

流体力学: 粒子法

犬塚修一郎 (京大・理・物理2・天体核)

1 はじめに

天体現象に現れる流体力学的運動は超音速流で特徴付けられる．例えば，速度が 1000km/s を越すような超新星爆発によって生じた衝撃波が温度 10K (音速は 0.2km/s 程度) で特徴付けられる分子雲のなかを伝播する場合のマッハ数は $10,000$ を越すほどである．従って，天体物理学的流体現象を扱う数値計算手法は非常に強い衝撃波を扱うことが求められる場合が多い．一方，計算領域内に空隙が多く，またその空隙の形が変形するような問題を扱う場合は，ラグランジュ的な記述をする粒子法的な流体計算法が有利な場合が数多くある．そのため，Smoothed Particle Hydrodynamics (以下は SPH と略す) 法 [6, 11] と呼ばれる粒子を用いる流体計算法が広く使われているが，この方法の標準的な方法は，衝撃波の記述が不得手である．ここでは，非常に強い衝撃波を精度良く記述する粒子法的流体計算が如何にして可能になるかということ紙面の許す範囲内で説明することを試みる．

前半部では，はじめに時間発展型の数値計算をする際に必要な注意を喚起し，流体力学の方程式系の性質について簡単に述べる．まず，線形・非線形波動の性質を説明した後，天体物理学において重要となる圧縮性のガスの時間発展を記述する際の本質的困難を述べ，その解決法について解説する．後半部では，天体物理学的流体力学の問題によく使用される SPH 法 (の改良版) について解説する．最後に，今後の粒子法の発展について触れ，メッシュ法と比較してまとめる．

2 数値流体力学の心得

2.1 精度と安定性

時間発展型の (もしくは反復作業を含むような) 数値計算をする際，最も重要で且つ誤りやすいことは“精度”と“安定性”という二つの概念を明確に区別することである．この二つの概念はほとんど無関係であると言って良い．“精度”の概念は簡単である．要するに本来求めなければならない“厳密解”と数値計算で得られる“近似解”の差の大きさのことであり，メッシュ法などにおける多くの場合，“打ち切り誤差”として簡単に表現できる．実際，“厳密解”と“近似解”をそれぞれテイラー展開することで簡単にその誤差の大きさは評価できる場合が多い．一方，“安定性”は一言で言うと「増大 (発散) する非物理的な振る舞い (モード) を含むかどうか」ということであり，原理的にはあらゆる初期条件から計算を始めた場合について解の振る舞いを知らないとならぬような厳しい概念である．無論，解く方程式が線形方程式系の場合は初期条件をフーリエ成分に分解してそれぞれ (フーリエ成分の基底となる) 固有モードの振る舞いを見れば十分である．これが von Neumann の安定性解析に相当する．しかし，非線形方程

式系では安定性を解析するための数学 (一般的な対処法) が無い。そのため、物理的な考察が必要になる。連続体としての流体に対して定義されている物理量の近似解を扱う際、空間 (もしくは流体) を有限個の要素に分割し、その離散化された要素ごとの進化を物理的に考慮して安定な計算スキームを得ることを目指すのが有効である。

2.2 流体力学の方程式系

多くの天体物理学的問題では、レイノルズ数 $Re = vL/\nu$ が大きいので、物理量の分布が滑らかな部分では、粘性を無視することができる。ここでは、以下のように、輻射との相互作用や粘性・熱伝導など散逸現象を無視した理想的な流体力学の方程式系で話を始める。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho \mathbf{v}}{\partial t} + \nabla \cdot (P + \rho \mathbf{v} \otimes \mathbf{v}) = 0, \quad (2)$$

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \nabla \cdot [(E + P)\mathbf{v}] = 0, \quad (3)$$

ここで、 E は単位体積当たりの流体のエネルギーで、比熱比が γ の理想気体の場合は、

$$E = \frac{P}{\gamma - 1} + \frac{1}{2} \rho v^2. \quad (4)$$

2.3 線形波動

方程式系の基本的性質を理解するために、1次元的な線形波動を考えよう。簡単のため、無摂動状態としては、密度・圧力が時間・空間的に一定で、速度が0の状態を考える。この場合、断熱的な摂動の時間発展は以下の双曲型の方程式に従う。

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} - C_s^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \delta f = \left(\frac{\partial}{\partial t} - C_s \frac{\partial}{\partial x} \right) \left(\frac{\partial}{\partial t} + C_s \frac{\partial}{\partial x} \right) \delta f = 0, \quad (5)$$

ここで、 C_s は音速 (ここでは定数) であり、 $\delta f = \delta \rho, \delta v$ である。従って、一般解は $f_1(x), f_2(x)$ を任意関数として、

$$\delta f = f_1(x - C_s t) + f_2(x + C_s t) \quad (6)$$

で与えられる。これは、初期に存在した摂動 $\delta f = f_1(x) + f_2(x)$ がそれぞれの形を変えずに左右に流れていくだけ、という簡単な運動である。現実には、流体の方程式は非線形であるため、これほど簡単ではない。

2.4 流体の方程式の非線形性

流体力学に現れる非線形性を手っ取り早く知るために、方程式系 (式 1-4) の厳密解である「単波 (simple wave)」と呼ばれる有限振幅の音波に相当する解について見てみる (例えば参考文献 [1] 第 10 章参照)。図 1 に示すように、(a) で表される三角関数的な初期条件から出発しても、非線形性による波形の切り立ち (b) が起こり、この数学的な厳密解は有限の時間内に (c) で表されるような多価関数になってしまう。運動方程式の中の圧力勾配項はこの現象を救ってはくれ

ない．もちろん，この(c)の点線の状態はもはや物理的ではなく，実際には衝撃波が立ち，(c)の実線に相当する解が実現される．この衝撃波を含む解は，もとの方程式系(式1-4)の弱解でしかなく，この方程式系の解とは言えない．つまり，特殊とは言えない初期条件(a)から出発して方程式系(式1-4)に従って正しく時間発展したにも関わらず，有限の時間の内にその方程式系では記述されない状態に陥ってしまう．このことは，ほぼあらゆる初期条件について一般的に言えることである．ある近似レベルの方程式による時間発展に対するこのような不完全性は，流体力学に限らず，種々の物理現象の場合にしばしば見受けられることである．流体力学の場合，このことは何ら原理的問題を含まない．時間発展のある段階で粘性項が無視できなくなるというだけのことであり，要するに「困ったときはより正しい(より深いレベルの)方程式を持ち出して対処せよ」である．

気体分子運動論で精度良く記述されるところの密度があまり大きくないガスの力学系の中での，流体近似の種々の階層を図2に示す．この流体近似は系の巨視的な変数(v, ρ, P 等)の変化する空間スケールに比べて，粒子の平均自由行程が小さい場合の摂動展開になっている．粘性・熱伝導無しいわゆる Euler 方程式での記述というのは，平均自由行程 l を完全に無視する近似になっている． l の一次に比例する項を残す近似が Navier-Stokes 近似である．この l に比例する項は l が小さいため，物理量が滑らかな分布の場合は他の項に比べて無視できる大きさであるが，衝撃波に相当する部分では " $\partial^2 v / \partial x^2$ " 等の項が大きくなって無視できなくなると理解すれば良い．

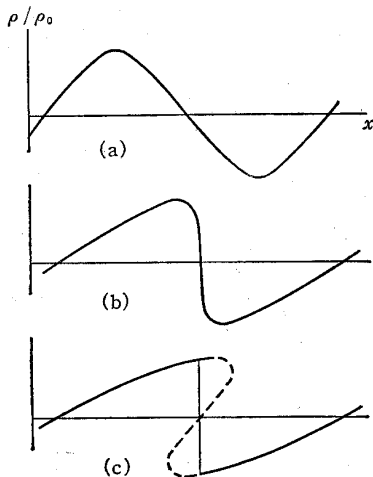


図 1: 単波の時間発展. ランダウ・リフシツ著「流体力学」第 64 図より．

近似方程式の階層構造

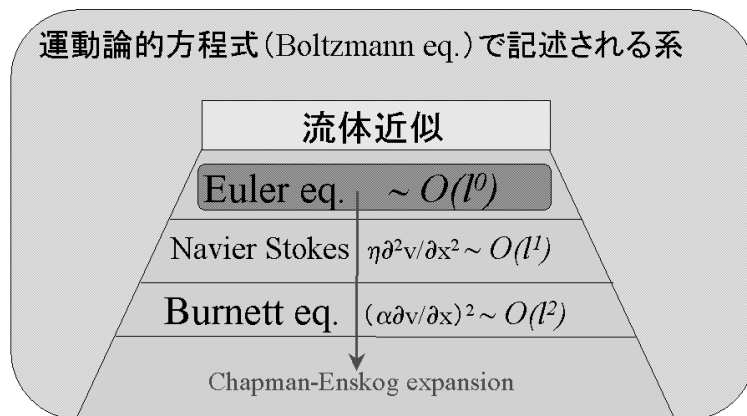


図 2: 気体分子運動論の枠組みの中での流体近似の概念図

2.5 実用的問題

実際の数値計算においても，衝撃波が立つ場合に備えて「非常に小さくても 0 でない粘性項や熱伝導項を含めて計算を行えば良いだろう」と前節での議論から推測されるだろうが，現実的にはうまくいかない．なぜなら，例えばメッシュの間隔を Δx とし，衝撃波に相当する部分での速度の跳びを Δv とすると，粘性項の大きさは $\eta \partial^2 v / \partial x^2 \sim \rho C_s l (\Delta v)^2 / (\Delta x)^2$ 程度であるから， Δx が充分小さくないとこの粘性項は大きな値を持たない．従って，この粘性項の導入では，衝撃波を模擬することができず，数値計算は破綻してしまう．係数 η を分子運動論的に

決まる物理的な値よりも大きくして計算すれば衝撃波の部分では対処できるようになるが、この場合、この多大な粘性項が解のなめらかな部分でも効いてしまい、解くべき問題からは逸脱してしまう。それでは、粘性項が本質的に必要な衝撃波近辺だけで、粘性項の係数を大きくすれば良いと思われるだろうが、実際にはその“危険な”場所は計算してみて初めて分かるのであるし、そこでの必要な粘性の大きさは正しい計算結果を得る前には不明である。

このような「必要最小限の粘性を如何にして導入するか」というのが、圧縮性流体計算法の主たる課題である。

2.6 人工粘性の方法 vs ゴドノフの方法

物理的粘性項が小さい場合 ($Re \gg 1$) に、衝撃波を記述するのに必要な散逸を数値的に導入する手っ取り早い方法が人工粘性項を導入する方法である。特に代表的な von Neumann-Richtmyer の人工粘性の方法は $(\partial v / \partial x)^2$ に比例する項を運動方程式において圧縮領域にのみ付加する方法である (例えば [14] 参照)。この項は図 2 で説明した Chapman-Enskog 展開の l^2 次の近似で出てくる主要項であることは興味深い [2]。通常はこの von Neumann-Richtmyer 型の粘性項と l^1 次の近似である Navier-Stokes 粘性項を共に付加させて使用する場合が多い。

上述の人工粘性法は、精度の良い解を得るためには、衝撃波の強さに応じて粘性項の大きさを調節する必要があるが、万能とは言えない。これとは対照的に、抜本的に発想を変えて、必要且つできるだけ小さい粘性が自動的に入るようにする方法が Godunov の考案した方法である [5]。具体的には流体 (空間) を有限体積の要素 (セル) に分割し、そのセルどうしの境界での Riemann 問題を解いた結果を用いてセル内の物理量の時間発展を支配する (数値) 流束を計算するという方法である。ここで、Riemann 問題とは「2つの異なる物理状態のガスが初期に接して隣り合っている場合のその後の時間発展を記述する問題」であり、ゴドノフ法では、それぞれ空間的に一定の二つの状態の間の不連続面から始まる非線形の波の時間発展を厳密に解いて用いる。衝撃波を形成するような状態間では、ちゃんと衝撃波を考慮して数値流束を計算することになるので、安定に衝撃波を記述することができる。もともとの Godunov の方法は空間的に 1 次精度であったが、これを van Leer が空間・時間 2 次精度の方法に改良した [16]。空間 3 次・時間 2 次精度の PPM という方法もある [3]。紙面が不足するのでこの方法の詳細は省略するが、参考文献 [16] の Appendix 等に詳しい記述がある。

3 SPH 法について

ラグランジュ的な粒子法の話に入るため、以下のようなラグランジュ的描像の基礎方程式を考える。

$$\frac{d\rho}{dt} = -\rho \nabla \cdot \mathbf{v}, \quad (7)$$

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\frac{1}{\rho} \nabla P, \quad (8)$$

$$\frac{du}{dt} = -\frac{P}{\rho} \nabla \cdot \mathbf{v}, \quad (9)$$

$$P = (\gamma - 1)\rho u, \quad (10)$$

ここで、 u は単位質量当たりの内部エネルギーである。

標準 SPH では、各粒子はそれぞれ固有の質量を持ち、その粒子の場所での流体の密度は以下の式で与えられるものとする:

$$\rho_i = \sum_j m_j W(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j, h), \quad (11)$$

ここで、下付き添字は粒子のラベルである。 m_j は j -粒子の質量であり、 $W(\mathbf{x}, h)$ は “kernel function” と呼ばれるものであり、球対称でかつ、空間積分に対して規格化されている:

$$W(\mathbf{x}, h) = W(-\mathbf{x}, h), \quad \int W(\mathbf{x}, h) d\mathbf{x} = 1. \quad (12)$$

また、 h はその kernel function のパラメーターであり、“smoothing length” と呼ぶ。

これから以降の記述は、基本的に Inutsuka (2002) によるが、数値計算手法の定式化における厳密性・簡潔性の点で Monaghan (1992) で記述されている標準 SPH とは異なる。

便宜のため、一般的な kernel function $W(\mathbf{x})$ に対して実効的な幅 h_{eff} を以下で定義する:

$$h_{\text{eff}}^2 \equiv 2 \int \mathbf{x}^2 W(\mathbf{x}, h) d\mathbf{x}. \quad (13)$$

$W(\mathbf{x}, h)$ としては種々のものを使用されているが、ここでは簡単化のため、以下のような Gaussian kernel を使用する:

$$W(\mathbf{x}, h) = \left[\frac{1}{h\sqrt{\pi}} \right]^d e^{-\mathbf{x}^2/h^2}. \quad (14)$$

ここで、 d は空間の次元である。この Gaussian kernel の場合には $h_{\text{eff}} = h$ である。

3.1 鍵となる概念

あらゆる数値計算手法というものは、本来解きたい方程式を誤差を許して解くことになる。つまり、その誤差の導入の仕方によって種々の計算法が特徴付けられることになる。ここでは「SPH 法がどのような誤差を持ち込むのか」という点について説明する。

SPH 法の定式化においては、ある物理量 $f(\mathbf{x})$ の時間発展を近似的に表現する変数を定義する際に、以下のように $f(\mathbf{x})$ を kernel function で convolution を取ったものを考察する:

$$\langle f \rangle(\mathbf{x}) \equiv \int f(\mathbf{x}') W(\mathbf{x}' - \mathbf{x}, h) d\mathbf{x}'. \quad (15)$$

ここで、 $\langle \rangle$ は convolution を表す記号である。変数 f の $\mathbf{x} = \mathbf{x}_i$ の近傍でのテイラー展開を考えると、 $\langle f \rangle(\mathbf{x}_i)$ と $f(\mathbf{x}_i)$ の差は h_{eff} に関して 2 次であることがわかる:

$$\langle f \rangle(\mathbf{x}_i) = f(\mathbf{x}_i) + \frac{h_{\text{eff}}^2}{4} \nabla^2 f(\mathbf{x}) + O(h_{\text{eff}}^4). \quad (16)$$

従って、 f の代わりに $\langle f \rangle$ を求めて、その近似解だとすると、球対称の W の convolution により h_{eff} に関して 2 次の誤差が導入されたことになる。

この場合、部分積分と式 (12) を用いて以下のような関係式も得られる:

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} \right\rangle(\mathbf{x}) &= \int \frac{\partial f(\mathbf{x}')}{\partial \mathbf{x}'} W(\mathbf{x}' - \mathbf{x}, h) d\mathbf{x}' \\ &= - \int f(\mathbf{x}') \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}'} W(\mathbf{x}' - \mathbf{x}, h) d\mathbf{x}' \\ &= \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \int f(\mathbf{x}') W(\mathbf{x}' - \mathbf{x}, h) d\mathbf{x}', \end{aligned} \quad (17)$$

つまり, ∇f の kernel convolution は単に $\nabla\langle f \rangle$ である.

もし, 流体の密度分布として以下のような式を採用すれば, これは有限個の点ではなく, 全空間で定義されており, (ここでは Gaussian Kernel を使用しているので) 無限回微分可能である:

$$\rho(\mathbf{x}) \equiv \sum_j m_j W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j, h), \quad (18)$$

従って, 以下のような恒等式を得る:

$$1 = \sum_j \frac{m_j}{\rho(\mathbf{x})} W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j, h), \quad 0 = \sum_j m_j \nabla \left[\frac{W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j, h)}{\rho(\mathbf{x})} \right]. \quad (19)$$

この二つの恒等式が, ここで紹介する SPH 法の鍵となる式である.

式 (19) を用いて, kernel convolution の具体的な値は以下のような表式に変形できる.

$$\begin{aligned} f_i \equiv \langle f \rangle(\mathbf{x}_i) &= \int f(\mathbf{x}') W(\mathbf{x}' - \mathbf{x}_i, h) d\mathbf{x}' \\ &= \int \sum_j m_j \frac{f(\mathbf{x}')}{\rho(\mathbf{x}')} W(\mathbf{x}' - \mathbf{x}_i, h) W(\mathbf{x}' - \mathbf{x}_j, h) d\mathbf{x}' \\ &= \sum_j \Delta f_{i,j}, \end{aligned} \quad (20)$$

ここで, 以下を定義した:

$$\Delta f_{i,j} \equiv \int m_j \frac{f(\mathbf{x}')}{\rho(\mathbf{x}')} W(\mathbf{x}' - \mathbf{x}_i, h) W(\mathbf{x}' - \mathbf{x}_j, h) d\mathbf{x}'. \quad (21)$$

$m_i \Delta f_{i,j}$ の表式は i と j に関して対称であることに注意してほしい. このように物理量 f の i 番目の粒子の位置での値 (f_i) は近傍粒子からの寄与分である $\Delta f_{i,j}$ の和で与えられる.

一方, 標準 SPH においては, $\Delta f_{i,j}$ に相当するものとして, 以下のような量を用いていることになっている:

$$\Delta f_{i,j} \approx m_j \frac{f(\mathbf{x}_j)}{\rho(\mathbf{x}_j)} W(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j, h). \quad (22)$$

これは式 (21) で $W(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}', h) \approx \delta(\mathbf{x}' - \mathbf{x}_j)$ という非常に粗い近似を用いたことに相当する. ここで $\delta(\mathbf{x})$ は Dirac の δ 関数である. また, 標準 SPH は式 (19) の代用として以下のような近似式も暗黙のうちに使用している:

$$1 \approx \sum_j \frac{m_j}{\rho(\mathbf{x}_j)} W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j, h), \quad (23)$$

密度の空間的变化が激しいときはこの誤差は大きい. なお, この点は [4] でも言及されている.

3.2 運動方程式

数値計算で用いる離散化した方程式を得る手続きとして, 本来の流体の運動方程式 式 (8) の両辺の convolution を取る:

$$\int \frac{d\mathbf{v}(\mathbf{x})}{dt} W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x} = - \int \frac{1}{\rho(\mathbf{x})} \nabla P(\mathbf{x}) W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}. \quad (24)$$

この式の右辺は以下のように変形できる:

$$\begin{aligned}
& - \int \left\{ \left[\nabla \frac{P(\mathbf{x})}{\rho(\mathbf{x})} \right] W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) + \frac{P(\mathbf{x})}{\rho^2(\mathbf{x})} [\nabla \rho(\mathbf{x})] W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) \right\} d\mathbf{x} \\
& = \int \left\{ \frac{P(\mathbf{x})}{\rho(\mathbf{x})} \nabla W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) - \frac{P(\mathbf{x})}{\rho^2(\mathbf{x})} \left[\nabla \sum_j m_j W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j, h) \right] W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) \right\} d\mathbf{x} \\
& = \sum_j m_j \int \frac{P}{\rho^2} \{ \nabla W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j, h) - W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) \nabla W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j, h) \} d\mathbf{x},
\end{aligned}$$

ここで, 部分積分と式 (19) を用いた.

従って, もし粒子の位置座標の時間発展式として以下の式,

$$\ddot{\mathbf{x}}_i \equiv \int \frac{d\mathbf{v}(\mathbf{x})}{dt} W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i, h) d\mathbf{x} = - \int \frac{1}{\rho(\mathbf{x})} \nabla P(\mathbf{x}) W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i, h) d\mathbf{x}, \quad (25)$$

を採用すると, もともとの流体の式に対して h の 2 次の誤差を含む (つまり空間的 2 次精度の) 一貫性のある以下のような発展方程式を得る:

$$m_i \ddot{\mathbf{x}}_i = -m_i \sum_j m_j \int \frac{P(\mathbf{x})}{\rho^2(\mathbf{x})} \left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_i} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_j} \right] W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i, h) W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j, h) d\mathbf{x}, \quad (26)$$

ここで, 上に付けたドットは時間微分である. この導出により, もし圧力が空間的に一定の場所では粒子にかかる力が 0 になることなどがわかる. また, 右辺が i と j に関して反対称的であることから, 運動量や角運動量が保存されることが明示的となっている.

3.3 エネルギー方程式

運動方程式と同様に, エネルギー方程式式 (9) に対しても convolution を取る.

$$\int \frac{du(\mathbf{x})}{dt} W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x} = - \int \frac{P(\mathbf{x})}{\rho(\mathbf{x})} [\nabla \cdot \mathbf{v}] W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}. \quad (27)$$

右辺は以下のように変形される:

$$\begin{aligned}
& - \int \frac{P(\mathbf{x})}{\rho(\mathbf{x})} [\nabla \cdot \mathbf{v}] W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x} \\
& = - \int \frac{1}{\rho(\mathbf{x})} [\nabla \cdot P\mathbf{v}] W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x} + \int \frac{1}{\rho(\mathbf{x})} [\mathbf{v} \cdot \nabla P] W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}. \quad (28)
\end{aligned}$$

ここで, 以下の式,

$$\int \frac{1}{\rho(\mathbf{x})} [\mathbf{v} \cdot \nabla P] W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i, h) d\mathbf{x} = \int \frac{1}{\rho(\mathbf{x})} [\dot{\mathbf{x}}_i \cdot \nabla P] W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i, h) d\mathbf{x} + O(h^2). \quad (29)$$

に注意して, 以下のような近似的な内部エネルギーの時間発展式を得る:

$$\begin{aligned}
\dot{u}_i & \equiv \int \frac{du(\mathbf{x})}{dt} W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i, h) d\mathbf{x} \\
& \approx - \int \frac{1}{\rho(\mathbf{x})} [\nabla \cdot P\mathbf{v}] W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i, h) d\mathbf{x} + \int \frac{1}{\rho(\mathbf{x})} [\dot{\mathbf{x}}_i \cdot \nabla P] W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i, h) d\mathbf{x}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \int P[\mathbf{v} - \dot{\mathbf{x}}_i] \cdot \nabla \left[\frac{W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i, h)}{\rho} \right] d\mathbf{x} \\
&= \sum_j m_j \int \frac{P}{\rho^2} [\mathbf{v} - \dot{\mathbf{x}}_i] \cdot [\nabla W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i, h) W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j, h) \\
&\quad - W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i, h) \nabla W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j, h)] d\mathbf{x}. \tag{30}
\end{aligned}$$

3.4 最小作用の原理

この節では最小作用の原理を用いることで、この SPH で採用される時間発展式の意味を別の角度から見直すことができることを示す。このことは数値計算理論的に興味深く、今後の更なる高精度化や他の物理過程を含めるような発展において有用となるはずである。しかし、付加的内容であるため、初めて SPH 法を勉強する人は読み飛ばしても構わない。

この節の中だけは、衝撃波が存在しない場合に話を限り、例えば $P(\rho) = K\rho^\gamma$ のように圧力が密度のみの関数で表されるような barotropic fluid の場合を考える。この場合、流体の運動方程式 (式 [8]) が以下のような作用 S を極小とする条件から導かれる。

$$S = \int L dt, \tag{31}$$

$$L = \int \mathcal{L} d\mathbf{x} = \int \left[\frac{1}{2} \rho v^2 - \rho u \right] d\mathbf{x}. \tag{32}$$

もし流体のオイラー的な記述を用いれば、連続の式などの拘束条件式を導くための多数の Lagrange 未定乗数を必要とし、複雑になる [10, 15]。従って、ここでは Lagrange 座標を用いていることに注意してほしい。

まず、以下のような式で表現される連続関数

$$\rho(\mathbf{x}) = \sum_j m_j W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j, h). \tag{33}$$

は有限個の粒子の座標の組 \mathbf{x}_i ($i = 1, 2, 3, \dots, N_p$) だけで表されている。

$$\mathbf{F}_m(\mathbf{x}) \equiv \sum_j m_j \dot{\mathbf{x}}_j W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j, h). \tag{34}$$

という量を定義しておくとし、(33) 式の時間微分は以下のように変形できる:

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{x})}{\partial t} = \sum_j m_j \dot{\mathbf{x}}_j \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_j} W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j, h) = - \sum_j m_j \dot{\mathbf{x}}_j \nabla W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j, h) = - \nabla \cdot \mathbf{F}_m, \tag{35}$$

この式と通常 (オイラー的な) 連続の式を見比べると、もし ρ が流体の密度を表しているとするとき、 \mathbf{F}_m は質量流束に相当していることがわかる:

$$\mathbf{F}_m(\mathbf{x}) = \rho(\mathbf{x}) \mathbf{v}(\mathbf{x}). \tag{36}$$

この ρ も \mathbf{F}_m も全空間で定義されているので、全空間で定義された速度の表式がわかる:

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}) = \frac{\mathbf{F}_m(\mathbf{x})}{\rho(\mathbf{x})} = \frac{\sum_j m_j \dot{\mathbf{x}}_j W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j, h)}{\sum_j m_j W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j, h)}. \tag{37}$$

ここで、有限個の点 $\mathbf{x} = \mathbf{x}_i$ においては、

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}_i) = \dot{\mathbf{x}}_i + \frac{1}{\rho_i} \sum_j m_j [\dot{\mathbf{x}}_j - \dot{\mathbf{x}}_i] W(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j, h), \quad (38)$$

であり、 $\mathbf{v}(\mathbf{x}_i)$ と $\dot{\mathbf{x}}_i$ の差は h の 2 次である。

これらの式 (33) と (37) は式 (32) において、 $\mathbf{v}(\mathbf{x})$ と $\rho(\mathbf{x})$ に代入することで、粒子についての情報だけで定義された Lagrangian function を導出することができる。

$$L = \int \left\{ \frac{[\sum_j m_j \dot{\mathbf{x}}_j W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j, h)]^2}{2 \sum_j m_j W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j, h)} - \frac{K}{\gamma - 1} \left[\sum_j m_j W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j, h) \right]^\gamma \right\} d\mathbf{x}. \quad (39)$$

この式は言わば、密度と速度が式 (33) と (37) で表現され得るという拘束条件のついた“流体”の厳密な Lagrangian function である。

このままではまだ複雑なので、速度場について近似を導入する。速度場のテイラー展開

$$\begin{aligned} \mathbf{v}(\mathbf{x}) &= \mathbf{v}(\mathbf{x}_i) + [\mathbf{x} - \mathbf{x}_i] \cdot \nabla \mathbf{v}(\mathbf{x}_i) + O(|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i|^2) \\ &= \dot{\mathbf{x}}_i + \frac{1}{\rho_i} \sum_j m_j [\dot{\mathbf{x}}_j - \dot{\mathbf{x}}_i] W(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j, h) + [\mathbf{x} - \mathbf{x}_i] \cdot \nabla \mathbf{v}(\mathbf{x}_i) + O(|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i|^2). \end{aligned} \quad (40)$$

によれば、以下の h の 2 次の近似式を得る:

$$\int \mathbf{v}(\mathbf{x}) W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i, h) d\mathbf{x} = \dot{\mathbf{x}}_i + O(h^2). \quad (41)$$

これを用いて、Lagrangian の kinetic term が以下のように簡単になる:

$$\begin{aligned} \int \frac{1}{2} \rho \mathbf{v}^2 d\mathbf{x} &= \frac{1}{2} \int \mathbf{F}_m \cdot \mathbf{v} d\mathbf{x} \\ &= \frac{1}{2} \sum_j m_j \dot{\mathbf{x}}_j \cdot \int \mathbf{v} W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j, h) d\mathbf{x} \\ &= \frac{1}{2} \sum_j m_j \dot{\mathbf{x}}_j^2 + O(h^2). \end{aligned} \quad (42)$$

このようにして、 h の 2 次精度の (比較的簡単な) Lagrangian function を粒子系に対して定義する。

$$L_{\text{new}} \equiv \sum_i m_i \left[\frac{1}{2} \dot{\mathbf{x}}_i^2 - \int u(\mathbf{x}) W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i, h) d\mathbf{x} \right]. \quad (43)$$

この式を用いて作用 $S = \int L_{\text{new}} dt$ を極小とする条件、つまり Euler-Lagrange の式、

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L_{\text{new}}}{\partial \dot{\mathbf{x}}_i} - \frac{\partial L_{\text{new}}}{\partial \mathbf{x}_i} = 0, \quad (44)$$

から、以下のような時間発展式を得る (式変形の詳細は [8] の Appendix 参照):

$$m_i \ddot{\mathbf{x}}_i = -m_i \sum_j m_j \int \frac{P(\mathbf{x})}{\rho^2(\mathbf{x})} \left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_i} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_j} \right] W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i, h) W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j, h) d\mathbf{x}. \quad (45)$$

この式は (26) 式と同一である。ここでは、 L_{new} の空間的対称性から linear momentum や angular momentum の保存性が保証されているわけだが、これが (45) 式での i と j の反対称的な現われ方に結びついているのである。

もし，更に簡単な以下のような Lagrangian function を採用すれば，

$$L_{\text{SPH}} = \sum_i m_i \left[\frac{1}{2} \dot{\mathbf{x}}_i^2 - u(\rho_i) \right], \quad (46)$$

標準 SPH の運動方程式を得ることとなる [13]:

$$m_i \ddot{\mathbf{x}}_i = -m_i \sum_j m_j \left[\frac{P_i}{\rho_i^2} + \frac{P_j}{\rho_j^2} \right] \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_i} W(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j, h). \quad (47)$$

この Lagrangian function, L_{SPH} は，(43) 式において， $W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i, h) \approx \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)$ という粗い近似を (付加的に) 施すことで得られる．従って，標準 SPH においても速度場に対して (41) 式で表される近似を導入していることに注意する必要がある．

3.5 Riemann Solver の実装

前節までの説明は衝撃波の発生に伴う物理的散逸をまだ考慮していない．実際の時間発展では，非常に小さいが 0 ではないこの物理的散逸を導入することが理論的にも要求される (§2.4 参照)．ここでは必要最小限の物理的粘性を導入する方法として，Godunov 法の要となっている Riemann 問題解法モジュール (Riemann Solver) を利用する．

式 (26) や (30) を具体的に計算するには，積分 $\int \dots W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j) d\mathbf{x}$ を実行しなければならないが，この被積分関数は点 \mathbf{x}_i と \mathbf{x}_j の midpoint 付近から離れると，急速に小さくなる関数である．そこで， i 粒子と j 粒子のみの情報からこの積分式を評価して実際の計算を実行する．具体的には，線形補間や 3 次スプライン補間公式などを利用して行うが，この詳細は [8] を参照してほしい．ここではその結果だけを書く：

$$\ddot{\mathbf{x}}_i = -2 \sum_j m_j P_{i,j}^* V_{i,j}^2(h) \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_i} W(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j, \sqrt{2}h), \quad (48)$$

$$\dot{u}_i = -2 \sum_j m_j (P_{i,j}^* \mathbf{v}_{i,j}^* - P_{i,j}^* \dot{\mathbf{x}}_i) V_{i,j}^2(h) \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_i} W(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j, \sqrt{2}h), \quad (49)$$

ここで， $V_{i,j}^2$ は i と j 粒子の近傍の密度分布から決まる変数であり，単位質量当たりの体積の 2 乗 (ρ^{-2}) の次元を持つ．その具体的表式は [8] の式 (52), (64) に与えてある．また， P^* や \mathbf{v}^* は i と j 粒子の間の物理量で定義された Riemann 問題を解いた結果得られる，中間状態に対応する値である．Riemann 問題の解き方については [16] の Appendix にある解説が優れている．

3.6 保存性

最終的に計算する粒子系の運動方程式は以下ようになる：

$$\Delta \dot{\mathbf{x}}_i = -\Delta t \sum_j m_j P_{i,j}^* \left[V_{i,j}^2(h_i) \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_i} W(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j, \sqrt{2}h_i) + V_{i,j}^2(h_j) \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_i} W(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j, \sqrt{2}h_j) \right]. \quad (50)$$

i と j の反対称的な現われ方により，全運動量が保存されていることは明示的になっている．

$$\sum_i m_i \Delta \dot{\boldsymbol{x}}_i = 0. \quad (51)$$

最終的な粒子系のエネルギー方程式は以下ようになる：

$$\begin{aligned} \Delta u_i = & -\Delta t \sum_j m_j P_{i,j}^*(\boldsymbol{v}_{i,j}^* - \dot{\boldsymbol{x}}_i) \left[V_{i,j}^2(h_i) \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}_i} W(\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_j, \sqrt{2}h_i) \right. \\ & \left. + V_{i,j}^2(h_j) \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}_i} W(\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_j, \sqrt{2}h_j) \right]. \end{aligned} \quad (52)$$

ここで， i 粒子の time-centered velocity を以下のように定義した．

$$\dot{\boldsymbol{x}}_i^* = \dot{\boldsymbol{x}}_i + \frac{1}{2} \Delta \dot{\boldsymbol{x}}_i. \quad (53)$$

この式のおかげで，粒子系の全エネルギーは厳密に保存する．

$$\Delta \sum_i m_i \left[\frac{1}{2} \dot{\boldsymbol{x}}_i^2 + u_i \right] = \sum_i m_i \left\{ \frac{1}{2} [\dot{\boldsymbol{x}}_i + \Delta \dot{\boldsymbol{x}}_i]^2 + [u_i + \Delta u_i] - \frac{1}{2} \dot{\boldsymbol{x}}_i^2 - u_i \right\} = 0. \quad (54)$$

この厳密な保存性は以前の方法では得られなかったことであるが，実は，通常の SPH 法においても (53) 式を導入すれば達成される [9]．

3.7 その他の物理

流体の運動方程式の導出法 (§3.2 参照) から明らかなように，重力を入れる場合は，重力についても $W(\boldsymbol{x})$ で convolution を取って入れるべきである．つまり， Ψ を重力ポテンシャルとすると，重力による加速度は

$$\langle \boldsymbol{a}_{\text{grav}}(\boldsymbol{x}) \rangle = \int \nabla' \Psi(\boldsymbol{x}') W(\boldsymbol{x}' - \boldsymbol{x}) d\boldsymbol{x}', \quad (55)$$

とすれば良い．

ラグランジュ法なので，輻射冷却・過熱や化学反応などは粒子ごとにやれば良い．

3.8 今後の発展

非球状の kernel function を用いて，精度を稼ぐという試みが米テキサス大のグループで進められている．しかし，現状では運動量等の保存則を破る定式化になっているので，今後の発展が期待される．

いくつかのグループにより，輻射流体への拡張が進められているが，高速化が鍵となるであろう．

降着円盤などのシアーを伴う回転流体を長時間記述する場合の困難が [7] で指摘され，その解決法が示されている．しかし，現状では smoothing length が一定で変化しない場合についての定式化になっているので，今後の進展が待たれる．

粒子法を MHD に適用する場合，磁場 B 自身を粒子固有の変数として定式化する方法が試されているが [12]，(概念的に) 有利な方法とは言えない．電流 J から磁場 B を計算するというような抜本的再定式化が必要だと思う．

3.9 メッシュ法とSPH法の比較

最後に、現在容易に使用できる計算機資源を用いて典型的な天体物理の問題に取り組む場合を想定し、メッシュ法とSPH法による計算を比較してみる。

SPH法の長所としては、(1) アルゴリズムが簡単であること、(2) 高密度の場所で高精度であること、(3) 化学反応計算などに有利であること、(4) 衝撃波のない所で低散逸であること、等が挙げられる。

一方、SPH法の短所としては、(1) 必要なメモリー量は少なくすむ場合が多いが、計算時間がかかること (2) 流体が低密度の場所は低精度であるため、電磁場などのような場の量を記述するには適さないことなどであるが、(3) 計算がクラッシュしにくいので、計算が間違っていることを計算機が教えてくれないことも初学者にとっては短所となる。

もちろん、以上の指摘には例外が存在すると思うので、あくまで目安程度の意味で捉えて欲しい。

参考文献

- [1] ランダウ・リフシッツ著、「流体力学 2」, 東京図書
- [2] ランダウ・リフシッツ著、「物理的運動学 1」, 東京図書
- [3] P. Colella and P. Woodward, *J. Computat. Phys.* **54**, 174 (1984)
- [4] G. A. Dilts, *Int. J. Numer. Meth. Engng.* **44**, 1115 (1999)
- [5] S. K. Godunov, *Mat. Sb.* **47**, 271 (1959)
- [6] R. A. Gingold and J. J. Monaghan, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **181**, 375 (1977)
- [7] Y. Imaeda, & S. Inutsuka, *The Astrophysical Journal*, **569**, 501 (2002)
- [8] S. Inutsuka, *J. Comput. Phys.* **179**, 238 (2002)
- [9] S. Inutsuka & Y. Imaeda, *Comput. Fluid Dyn. J.* **9**, 316 (2001)
- [10] C. C. Lin, *Proc. Int. Sch. Phys.* **XXI**, 93(1963)
- [11] L. Lucy, *Astron. J.* **82**, 1013 (1977)
- [12] J. J. Monaghan, *Annu. Rev. Astron. Astrophys.* **30**, 543 (1992)
- [13] R. A. Gingold and J. J. Monaghan, *J. Computat. Phys.* **46**, 429 (1982)
- [14] R. D. Richtmyer & K. W. Morton, *Difference Methods for Initial-Value Problems*, (Wiley Interscience, 1967)
- [15] J. Serrin, *Handbuch der Physik VIII-I*, 125 (1959)
- [16] B. van Leer, *J. Computat. Phys.* **32**, 101 (1979)