

研究室セミナー 2012/1/25

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

# 今日のお話

- 例のSPHおさらい
- 非理想気体むけ定式化
  - 定式化
  - エネルギー保存の問題
- まとめ

# SPH の基本式おさらい

## 密度の推定

$$\rho(\boldsymbol{x}) = \sum_j m_j W(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_j), \quad (1)$$

## ある物理量 $f$ の推定

$$\langle f \rangle(\boldsymbol{x}) = \int f(\boldsymbol{x}') W(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}') d\boldsymbol{x}'. \quad (2)$$

# 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

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

を使って、さらにもうちょっと近似して

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

# 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

$$\frac{1}{\rho}\nabla P = \frac{P}{\rho^2}\nabla\rho + \nabla\frac{P}{\rho^2}. \quad (5)$$

を使って対称化すると

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

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箇所では  $\rho$  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

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

$$\frac{1}{\rho} \nabla P = \frac{P}{\rho^2} \nabla \rho + \nabla \frac{P}{\rho^2}. \quad (8)$$

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



# 対策

「根本的」な理由:

$\rho$  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い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:

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

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見たことがない)

# 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

$$U_j = m_j u_j, \quad (10)$$

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

$$q = \sum_j U_j W(x - x_j). \quad (11)$$

で定義する。そうすると、他の物理量のカーネル推定は

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

空間微分は

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

## 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

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

速度の発散の SPH 表現は、今回は

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

$P/\rho$  だが、圧力は

$$P_i = (\gamma - 1)q_i. \quad (16)$$

## 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、左辺が単位質量当たりだから。これを  $U$  の微分に直すには、形式的には

$$\rho_i = \frac{m_i q_i}{U_i}. \quad (17)$$

という関係式を使う。そうすると、エネルギー方程式が

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

# 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

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

で、これが運動エネルギー変化

$$\frac{m_i m_j}{m_i + m_j} (\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j) (\dot{\mathbf{v}}_i - \dot{\mathbf{v}}_j). \quad (20)$$

と逆符号で絶対値が等しいので、速度変化が

$$(\dot{\mathbf{v}}_i - \dot{\mathbf{v}}_j) = -(\gamma - 1) \frac{m_i + m_j}{m_i m_j} U_i U_j \left( \frac{1}{q_i} + \frac{1}{q_j} \right) \nabla W(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j), \quad (21)$$

# 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

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

- 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。



# 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

内部エネルギーの代わりに、「圧力に粒子当りの体積を掛けた量」 $pV$  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。

# 非理想気体への一般化 (1)

粒子当りの  $pV$  項を  $Y_i$  と書く。この量の空間密度、つまり圧力を

$$p = \sum_j Y_j W(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_j). \quad (23)$$

で定義する。そうすると、他の物理量のカーネル推定は

$$\langle f \rangle(\boldsymbol{x}) = \sum_j \frac{Y_j f(\boldsymbol{x}_j)}{p(\boldsymbol{x}_j)} W(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_j), \quad (24)$$

空間微分は

$$\langle \nabla f \rangle(\boldsymbol{x}) = \sum_j \frac{Y_j f(\boldsymbol{x}_j)}{p(\boldsymbol{x}_j)} \nabla W(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_j). \quad (25)$$

## 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。

$$\frac{du}{dt} = -\frac{P}{\rho} \nabla \cdot v. \quad (26)$$

速度の発散の SPH 表現は、今回は

$$\nabla \cdot v = \sum_j (v_i - v_j) \frac{Y_j}{p_j} \nabla W(x - x_j). \quad (27)$$

$P/\rho$  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、左辺が単位質量当たりだから。これを  $U$  の微分に直すには、形式的には

$$\rho_i = \frac{m_i p_i}{Y_i}. \quad (28)$$

という関係式を使う。そうすると、エネルギー方程式が

$$\dot{U}_i = \sum_j \frac{Y_i Y_j}{p_j} (v_i - v_j) \nabla W(x_i - x_j). \quad (29)$$

# 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

$$\dot{U}_{ij} + \dot{U}_{ji} = Y_i Y_j \left( \frac{1}{p_i} + \frac{1}{p_j} \right) (v_i - v_j) \nabla W(x_i - x_j). \quad (30)$$

で、これが運動エネルギー変化

$$\frac{m_i m_j}{m_i + m_j} (v_i - v_j) (\dot{v}_i - \dot{v}_j). \quad (31)$$

と逆符号で絶対値が等しいので、速度変化が

$$(\dot{v}_i - \dot{v}_j) = -\frac{m_i + m_j}{m_i m_j} Y_i Y_j \left( \frac{1}{p_i} + \frac{1}{p_j} \right) \nabla W(x_i - x_j), \quad (32)$$

# 一般化(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

$$m_i \dot{v}_i = - \sum_j Y_i Y_j \left( \frac{1}{p_i} + \frac{1}{p_j} \right) \nabla W(x_i - x_j). \quad (33)$$

- 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
- ではこれでよいのか？
- $Y$  ってどうやって計算すんの？

# 一般化(6)— $Y$ の方程式

$Y = pV$  なんだから、エネルギー方程式の代わりにこっち計算すればいいのではないか？

$$\frac{dY}{dt} = Y \left( \frac{dV}{V dt} + \frac{dp}{p dt} \right) \quad (34)$$

ここで、

$$\frac{dV}{V dt} = \nabla \cdot v \quad (35)$$

$$\frac{d \log p}{d \log V} = -\gamma \quad (36)$$

ここで  $\gamma$  は局所的な比熱比

# 一般化(7)— $Y$ の方程式続き

結局

$$\dot{Y}_i = Y_i(\gamma_i - 1) \sum_j \frac{Y_j}{p_j} (v_i - v_j) \nabla W(x_i - x_j). \quad (37)$$

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)。

- なんとなく不思議なこと: 比熱比が一定でないときエネルギー保存が保証されない? 数値積分の精度ではもちろん保存するが、それでは不足な気がする。
- 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  $Y$  を補正する?



# 人工粘性、加熱、冷却はどうすんの

- 運動方程式は従来通り
- エネルギー方程式(というか、、、)には、状態方程式を通して圧力変化としてはいる

# まとめ

- 例の SPH の非理想気体への一般化を一応導出した
- $pV$  にあたる項を積分する。理想気体なら内部エネルギーと同じものなので一般化ではある
- エネルギー保存が自然には成り立たないような気がする。なんらかの補正が必要かも。

# 2012/1/27 追記(1)

原理的には以下の手順で  $U$  と  $Y$  の矛盾を解消できると考えられる。

状態方程式が以下の形で陽的にあたえられているとしよう。

$$p = p(u, \rho) \quad (38)$$

そうすると、これは粒子の量として、 $p, U$  が与えられると  $Y$  が計算可能ということの意味する。つまり

$$Y_i = f(p, U_i) \quad (39)$$

という形で計算できる。但し、ここで  $p$  は

$$p = \sum_j Y_j W(x - x_j). \quad (40)$$

## 2012/1/27 追記(2)

なので、 $Y$ ,  $p$  を求めるのに以下の反復をする。

$$Y_{i,new} = f(p_{i,old}, U_i) \quad (41)$$

$$p_{i,new} = \sum_j Y_{j,new} W(x - x_j). \quad (42)$$

最初の  $p$  は  $Y$  を時間積分して求めたものを使う。

収束の速度は1ステップでどれくらい  $\gamma$  が変わるかで決まるが、一般には十分速くて反復といっても1度ですむのではないかと想像する。実験は必要。