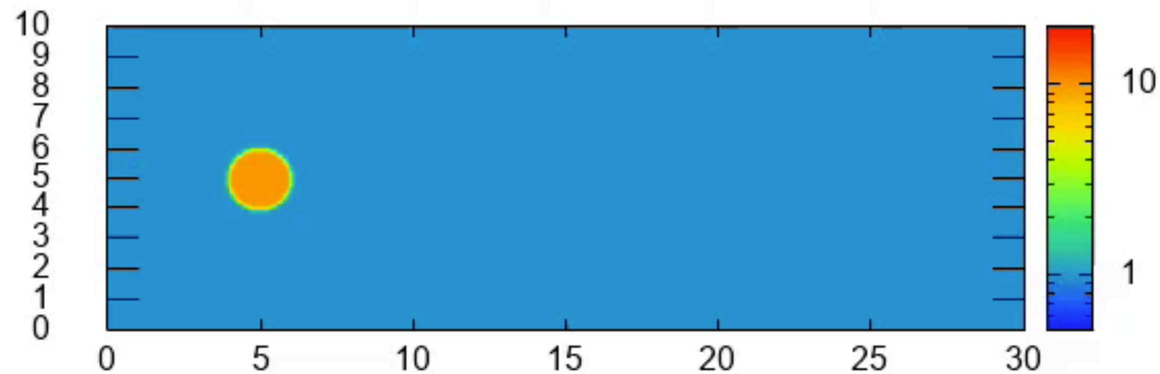
GSPHはvan Leer limiterを使用

std GSPH

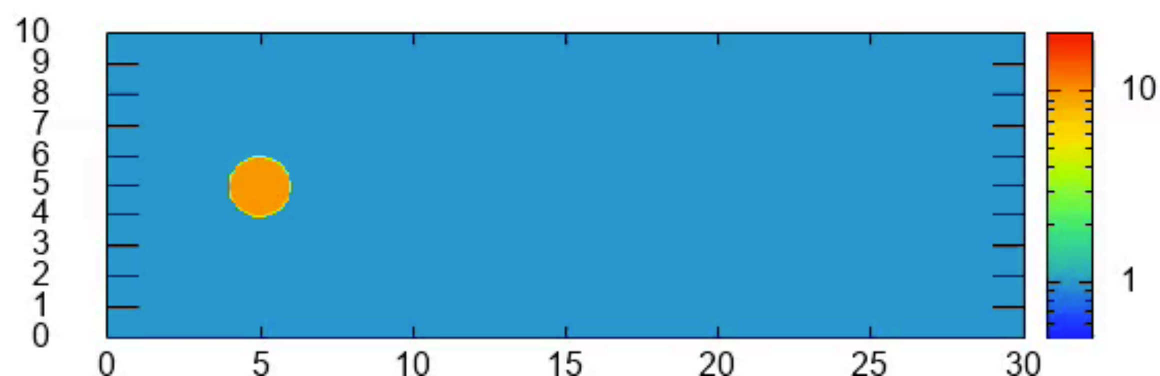
(t = 0.00)



i-IA GSPH

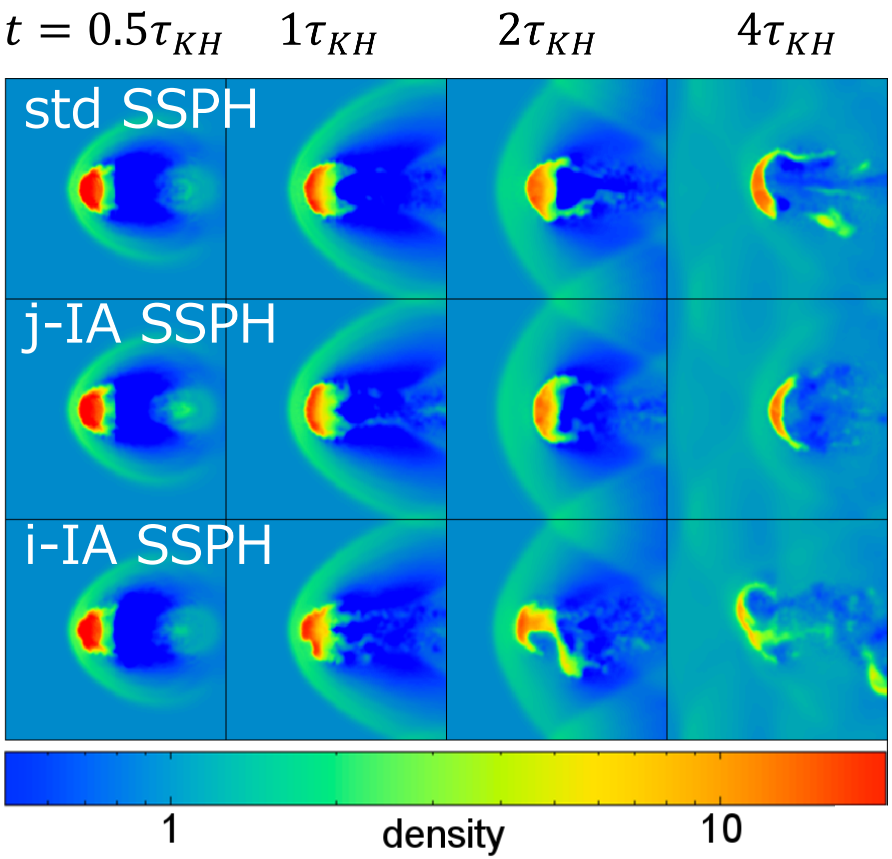


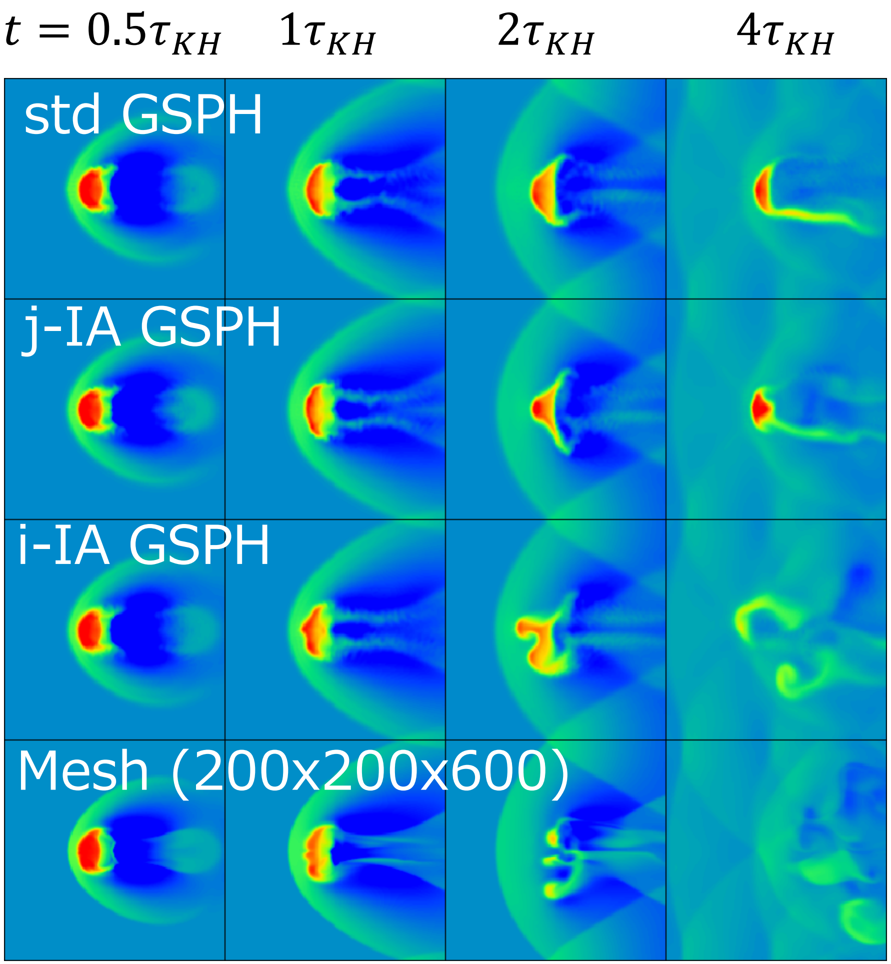
Mesh (200x200x600)



3D: Blob test

τ_{KH}：KH不安定性の成長タイムスケール



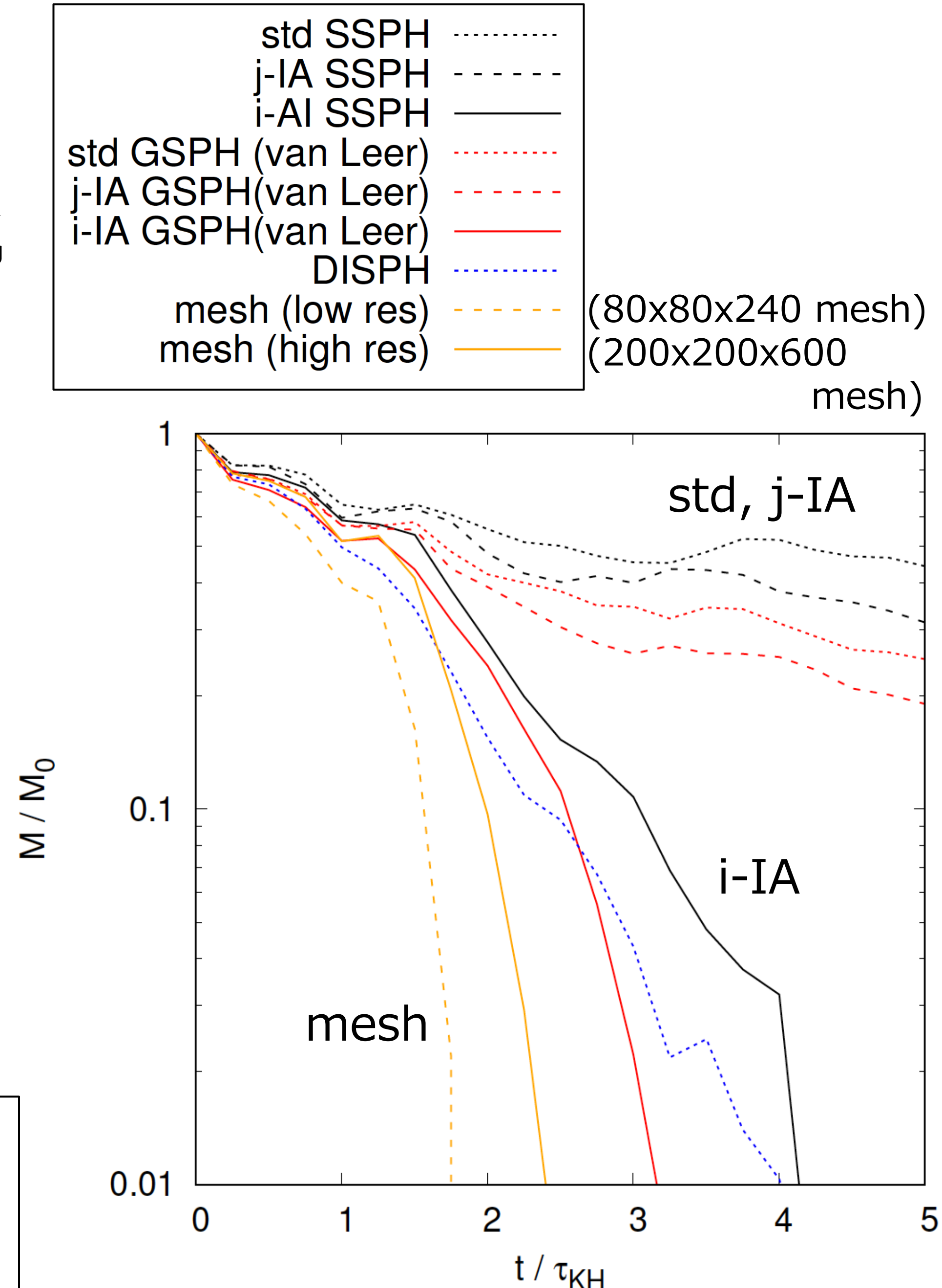


Fujiwara & Mori in prep.

3D: Blob test

- クラウドの質量の変化

- std, j-IA
  クラウドが壊れずに残る
- i-IA
  DISPHやメッシュ法で解いた場合と同様に、クラウドが無くなる



Fujiwara & Mori in prep.

クラウドの定義
(Agertz et al. 2007)

$T < 0.9T_h, \rho > 0.64\rho_h$

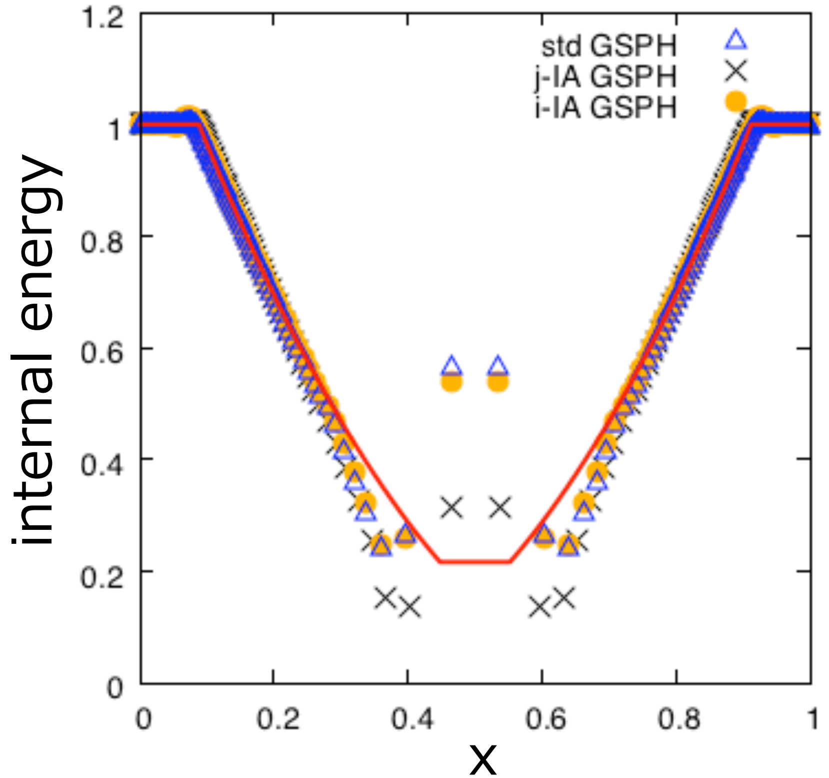
Summary & Discussion

- SPH法の離散化誤差を減らせるIntegral Approach (j-IA; Garcia-Senz et al. 2012)の欠点をカバーする **i-IA**を考案した。
- i-IAは密度差が大きい領域を元のIAより適切に扱える。

- IAによって、人工的な散逸項無しに衝撃波や接触不連続面が扱えるGodunov SPH (GSPH)法の性能を向上させることができる。
- Flux limiter関数の違いで計算結果にも変化がある。特に、superbee関数は精度が向上するかどうかが問題に依存する。

Future work

- GSPH法における膨張波問題
  - GSPH法だけでなくGodunovスキーム全般に現れる問題 (e.g. Toro 2009; Cha & Whitworth 2003)
  - i-IA GSPHはstd GSPHと同様の結果
  - j-IA GSPHはエネルギーが小さくなる⇨計算が不安定になりやすい



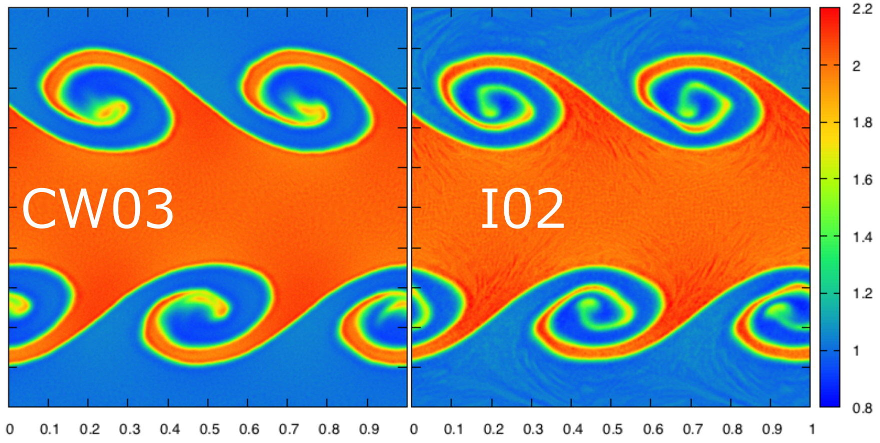
- 重力などの流体以外の物理を入れる。
- exact Riemann solver から近似Riemann solverへ
- 物理量の微分を通常のSPH法と異なる導出をするということがIntegral Approachの本質。このことを新たな計算スキームの開発に使えないか。

予備スライド

2タイプのGSPH法 (Backup)

- Inutsuka (2002)
  　補間関数を使って方程式を導出。散逸を抑えられるが計算量は大
- Cha & Whitworth (2003)
  　Inutsuka GSPHよりシンプルな導出。散逸が多めに入るが計算量は小

Kelvin-Helmholtz 不安定性



⇨ **Cha & Whitworth (2003)の精度を上げたい**

SPH法の実装

- Standard SPH
  - 方程式: density-energy formulation
    (e.g. Springel & Hernquist 2002; Monaghan 2002)
  - 人工粘性: TVD粘性 ($\alpha = 1$; Monaghan 1997)
    + Balsara switch (Balsara 1995)
- Godunov SPH
  - 方程式: Cha & Whitworth (2003)
  - exact Riemann solver
  - MUSCL + limiter (Murante et al. 2011)
- Density Independent SPH
  - 方程式: Saitoh & Makino (2013)
  - 人工粘性: TVD粘性 ($\alpha = 1$) + Balsara switch
- Finite Volume Method (メッシュ)
  - Fixed mesh
  - HLLC solver + MUSCL + minmod limiter
  - 2nd-order TVD Runge-Kutta

SPH法の実装

- タイムステップ

$$\Delta t = 0.3 \min \left[\frac{h_i}{\max\left[c_i + c_j - 3\boldsymbol{v}_{ij} \cdot \boldsymbol{r}_{ij} / \left| \boldsymbol{r}_{ij} \right| \right]} \right]$$

- カーネル関数: quintic spline
- 近傍粒子数: constant neighbor number
  1次元: 7, 2次元: 32, 3次元: 128
- 時間積分: leap-frog

Sedov 密度