

# Density-Independent SPH 法の宇宙論的シミュレーションコードへの 実装

小野間 章友 (筑波大学大学院 数理物質科学研究科)

## Abstract

宇宙物理学では、流体シミュレーションの手法として、Smoothed Particle Hydrodynamics method (SPH) がよく使われてきた。従来の手法では接触不連続面が解けないという大きな問題点が存在した。しかし、近年 Density-Independent SPH(DI-SPH) と呼ばれる新しい SPH の Scheme が提案された。(Saitoh T. R. and Makino J 2013)

ただし、本研究では、Lagrangian から導出された、一般的な定式化を採用している。(Hopkins, P.F. 2013) 今回はこの定式化と実装方法、従来の SPH(Standard SPH)、DI-SPH でのテスト計算の結果を示す

## 1 Introduction

SPH 法は、粒子法による流体計算の手法で、粒子の周りに kernel 関数で重みを持たせて積分することで、物理量の平均値を求める。つまり、ある粒子の kernel 内の物理量  $f(x)$  の平均は、

$$\langle f(\mathbf{x}) \rangle = \int f(\mathbf{x}') W(\mathbf{x} - \mathbf{x}'; h) d\mathbf{x}' \quad (1)$$

と表す。また、物理量の微分は、部分積分を使って、

$$\begin{aligned} \langle \nabla f(\mathbf{x}) \rangle &= \int W(\mathbf{x} - \mathbf{x}'; h) \nabla' f(\mathbf{x}') d\mathbf{x}' \\ &= \int \nabla' (W(\mathbf{x} - \mathbf{x}'; h) f(\mathbf{x}')) - \\ &\quad \int f(\mathbf{x}') \nabla' W(\mathbf{x} - \mathbf{x}'; h) d\mathbf{x}' \end{aligned}$$

第一項は発散定理より、 $\int_S W(\mathbf{x} - \mathbf{x}'; h) f(\mathbf{x}') \mathbf{n}' dS'$  となる。 $S$  を kernel の表面と考えると、後述のように kernel 関数は kernel の表面では 0 となるので、結局以下のようなになる。

$$\begin{aligned} \langle \nabla f(\mathbf{x}) \rangle &= - \int f(\mathbf{x}') \nabla' W(\mathbf{x} - \mathbf{x}'; h) d\mathbf{x}' \\ &= \int f(\mathbf{x}') \nabla W(\mathbf{x} - \mathbf{x}'; h) d\mathbf{x}' \quad (2) \end{aligned}$$

kernel 関数は、kernel 半径 (smoothing length)  $h$  で 0 になるような関数を選ぶ。今回は、SPH でよく用い

られている 3 次元の cubic spline 関数を選んだ。

$$W(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|, h) = \frac{1}{\pi h^3} \begin{cases} 1 - \frac{3}{2}s^2 + \frac{3}{4}s^3 & (0 \leq s < 1) \\ \frac{1}{4}(2-s)^3 & (1 \leq s < 2) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases} \quad (3)$$

ここで、 $s \equiv |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|/h$  である。

ただし、 $\nabla W$  の計算のときには少し注意が必要である。このまま kernel 関数を微分をすると、 $s$  が小さいような場合は tensile 不安定を起こす (近傍の粒子が過剰に近寄りすぎる) ため、 $s \leq \frac{2}{3}$  の場合は、kernel の微分にコアを残すような形 ( $s = 1$ ) とする。(Thomas, P. A. and Couchman, H. M. P. 1992)

SPH 法の特徴としては、同じ粒子の計算である N 体との相性が高い、ガリレイ不変、高密度部分が自動的に高解像度となる、といった利点がある。しかし一方で、離散化の体積要素  $\Delta V$  に密度を用いるとき、「密度は微分可能」という仮定の元で計算しているため、接触不連続面の計算がうまくできない。そのため、流体の不安定性の成長が抑制されるという問題点を持っている。

しかし、Density-Independent SPH では、離散化の体積要素に陽に密度を用いず、その代わりに状態方程式から体積要素を用いて離散化することで、接触不連続面も正しく解くことができる。

## 2 Formulation

全粒子の Lagrangian は、

$$L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N m_i \dot{\mathbf{r}}_i^2 + \sum_{i=1}^N m_i u_i \quad (4)$$

ここで  $u_i$  は単位体積あたりの粒子のエネルギーである。

熱力学第一法則より、断熱過程を考えると体積変化は

$$\left. \frac{\partial u_i}{\partial q_i} \right|_A = -\frac{P_i}{m_i} \frac{\partial(\Delta V_i)}{\partial q_i} \quad (5)$$

また、ポリトロピックなガスを仮定をすると、状態方程式は、

$$P_i = (\gamma - 1) u_i \left( \frac{m_i}{\Delta V_i} \right) \quad (6)$$

となる。

kernel 内の粒子数が一定となることを束縛条件として設定すると、束縛条件  $\phi_i(\mathbf{q})$  は、kernel の半径 (smoothing length) を  $h_i$  として、

$$\phi_i(\mathbf{q}) \equiv \frac{4\pi}{3} h_i^3 \frac{1}{\Delta \tilde{V}} - N_{\text{ngb}} = 0 \quad (7)$$

この  $\Delta \tilde{V}$  は、kernel の半径を求めるときに用いる体積要素で、Standard-SPH では、 $m_i/\rho_i$  が用いられている。

この束縛条件のもとでの Euler-Lagrange 方程式は、Lagrange の未定乗数  $\lambda_i$  を用いて、以下のように書ける。

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) - \frac{\partial L}{\partial q_i} = \sum_{j=1}^N \lambda_j \frac{\partial \phi_j}{\partial q_i} \quad (8)$$

$q_i = h_i$  の場合、つまり smoothing length に対する Euler-Lagrange 方程式を解くと、

$$\begin{aligned} -\frac{\partial L}{\partial h_i} &= m_i \frac{\partial u_i}{\partial h_i} = -P_i \frac{\partial \Delta V}{\partial h_i} \\ \frac{\partial \phi_i}{\partial h_i} &= 4\pi h_i^2 \frac{1}{\Delta \tilde{V}} \left( 1 - \frac{h_i}{3\Delta \tilde{V}} \frac{\partial \Delta \tilde{V}}{\partial h_i} \right) \end{aligned}$$

より、Lagrange の未定乗数  $\lambda_i$  は、

$$\lambda_i = -\frac{3P_i \Delta \tilde{V}^2}{4\pi h_i^3} \psi_i \quad (9)$$

$$\psi_i \equiv \frac{h_i}{3\Delta V} \frac{\partial \Delta V}{\partial h_i} \left( 1 - \frac{h_i}{3\Delta \tilde{V}} \frac{\partial \Delta \tilde{V}}{\partial h_i} \right)^{-1} \quad (10)$$

と求まる。今度は  $q_i = r_i$  について同様に計算して、上で求めた未定乗数を代入すると運動方程式は以下の通りになる。

$$m_i \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \sum_{j=1}^N P_j \left( \nabla_i \Delta V_j + \psi_j \nabla_i \Delta \tilde{V}_j \right) \quad (11)$$

次に、離散化した体積要素  $\Delta V$  を考える。あるスカラーの物理量  $x_i$  と、 $y_i$  を用いて、 $\Delta V_i = x_i/y_i$  とすると、(1) 式を離散化したものに、 $y_i$  を入れると、

$$y_i \equiv \sum_{j=1}^N x_j W_{ij}(h_i) \quad (12)$$

と、 $y_i$  を定義することができる。すると、(7) 式の中に出てくる  $\Delta V_i$  に関する微分は、

$$\frac{\partial \Delta V_i}{\partial h_i} = -\frac{x_i}{y_i^2} \frac{\partial y_i}{\partial h_i}, \quad \nabla_i \Delta V_j = -\frac{x_j}{y_j^2} \nabla_i y_j \quad (13)$$

となり、ここで  $y_i$  に関して微分可能であることが前提であることが分かる。これらを運動方程式に代入して計算すると、

$$m_i \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = -\sum_{j=1}^N x_i x_j \left[ \frac{P_i}{y_i^2} f_{ij} \nabla_i W_{ij}(h_i) + \frac{P_j}{y_j^2} f_{ji} \nabla_i W_{ij}(h_j) \right], \quad (14)$$

$$f_{ij} \equiv 1 - \frac{\tilde{x}_j}{x_j} \left( \frac{h_i}{3\tilde{y}_i} \frac{\partial y_i}{\partial h_i} \right) \left[ 1 + \frac{h_i}{3\tilde{y}_j} \frac{\partial \tilde{y}_j}{\partial h_i} \right]^{-1} \quad (15)$$

エネルギー方程式も、同様にして求められる。ここで問題となるのは、離散化の体積要素を作る、 $x_i$  と  $y_i$  をどのように選ぶかであり、ここが Standard-SPH と、DI-SPH の最大の違いとなる。

Standard SPH の場合は、以下の様な定式となる。(Springel V., Hernquist L. 2002)

まず、体積要素として、 $x_i = m_i$ 、 $y_i = \rho_i$  を使う。(今の場合、 $\Delta V = \Delta \tilde{V}$  とする)

すると、運動方程式は、

$$\frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = -\sum_{j=1}^N m_j \left[ \frac{P_i}{\rho_i^2} f_i \nabla_i W_{ij}(h_i) + \frac{P_j}{\rho_j^2} f_j \nabla_i W_{ij}(h_j) \right], \quad (16)$$

$$f_i \equiv \left[ 1 + \frac{h_i}{3\bar{\rho}_i} \frac{\partial \bar{\rho}_i}{\partial h_i} \right]^{-1}, \quad \bar{\rho}_i \equiv \sum_{j=1}^N m_j W_{ij}(h_i) \quad (17)$$

次に、Density Independent の場合の定式化を考える。流体を解くという観点から考えると、状態方程式から体積要素  $\Delta V$  は、

$$\Delta V_i = (\gamma - 1) \frac{m_i u_i}{P_i} \quad (18)$$

と、考えることができる。つまり、体積要素は粒子の持つ内部エネルギーを、エネルギー密度で割ったもので計算することになる。これなら、密度が微分可能でない場所も計算ができる。

さらに、smoothing length の  $h_i$  を見積もるときに使う  $\Delta \tilde{V}$  は、束縛条件を満たす計算（束縛条件を満たすまで iteration をかける）の収束性から、 $\Delta \tilde{V} = 1/\bar{n}$  という、kernel の数密度の逆数を用いる。（すなわち、 $\tilde{x} = 1, \tilde{y} = \bar{n}$  ということになる）

数密度の計算は、単純に、

$$\bar{n}_i = \tilde{y}_i \equiv \sum_{j=1}^N W_{ij}(h_i) \quad (19)$$

以上の条件で運動方程式を書くと、以下の様になる。

$$\begin{aligned} \frac{dv_i}{dt} = & - \sum_{j=1}^N (\gamma - 1)^2 m_j u_i u_j \left[ \frac{f_{ij}}{\bar{P}_i} \nabla_i W_{ij}(h_i) + \right. \\ & \left. \frac{f_{ji}}{\bar{P}_j} \nabla_i W_{ij}(h_j) \right], \\ f_{ij} = & 1 - \left[ \frac{h_i}{3(\gamma - 1)\bar{n}_i m_j u_j} \frac{\partial \bar{P}_i}{\partial h_i} \right] \left( 1 + \frac{h_i}{3\bar{n}_i} \frac{\partial \bar{n}_i}{\partial h_i} \right)^{-1} \end{aligned} \quad (20)$$

この運動方程式を元に、今回のコードは実装した。

## 3 Results

テスト計算は、shocktube、Kelvin-Helmholtz instabilities、Hydrostatic Equilibrium の 3 つを行った。

### 3.1 shock tube tests

初期条件は、高密度側が  $\rho_H = 1.0, P_H = 1.0$ 、低密度側が、 $\rho_L = 0.125, P_L = 0.1$  である。以下の結果は、同時刻の比較をしたものである。左側が standard

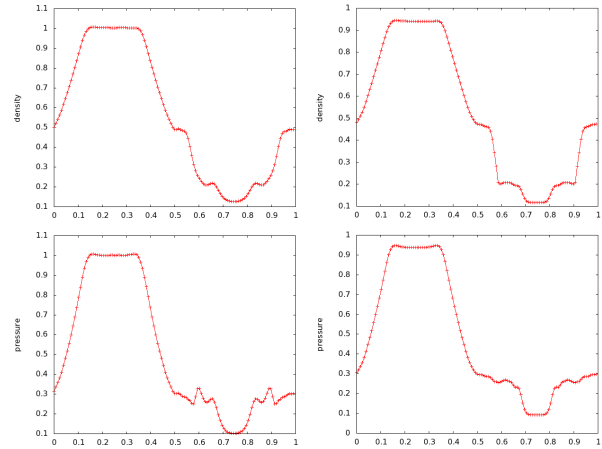


図 1: shocktube test の結果

SPH で、右側が DI-SPH の結果である。これを見ると、DI-SPH のほうが、接触不連続面での圧力の不自然なゆらぎが少なくなっていることが分かる。

### 3.2 Kelvin-Helmholtz instabilities

次に、KH 不安定性のテストを行った。

初期条件は、密度がそれぞれ、 $\rho_H = 4.0, \rho_L = 1.0$ 、 $P = 2.5$  である。これに、微小な速度を流れに垂直に加えた。（Price, D. J. 2008）

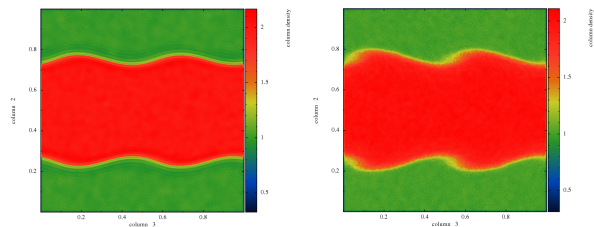


図 2: KHI の結果

左側が Standard で、右側が DI-SPH の結果である。なお、時間は不安定性の成長スケール  $\tau_{kh}$  の 3 倍程度におけるスナップショットである。綺麗に KHI が解けているわけではないが、全く解けていない Standard と比較すると、不安定性が見られる。

### 3.3 Hydrostatic Equilibrium

圧力平衡状態で、密度だけ異なる二つの領域をおき、その形状変化をテストしたものである。初期条件は、正方形を境にして、高密度側（内側）と、低密度側（外側）を作り、どちらの領域も同じ圧力の初期条件をもたせた。

Springel V., Hernquist L., 2002, MNRAS, 333, 649

Thomas, P. A.; Couchman, H. M. P., 1992, MNRAS.257...11T

Price, D. J. 2008, Journal of Computational Physics, 227, 10040

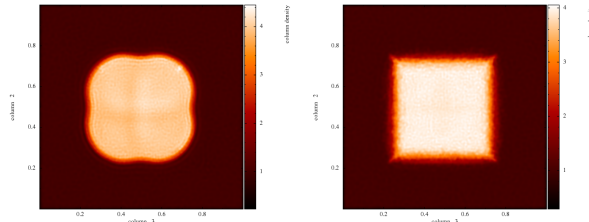


図 3: Hydrostatic Equilibrium の結果

左が Standard SPH の結果で、右が DI-SPH の結果である。左は角がとれて丸みを帯びてるのが分かる。本来、初期条件の形をある程度保つはずで、DI-SPH は初期条件の四角い形をまだ保っているのがわかる。

## 4 Discussion

以上の3つのテスト計算を行ったが、どれも定性的には Standard よりは良い結果となっていることが分かる。しかし、論文のテスト結果ほどうまく解けてはいなかった。これは本来 KHI などは2次元コードにするか、3次元にしても薄くスライスしたような領域で計算させるともつとうまくいくという結果が論文には紹介されていたが、今回使用したコードは宇宙論的なシミュレーションを行うのが前提となっているコードのため、立方体の計算領域でテストを行った影響が強いものと考えられる。それでも、Standard よりは良い結果となっているので、これを用いてさらに今度は宇宙論的なシミュレーションを行っていきたいと考えている。

## Reference

Saitoh T. R. and Makino J. 2013. ApJ...768...44S

Hopkins, P. F. 2013, MNRAS, 428, 2840