

# カーネルなしの SPH

牧野淳一郎

December 30, 2007

## Abstract

ここでは、通常の高シアンやスプラインカーネルを使わずに大きな密度変化に自動的に対応できる SPH 法の可能性を検討する。

## Contents

1	はじめに	2
2	べき乗相互作用	2
3	質量、エントロピーが違う粒子	4
4	人工粘性	5
5	感覚的な疑問	5
6	まとめ	5

# 1 はじめに

通常の SPH では、粒子間相互作用の重みづけはカーネル関数  $W(r, h)$  によっている。この関数で通常使われるのはスプラインかガウシアンであるが、どちらも特徴的なスケール長  $h$  をもつ。このため、平均粒子間距離が  $h$  の程度でないと基本的に計算が上手くできない。 $h$  が粒子間距離よりはるかに大きいと、計算量が増えるし折角沢山粒子があるのに空間分解能がでない。逆に  $h$  が粒子間距離より小さいと、空間微分が計算できなくなる。このため、天文の問題のような密度が動的に大きく変わる問題では、 $h$  を適応的に変えることが必須となる。

しかし、この、適応的なスムージングには、理論的、数値的ともに難しい問題がある。理論的な問題は、カーネル関数が粒子分布に依存するために、粒子間相互作用が単純な 2 体力ではなく本質的に多体力になり、定式化の数学的な意味が明らかではなくなることである。スムージング長が時間変化するので、物理量の時間変化にはスムージング長の時間変化の項も形式的にははいつてくる。スムージング長の時間変化自体は密度変化に依存するので、結局密度変化に密度自体に依存する項がはいつてくるという直観的には奇妙な定式化になっていることになる。

しかも、この項の入りかたはスムージング長を変化させる方法自体に依存する。最近使われることが多い、スムージング長を厳密に一定の粒子数が入るように変化させる方式ではスムージング長の時間変化の微分は不連続になる(粒子が入れ替わる時に)ので、時間変化の項を計算可能かどうかが自明ではない。

数値的には、密度を計算しないとスムージング長がきまらないので、結局スムージング長はインプリシットに決まることになり計算が大変である。

では、スムージング長を変化させないでどのような密度変化にも対応できる粒子法による流体表現はありえないのか、という問題を検討することが本稿の目的である。

## 2 べき乗相互作用

SPH 法での運動方程式、すなわちオイラー方程式

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\frac{1}{\rho}\nabla p \quad (1)$$

の SPH 表現は、

$$\frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = -\sum_j m_j \left[ \frac{p_i}{\rho_i^2} + \frac{p_j}{\rho_j^2} + \Pi_{ij} \right] \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_i} W(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j, h) \quad (2)$$

のようなものが普通である。ここで  $\mathbf{x}_i, \mathbf{v}_i, m_i, p_i, \rho_i$  は粒子  $i$  の位置、速度、質量、圧力、密度であり、 $\Pi_{ij}$  は人工粘性項である。

ここで、カーネル関数  $W$  は空間全体で積分すれば 1 になるような関数である。SPH 法の定式化は、基本的に粒子が無限に沢山あり、密度や物理量の変化の空間スケールがカーネル関数のサイズスケールよりも大きい時に空間微分がカーネルの微分と空間分布の畳み込みで  $h^2$  程度の誤差で表現できる、というものである。

ここでは、SPH 的な空間微分概念からは離れて、相互作用がスケールフリーであってなおかつオイラー方程式の近似になっているようなものは構成可能か? という観点での検討を行う。

人工粘性項は後で考えることにして、まず圧力勾配項だけを検討しよう。式 2 は、要するに

$$\frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \sum_j m_j F(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j, \dots)(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \quad (3)$$

というものであり、 $F$  は粒子の相対位置ベクトルと密度、圧力の関数である。圧力の空間微分であるので、圧力に対して線形な式である必要があり、式 2 では両方の粒子の圧力を  $\alpha$  倍にすれば加速度項も  $\alpha$  倍になる。

Table 1: 単原子理想気体 ( $\gamma = 5/3$ ) の場合の圧力項のべき

空間次元	べき指数 $\beta$
1	5/3
2	7/3
3	3

ここでは、しかし、スケールフリーな相互作用を考えたい。このため、密度、圧力といった、SPH 近似で計算しないと求まらない値に加速度項が依存するのではなく、質量、内部エネルギーやエントロピーといった粒子が元々もっている量だけから圧力項を計算できないか、ということを検討する。特に、エントロピーは人工粘性や輻射等の他の物理がなければ保存する量であるので、エントロピー一定の時に状態方程式、圧力項を満たす相互作用を考える。

今、状態方程式は単純な断熱理想気体で  $p\rho^{-\gamma} = \text{const.}$  であり、気体は等エントロピーである場合を考える。空間を  $d$  次元とする。粒子配置をそのままに、一様に  $\alpha$  倍に空間分布を膨張なり収縮させたとしてよう。密度は  $\alpha^{-d}$  倍になるので、圧力は  $\alpha^{-\gamma d}$  倍になる。ここで、圧力は単位面積当りの力だが、粒子間の相互作用の実効的な「面積」 $S$  は  $\alpha^{d-1}$  になっているので、相互作用は  $F = pS \propto \alpha^{-[(\gamma-1)d+1]}$  ということになる。

結局、流体が等エントロピーで粒子が等質量の時には、圧力項は

$$\frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \sum_j -Cm_j \frac{\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j}{|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|^{\beta+1}} \quad (4)$$

となる。ここで

$$\beta = (\gamma - 1)d + 1 \quad (5)$$

である。

1 次元の時にこれが本当にオイラー方程式の近似になっているだろうか？ある粒子分布があった時に、それを  $\alpha$  倍したとしてよう。圧力は  $\alpha^{-\gamma}$  倍になり、空間スケールが  $\alpha$  倍になっているので空間微分は  $\alpha^{-(\gamma+1)}$  倍である。密度は  $1/\alpha$  であるから、結局圧力勾配項は  $\alpha^{-\gamma}$  になる。つまり、単純に圧力だけから導いた上の値と一致する。多次元でも同様で、圧力は  $\alpha^{-\gamma d}$  倍になり、空間スケールが  $\alpha$  倍になっているので空間微分は  $\alpha^{-(\gamma d+1)}$  倍である。密度は  $\alpha^{-d}$  であるから、結局圧力勾配項は  $\alpha^{-\gamma d+d-1}$  になる。つまり、べき乗相互作用はスケールフリーであるという要求は満足している。

表 2 からわかるように、1、2 次元ではべき指数  $\beta$  は  $d$  より大きいので、相互作用範囲を無限に大きくとった時に圧力項が発散するようなことはない。

しかし、3 次元では圧力項が形式的には発散する。例えば、ショックチューブ問題のような右側と左側で圧力が違うものがそれぞれ半空間に無限に広がっている状況を考えて、力が距離の 3 乗に反比例では積分区間のとりかたで答が変わってしまう。

これを防ぐためには、べき指数を 3 より大きくできればよい。が、それでは状態方程式が変わってしまう。

このような問題が起こるのは、本質的には、近距離力である流体粒子間の相互作用を遠距離力で無理矢理表現しようとしたためである。原子からなる気体の物理過程を考えると、大雑把にいてその粒子同士が物理的に衝突することが圧力の起源である。従って、大きさをもった粒子同士で、その間に他の粒子があるのに圧力項への寄与が発生してしまうのは物理的な描像として奇妙である。また、断熱の状態方程式であれば  $\gamma = 5/3$  だが、等温にすると  $\gamma = 1$  なので空間次元に無関係にうまくいかないことになってしまう。

空間 1 次元の場合には話は簡単で、隣合う粒子間以外では相互作用がないことにすればよい。つまり、間に粒子があれば相互作用しない、とすればよい。しかし、多次元の場合には「間に粒子がある」というのは厳密には定義できない。

厳密には定義できないが、しかし、それにあたるような遮蔽関数的なものを定義することはできる。例えば、2 つの粒子を直径の両端とするような球を考えて、その中にある粒子の数を数えればよい。単純な球だ

と微分の不連続が発生するが、ガウシアンや適当な単峰関数との畳み込みとかにすればそういう問題はおこらない。

とはいえ、こうなると結局多体の相互作用になってしまうので当初に期待したような純粋に 2 体間相互作用であることによる定式化の厳密性といったことは失われてしまう。失われてしまうから、こんな検討には意味がないだろうか？

なんらかの遮蔽関数を導入したものであっても、べき乗相互作用による圧力項は通常の SPH カーネル微分によるものに比べると、近接する 2 体間の力自体が状態方程式を自動的に満たすというメリットがある。通常の SPH では、力はカーネルの微分のみによるので近づいたからといって斥力が大きくなるとは限らず、むしろカーネルサイズに比べて近いところでは斥力が 0 に近づく。

また、SPH の良く知られた問題点の一つは、密度の不連続面での振る舞いが良くないということである。密度が低い側の粒子は大きなカーネルサイズをもつために、密度が高い側に広がったカーネルになる。ここでカーネル内の粒子数が一定といった制限をつけると密度が低い側の微分への寄与が不足するし、そうでなくても密度が高い側からの寄与が過大に評価されがちになる。

これに対して、粒子間相互作用毎に遮蔽を考慮する方法では、実効的にカーネルが非等方になる。つまり、密度が低い側では遮蔽のスケールが自動的に大きくなり、密度が高い側では小さくなるので、密度が低い側での圧力が高い側の粒子分布に影響されにくくなるはずである。

粒子間相互作用毎に遮蔽関数を適用する方法の原理的な問題点は、相互作用の計算量が膨大になることである。しかし、ハードウェアで同程度の効率ができるならば流体相互作用の計算は重力よりも計算量自体は少ないし、殆どの粒子間相互作用は遮蔽されるわけなので計算しなくてよいものを高速に見出せば本当は大した計算量にならないはずである。

なお、遮蔽関数を導入するのは、直観的にはポロノイ分割をつかって流体粒子間の相互作用面を決定するのと同じような意味をもつ。ポロノイ分割ではまたその厳密な意味がわかりにくい、本稿で提案する方法ではあくまでも 2 粒子間相互作用なので比較の意味ははっきりしているような気がする。

### 3 質量、エントロピーが違う粒子

質量当りのエントロピーが同じで質量が違う粒子との相互作用はどう扱うべきだろうか？ 通常の SPH と違ってカーネルや、それに伴う連続分布の存在を仮定しないので、ミクロスコピックな描像から相互作用を決める必要がある。とはいえ、基本的には、エントロピーが同じで質量も同じ場合の式から適当に対称化することになる。

質量当りのエントロピーが同じ時には、質量密度を一定にしたまま粒子間距離を  $\alpha$  倍にすると粒子の質量は  $\alpha^d$  倍になり、粒子間距離は  $\alpha$  倍になる。この時、2 体間の力は  $\alpha^{d-1}$  倍になっている必要がある。つまり、式 4 の  $C$  が  $C = cm^\eta$  となっているとすると

$$F_{ij} = -cm^{\eta+2}\alpha^{-\beta} \propto \alpha^{d-1} \quad (6)$$

から

$$\eta d + 2d - \beta = d - 1 \quad (7)$$

$$\eta = \frac{\beta - d - 1}{d} = \gamma - 2 \quad (8)$$

というようなものがでてくる。つまり、 $F \propto m^\gamma$  である。これは直観的に自然だが、どのように対称化するべきだろうか？  $m_i \gg m_j$  の極限では、相互作用に関係する面積のようなものは  $m_j^{(d-1)/d}$  と考えられるので、圧力項の一つの形は

$$Cm_j = c(m_i m_j)^{(d-1)/d} (m_i^\xi + m_j^\xi) \quad (9)$$

ここで

$$\xi = \gamma - 2 + d/2 \quad (10)$$

となる。エントロピーが違う粒子も、それが満たす状態方程式が同じ質量が違う粒子と同じ力になる、とすることで相互作用を導出できる。

## 4 人工粘性

通常バルク粘性であれば、距離についてのスケージングが成り立つという条件から通常の Gingold-Monaghan のバルク粘性と同様な形で自然に粘性項を表現できる。Balsara の人工粘性のようなシア補正も、単純には速度の発散や回転を適当に定義すればよいはずである。

## 5 感覚的な疑問

本稿で検討したスケールフリーな粒子間相互作用では、通常の SPH と違って2つの粒子が無限に近づくことがそもそもできない。この時に、シア流をちゃんと表現できるのだろうか？2つの粒子がすれちがうと必ず横向き力が発生して、粒子の再配置が起こる。しかし、遮蔽を考えなければ粒子間の力は保存力であることを考慮すると、力が変わるタイムスケールが音速が粒子間距離を伝える時間スケールよりも十分に長いなら、その効果は断熱的で粒子の再配置は運動エネルギーや散逸の生成を伴わない「かもしれない」。

これは実装してみないとなんとも言えない。

## 6 まとめ

本稿では、圧縮性流体に対する粒子法で、粒子間にベキ乗則による反発力を与えることで可変スムージングサイズによるカーネルを使わないで自然に大きな密度変化に適応的に振る舞うスキームを構成する可能性を検討した。

残念ながら、単純な2体力では、断熱指数  $\gamma$  が2よりも小さい流体を自然には表現できず、ベキ乗相互作用を使ってもなんらかの長距離力のカットオフが必要になる。しかし、このような粒子間相互作用ベースの表現では、相互作用毎に独立にカットオフを評価することで、非等方カーネルに相当するものを自然に表現できる可能性がある。