プログラムのあれこれ

Shobuzako Kensuke *

May 17, 2022

Abstract

ここでは「まとめノート」にはまだ書いていないプログラムのアルゴリズムやタイムステップ問題について書く. 関係ないけど, JpGU の発表概要は次の通り.

[セッション **ID**] PPS07-P13

[タイトル] 惑星コア形成を目指した DISPH 法の改良

[日時] 現地 5/24(火) 1715-1845 @ 国際展示場ホール 8

オンライン 6/1(水) 1100-1300 @ オンラインポスター Zoom 会場 (2) (Ch.02)

Contents

1		新たに作成したプログラム	1
	1.1	静水圧シミュレーションのプログラム	2
	1.2	Y の連続性 \dots	4
	1.3	RTI シミュレーションのプログラム	5
•			_
2		タイムステップに対する考察	5
	2.1	不変的な値と自分で調整できる量	5
	2.2	タイムステップ Δt の制約条件 \ldots	5
	2.3	希望する条件	6
	2.4	fine-tuning による変数の決め方	7
	2.5	数值実験	7
	2.6	考察と結論	8

1 新たに作成したプログラム

前回のレイリーテーラー不安定 (以降,RTI) シミュレーションのプログラムを大幅に書き換えた.その理由は主に二つ.一つ目の理由は,Y の決定アルゴリズムが色々増えたことである.二つ目の理由は,前のRTI プログラムは外部副プログラムを一切作らず,一つのプログラムに全てを書いていて,アルゴリズムの見通しが悪かったことである.そこで,アルゴリズム別にプログラムを作成し,外部副プログラムを設けて見通しを良くした (つもりである).

^{*} Department of Earth and Planetary Sciences, Graduate School of Science, Kyushu University

1.1 静水圧シミュレーションのプログラム

作成したプログラムは全部で6つで、アルゴリズム別に作った.以下の表にその特徴を示す.

プログラム名	Y の決定アルゴリズム	境界補正	圧力勾配の形	特記事項
A	Hosono et al. (2013)	あり	パターン 1	なし
В	Hosono et al. (2013)	なし	パターン 1	なし
С	Our method	あり	パターン 1	なし
D	Our method	なし	パターン 1	なし
Е	Our method	あり	パターン 2	なし
F	Our method	あり	パターン 1	Non-smoothed density を使用

Table1: 静水圧シミュレーションのプログラム

表の説明を順に行う.

Y の決定アルゴリズム

Hosono et al. (2013) とは iteration によって Y を決定する方法. この方法では、状態方程式と整合的な (ρ,p,Y) の組を反復法で求める. Our method は二つのステップを踏む. まず、連続の式を解いて求めた ρ と温度の時間発展式を解いて求めた T を使って、 $p=\hat{p}(\rho,T)$ から Non-smoothed pressure を求める. ここでハット付き文字は関数であることを示し、 $\hat{p}(\rho,T)$ は状態方程式から「滑らかでない圧力」を求めることを意味する. 次に Y を定義 $Y=m\hat{p}(\rho,T)/\rho$ から決める. ここで二つの p のセレクションがあることに気づく.

- 1. $Y_i = m_i \hat{p}(\rho_i, T_i)/\rho_i$ を計算した後, $p_i = \sum_j Y_j W_{ij}$ から滑らか圧力を求める方法
- 2. もしくは、滑らかでない圧力 (Non-smoothed pressure) $p_i = \hat{p}(\rho_i, T_i)$ をそのまま使う方法 そこで、後者をプログラム F とし検証してみた.

• 境界補正(ありの場合)

仮想マーカーを用いた境界処理法を使うプログラム. 非一様な圧力ノイマン条件 [Marrone et al., 2011; Asai et al., 2013] から壁圧力を計算し、これを用いて非一様なYのノイマン条件を構成する. 詳しくは「まとめノート 6」を参照.

• 圧力勾配の形

「パターン1」とは新しく導出した形を意味する. 導出なしに

$$-\frac{1}{\rho_i}\nabla_i p_i = -\frac{1}{m_i} \sum_j \left(\frac{Y_i^2}{p_i} + \frac{Y_j^2}{p_j}\right) \nabla_i W_{ij} \tag{1}$$

である. 大事なことはこの式の導出に

$$\frac{Y}{p}\nabla p = \frac{Y^2}{p}\nabla\left(\frac{p}{Y}\right) + \nabla Y \tag{2}$$

という Y の不連続が問題になるかもしれない点が含まれることである.一方で,「パターン 2 」とはオリジナル [Saitoh and Makino, 2013; Hosono et al., 2013; Takeyama et al., 2013] の定式化である.

$$-\frac{1}{\rho_i}\nabla_i p_i = -\frac{1}{m_i} \sum_j Y_i Y_j \left(\frac{1}{p_i} + \frac{1}{p_j}\right) \nabla_i W_{ij} \tag{3}$$

ここで Y の連続性は問題にならない. なぜ、「パターン 1 」を新しく導出したかというと SSPH の方でよく見かける形が

$$-\frac{1}{\rho_i}\nabla_i p_i = -\sum_j m_j \left(\frac{p_i}{\rho_i^2} + \frac{p_j}{\rho_j^2}\right) \nabla_i W_{ij} \tag{4}$$

であり、これを模倣した形にしたかったからである。((1) 式と(4) 式を比べると似ている) 結果を次の表にまとめた。

プログラム	ファイル	Δt	総ステップ数	$(T_{ m ini},p_{ m ini})$	結果	メモ
A	11	10^{-3}	10^{3}	$(2500 \text{ K}, 10^5 \text{ Pa})$	発散	ステップ 2, 反復回数 2 で発散
В	11	10^{-3}	10^{3}	$(2500 \; \mathrm{K}, 10^5 \; \mathrm{Pa})$	発散	ステップ1,反復回数2で発散
C	11	10^{-3}	10^{3}	$(2500 \; \mathrm{K}, 10^5 \; \mathrm{Pa})$	成功	F > C > E > D の順に精度が良い
D	11	10^{-3}	10^{3}	$(2500 \; \mathrm{K}, 10^5 \; \mathrm{Pa})$	成功	
E	11	10^{-3}	10^{3}	$(2500 \; \mathrm{K}, 10^5 \; \mathrm{Pa})$	成功	
F	11	10^{-3}	10^{3}	$(2500 \; \mathrm{K}, 10^5 \; \mathrm{Pa})$	成功	
A	12	10^{-5}	10^{3}	$(2500 \text{ K}, 10^{10} \text{ Pa})$	発散	ステップ 2, 反復回数 2 で発散
В	12	10^{-5}	10^{3}	$(2500 \mathrm{\ K}, 10^{10} \mathrm{\ Pa})$	発散	ステップ 1,反復回数 2 で発散
C	12	10^{-5}	10^{3}	$(2500 \text{ K}, 10^{10} \text{ Pa})$	成功	F > C > E > D の順に精度が良い
D	12	10^{-5}	10^{3}	$(2500 \mathrm{\ K}, 10^{10} \mathrm{\ Pa})$	成功	
E	12	10^{-5}	10^{3}	$(2500 \mathrm{\ K}, 10^{10} \mathrm{\ Pa})$	成功	
F	12	10^{-5}	10^{3}	$(2500 \text{ K}, 10^{10} \text{ Pa})$	成功	

Table2: 静水圧シミュレーションの結果

大事なことは以下である.

- オリジナルの反復法では計算不可. 一方で、Our method だと解ける.
- プログラム F がダントツで良い. つまり, Non-smoothed pressure の方が良いのか?
- 境界補正なしだと 1% の相対誤差, ありだと 0.1% 以下.
- C,D の違いははっきりしない. 今は Y は連続なので問題なしということ?
- ファイル 12 は Δt を小さくし、さらに計算が安定しそうな圧力 (10 GPa) で計算したもの.
- 境界補正なしとありでは、計算時間が倍違った. 境界補正は粒子数の割にかなり重い計算になる.

これらの結果の図は以下の URL に保存した.

https://share.iii.kyushu-u.ac.jp/public/jaFMwAGIIA6AlokBSP-AVwrP2w0Ftp_aDARFcNdM5ypC

なお、図中の +BC は Boundary correction を意味し、"Our method (2)" は圧力勾配の「パターン 2 」ということを意味する。また、 Δt は CFL 条件と運動量拡散時間よりも小さく取ってあるため、時間ステップが不安定を引き起こす可能性はない。

$$\Delta t^{\rm CFL} = \frac{\Delta x}{c^{\rm max}} \approx \frac{5 \times 10^3 \text{ m}}{1 \times 10^4 \text{ m/s}} \approx \underline{0.5 \text{ s}}$$
 (5)

$$\Delta t^{\text{mom}} = \frac{(\Delta x)^2}{\nu} \approx \frac{(5 \times 10^3 \text{ m})^2}{(1 \text{ Pa s})/(3000 \text{ kg/m}^3)} \approx \frac{7 \times 10^{10} \text{ s}}{(1 \text{ Pa s})}$$
 (6)

1.2 Y の連続性

ここで,川田さんが言及されていた Y の連続性についてメモしておく.圧力勾配の形「パターン 1」を導出するときに使った恒等式 ((2) 式) は,Y の連続性が問題となりそうである.実はこの項以外にもこのような恒等式を使って対称性が良い形を導出している.そこで,Y の連続性が担保される場合を考える.

密度の異なる2相が接している状況を考え、外力なしで一様圧力を仮定する.次の関係式を思い出す.

$$\Delta V = \frac{m}{\rho} = \frac{Y}{p} \quad \Rightarrow \quad Y = \frac{mp}{\rho} = p\Delta V$$
 (7)

ここで,以下の二つの方法で質量密度を変えることを考える.

- 1. m は一定にして、数密度を変えることで、質量密度 ρ を変える方法
- 2. 数密度は一定にして, m を変えることで, 質量密度 ρ を変える方法

Y を常に連続に保つためには,あらゆる場所で ΔV が連続あるいは一定になれば良い. 1 の方法だと,重 い粒子の ΔV は小さくなり不連続になる. 2 の方法だと, ΔV を一定にするような m と ρ の組を選べば良いので,これは Y を連続にし得る.そこで, 1 よりも 2 の方が良さそうである. Saitoh and Makino (2013) の Figure 5 の 3 列目 (1 に対応) と 4 列目 (2 に対応) を見ると,確かにこれが言えそうである (彼らの論文では,この Y の連続性についての言及はない).

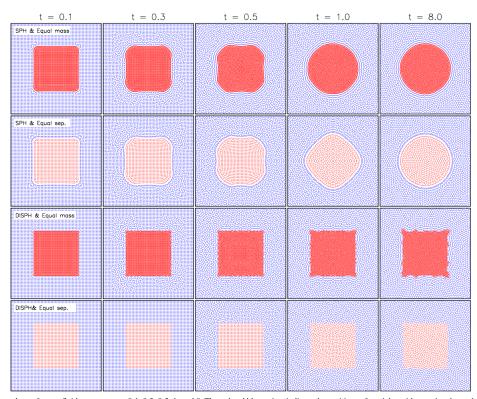


Figure 5. Snapshots of a two-fluid system at t=0.1,0.3,0.5,1, and 8. The red and blue points indicate the positions of particles with $\rho=4$ and $\rho=1$, respectively. The upper two rows are the results of the standard SPH, while the lower two rows are those of DISPH. The first and third rows show the results of the equal-mass cases, whereas the second and fourth rows show those of the equal-separation and unequal-mass cases. (A color version of this figure is available in the online journal.)

Figure 1: Saitoh and Makino (2013) © Figure 5.

それ以外で Y を一定を連続にするのはほとんど無理である.なぜなら,粒子がかなり動けば ΔV は粒子毎に代わってしまうからである.ほとんどの場合で Y は不連続になり得てしまうが, ρ よりかは (連続な圧

力を介してY は決まるので)不連続度が小さく、SSPH よりマシである*1.

1.3 RTI シミュレーションのプログラム

現在, 作成中…(果たして JpGU までに間に合うか?)

2 タイムステップに対する考察

RTI シミュレーションがなかなか上手くいかない。というのは、音波が大きすぎて CFL 条件が厳しいのと、粘性率 $\eta \approx 10^{-1\sim 1}$ Pas では音波が消せない (粘性拡散のタイムスケールが CFL 条件とかけ離れすぎ ている) という問題を解決できていないからだ。慣性変化法 [Takeyama et al., 2017] や速抑制法を使おうと思ったが、「状態方程式を維持したまま硬さのみを変える」という方法は色々考えるべき問題がありそうで*²、JpGU までにとても間に合いそうにない。しかし、困ったことに前回 (1 月くらい)RTI が上手くいったように見えたパラメーター (粘性や系の大きさ、粒子数など) を少しでも変えると、直ぐに計算が発散する、もしくは、音波がほとんど消えず RTI が起こらなくなるということに最近気づいた。かなり人工的ではあるが、音速を調整しなくとも粘性を変えるだけで済む方法を幾つかの条件から考えてみた。すると、後から分かるように前回のパラメーターの選択が非常に上手かったことに気づいた (以下のような計算をしていないと思うので、これは不幸中の幸いである)。

2.1 不変的な値と自分で調整できる量

まず、音速は変えたくないとする。なぜなら、ここでの目標は「状態方程式に関係する量は変化させないので、RTI を観測できる条件を探す」ことだからだ。ということで音速 c は

$$c = \sqrt{\left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_S} = \sqrt{\frac{K_S}{\rho}} \approx \sqrt{\frac{K_T}{\rho}} \approx \underline{10^4 \text{ m/s}}$$
 (8)

で固定しておく*3.次に、自分で調整できる量を決める.これは次の3つである.

- 系の長さ…L (正方形の箱型モデルなのでLは1辺の長さを示す)
- 正方形の1辺に入る粒子数…n
- 粘性率…n

ここで、グリッド間隔は初期粒子間距離 Δx と同じと考えると $\Delta x = L/n$ である.

2.2 タイムステップ Δt の制約条件

次の3つのタイムステップのうち、最も短いものが系のタイムステップを制約する.

^{*}1 SSPH では,(2) 式ような恒等式を ρ を用いて行う.

^{*2} 音速を変えるということは K_T を変えることになるが、これのみを勝手に変えることに果たして物理的意味があるのか? 状態方程式はそのまま使うわけなので、 K_T を人工的にしてしまうと、状態方程式も人工的になってしまいそうな気がする. Takeyama et al. (2017) では音速は変えつつ、熱対流に重要そうな無次元量は変えないように上手くしている.しかし、鉛直方向の圧縮性を考慮した RTI では何が重要な量となるのか、まだ検討がついていないため、どの量は変えないように調整するべきか分かっていない. JpGU が終わってからゆっくり考えることにする.

 $^{^{*3}}$ ここで $K_S = c_p/c_V K_T$ を想定した。また, $K_T \approx 500 \times 10^9 \,\mathrm{Pa}$, $\rho_{\mathrm{met}} \approx 7000 \,\mathrm{kg/m^3}$ $\rho_{\mathrm{sil}} \approx 3000 \,\mathrm{kg/m^3}$ とした.

• CFL 条件

$$\Delta t^{\text{CFL}} \approx \frac{\Delta x}{c}$$
 (9)

• 運動量拡散時間(粘性拡散時間)

$$\Delta t^{\text{mom}} \approx \frac{(\Delta x)^2}{\nu} \approx \frac{\rho_{min}(\Delta x)^2}{\eta}$$
 (10)

• 熱拡散時間

$$\Delta t^{\rm th} pprox \frac{(\Delta x)^2}{\kappa} pprox \frac{\rho_{min} c_p(\Delta x)^2}{k}$$
 (11)

ただし、熱拡散時間に関係する量は変えないので、CFL 条件に比べてかなり大きいままで、今はほとんど 関係ない.

2.3 希望する条件

音速を変えないまま RTI を少ないステップ数で実現するために必要な条件は次の二つである.

条件(1) 音波をさっさと消すための条件 → 音波のタイムスケール ≈ 粘性拡散のタイムスケール

$$\Delta t^{\rm CFL} \approx \Delta t^{\rm mom} \tag{12}$$

条件 (2) CFL 条件のタイムステップでも粒子の動く様子が見えるための条件

$$\Delta t^{\text{CFL}} N \approx \tau \tag{13}$$

ここで,N は自分で決める総ステップ数で, τ は終端速度で系の代表長さ L を移動するのにかかる時間である.

以下で終端速度Vを見積もる. 運動方程式のy成分を取り出すと

$$\frac{Dv}{Dt} = -\frac{1}{\rho} \frac{dp}{dy} + \frac{\eta}{\rho} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) v - g \tag{14}$$

また p のプロファイルは第 0 近似的には静水圧とすると $dp/dy = -\rho_0 g$ であるから

$$\frac{Dv}{Dt} = -\frac{1}{\rho} \left(-\rho_0 g \right) + \frac{\eta}{\rho} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) v - g \tag{15}$$

終端速度Vを考えると

$$V \approx \frac{(\Delta x)^2 \Delta \rho g}{2\eta} \tag{16}$$

となる.ここで $\Delta \rho$ は $\Delta \rho = \rho - \rho_0$ であり,これはある深さでの基準密度 (静止状態の密度) と,ある時刻におけるその深さでの密度の差を示す.RTI で金属とシリケイトが入れ替わった場合を典型的な $\Delta \rho$ とすると $\Delta \rho \approx 10000~{\rm kg/m^3} - 3000~{\rm kg/m^3} \approx 7000~{\rm kg/m^3}$ である. τ を計算すると

$$\tau = \frac{L}{V} \approx \frac{2\eta L}{(\Delta x)^2 \Delta \rho g} \tag{17}$$

2.4 fine-tuning による変数の決め方

(12),(13),(17) 式を用いて式変形を重ねる. まず(12) 式から

$$\eta \approx c\rho_{min}\Delta x \tag{18}$$

を得る. 次に(13)式と(17)式から

$$\frac{\Delta xN}{c} = \frac{2\eta L}{(\Delta x)^2 \Delta \rho g} \tag{19}$$

この二式を組み合わせると

$$N \approx \frac{2c^2 \rho_{min} n^2}{L\Delta \rho g} \tag{20}$$

を得る.ここで $\Delta x=L/n$ を用いた. $c\approx 10^4~\mathrm{m/s}, \rho_{min}\approx 3000~\mathrm{kg/m^3}, \Delta\rho\approx 7000~\mathrm{kg/m^3}, g\approx 10~\mathrm{m/s}$ を代入すると

$$N \approx \frac{2 \cdot (10^4 \text{ m/s})^2 \cdot 3000 \text{ kg/m}^3 n^2}{L \cdot 7000 \text{ kg/m}^3 \cdot 10 \text{ m/s}} \approx \frac{10^7 \text{ m} \cdot n^2}{L}$$
(21)

となる.この式は,希望する条件 (1),(2) を同時に満たす場合の (N,n,L) の関係を与える.つまり,自分で調整できる一辺の長さ L と一辺の粒子数 n を決めれば,必要な総ステップ数 N が自ずと決まる.ここで次元チェックのため SI 単位を敢えて陽に書いたが,この時点でほとんど自明になったので以降は単位を省略する.

2.5 数值実験

例えば n=10, つまり, 一辺に 10 個の粒子を配置する場合を考える. この時 (20) 式は

$$N \approx \frac{10^7 \times 10^2}{L} \approx \frac{10^9}{L} \tag{22}$$

となる. 地球コア形成の場合, L はせいぜい $100~\mathrm{km}$ または $1000~\mathrm{km}$ のオーダーなので

$$N \approx \frac{10^9 \text{ m}}{100 \times 10^3 \text{ m}} \approx 10^4 \text{ Aryr} \quad \text{s.t.} \quad \frac{10^9 \text{ m}}{1000 \times 10^3 \text{ m}} \approx 10^3 \text{ Aryr}$$
 (23)

となり、10000 ステップのオーダーは厳しいが、1000 ステップのオーダーぐらいなら頑張って計算できる. もしも n=100 とすると

$$N \approx \frac{10^7 \times 10^4}{L} \approx \frac{10^{11}}{L} \tag{24}$$

同様にLを100 kmまたは1000 kmのオーダーで取ると

$$N \approx \frac{10^{11} \text{ m}}{100 \times 10^{3} \text{ m}} \approx 10^{6} \text{ Aryr} \quad \text{s.t.} \quad \frac{10^{11} \text{ m}}{1000 \times 10^{3} \text{ m}} \approx 10^{5} \text{ Aryr}$$
 (25)

となり、これはコストが大きすぎてほとんど計算不可能である。ということで、今考えている正方形箱型 RTI 問題の場合、 $n\approx 10$ かつ $L\approx 1000$ km のオーダーなら音速を変えることなく、解くことができる見積もりになる。大事なことは、粒子数は n は小さい方が良く、系の代表長さ L は大きい方が RTI を観測しやすくなることである。

前回上手くいったパラメーターを見てみると $n=75, L=1500~{\rm km}, \eta=10^{11}~{\rm Pa~s}$ を選んでいた. 今の見積もりだと, L,n を指定すれば適切な人工的 η が (18) 式より計算できる. このパラメーターセットが,上記の計算とどのような関係があるのか調べてみる. まず, 粒子間距離 Δx は

$$\Delta x = \frac{L}{n} = \frac{1500 \times 10^3 \text{ m}}{75} = 2 \times 10^4 \text{ m}$$
 (26)

この時、CFL 条件から決める時間ステップは

$$\Delta t^{\text{CFL}} = \frac{\Delta x}{c} \approx \frac{2 \times 10^4 \text{ m}}{10^4 \text{ m/s}} \approx 2 \text{ s}$$
 (27)

である. 条件(1)から決める人工的な粘性は

$$\eta \approx c\rho_{min}\Delta x \approx 10^4 \text{ m/s} \times 3 \times 10^3 \text{ kg/m}^3 \times 2 \times 10^4 \text{ m} \approx 6 \times 10^{11} \text{ Pa s}$$
 (28)

この値は前回選んだ粘性と同じオーダーである. この時,運動量拡散時間は

$$\Delta t^{\text{mom}} = \frac{(\Delta x)^2}{\nu} \approx \frac{(2 \times 10^4 \text{ m})^2 \times 3 \times 10^3 \text{ kg/m}^3}{6 \times 10^{11} \text{ Pa s}} \approx \underline{2 \text{ s}}$$
 (29)

つまり, $\Delta t^{\text{CFL}} \approx \Delta t^{\text{mom}}$ となって**音波がさっさと消える条件を満たしていることが分かる**. また,予想される終端速度は(16) 式から

$$V \approx \frac{(\Delta x)^2 \Delta \rho g}{2\eta} \approx \frac{(2 \times 10^4 \text{ m})^2 \times 7 \times 10^3 \text{ kg/m}^3 \times 10 \text{ m/s}^2}{2 \times 6 \times 10^{11} \text{ Pa s}} \approx 20 \text{ m/s}$$
 (30)

となる. そこで、系全体を移動するのにかかる典型的な時間 τ は

$$\tau \approx \frac{L}{V} \approx \frac{1500 \times 10^3 \text{ m}}{20 \text{ m/s}} \approx 7 \times 10^4 \text{ s} \approx \underline{10^4 \text{ s}}$$
(31)

となり、CFL 条件のタイムステップで進める場合、必要な総ステップ数 N は (13) 式から

$$\Delta t^{\text{CFL}} N \approx 10^4 \,\text{s} \quad \Rightarrow \quad N \approx 5 \times 10^3 \,\text{s}$$
 (32)

と求まる. これは (22),(23) 式から予想されるステップ数と同じオーダーであり, 計算可能なステップ数である (結構大変だけども).

2.6 考察と結論

かなり人工的ではあるが、音速を変えずに RTI を見るための条件を調べてみた. $n\approx 10$ かつ $L\approx 1000~{\rm km}$ のオーダーでモデルを作れば、一応粘性を変えるだけで問題解決になりそうである. しかし、これは根本的な解決とはなっておらず、かなり ad hoc 的方法である点に注意. その一方で、この調整されたパラメーターで上手く計算できたとなれば、自分の定式化が物理的意味を反映する形になっていることを示唆するので happy である.

References

- [1] Hosono, Saitoh and Makino (2013) Density-Independent Smoothed Particle Hydrodynamics for a Non-Ideal Equation of State, *Publications of the Astronomical Society of Japan*, **65**, 108
- [2] Marrone, Antuono, Colagrossi, LeTouzé and Graziani (2011) δ -SPH model for simulating violent impact flows, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **200**, 13-16, 1526-1542
- [3] Asai, Fujimoto, Tanabe and Beppu (2013) Slip and No-Slip Boundary Treatment for Particle Simulation Model with Incompatible Step-Shaped Boundaries by Using a Virtual Maker, *Transactions of the Japan Society for Computational Engineering and Science*, **2013**, 20130011
- [4] Takeyama, Saitoh and Makino (2017) Variable inertia method: A novel numerical method for mantle convection simulation, *New Astronomy*, **50**, 82-103