

最小二乗法を用いたSPH法の高精度化について

A high-accuracy SPH method using the least-squares method

菖蒲迫健介¹⁾ 吉田茂生²⁾ 浅井光輝³⁾ 川田佳史⁴⁾ 中島涼輔⁵⁾ 藤岡秀二郎⁶⁾

Kensuke Shobuzako, Shigeo Yoshida, Mistuteru Asai, Yoshifumi Kawada,
Ryosuke Nakashima, and Shujiro Fujioka

¹⁾九州大学 大学院理学府 (〒 819-0395 福岡市西区元岡 744, E-mail: shobuzako.kensuke.242@s.kyushu-u.ac.jp)

²⁾九州大学 理学研究院 准教授 (〒 819-0395 福岡市西区元岡 744, E-mail: yoshida.shigeo.305@m.kyushu-u.ac.jp)

³⁾九州大学 工学研究院 准教授 (〒 819-0395 福岡市西区元岡 744, E-mail: asai@doc.kyushu-u.ac.jp)

⁴⁾海洋研究開発機構 海洋機能利用部門 (〒 237-0061 神奈川県横須賀市夏島町 2 番地 15, E-mail: kawada@jamstec.go.jp)

⁵⁾九州大学 理学研究院 特任助教 (〒 819-0395 福岡市西区元岡 744, E-mail: r.nakashima.a10@m.kyushu-u.ac.jp)

⁶⁾九州大学 工学府 (〒 819-0395 福岡市西区元岡 744, E-mail: s-fujioka@doc.kyushu-u.ac.jp)

We use the method of weighted least squares to propose a new high-accuracy Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) method, for which the accuracy of derivatives can be set to any desired order. We refer to the method as the Least-Squares SPH (LSSPH) method. The accuracy of the classical (or standard) SPH method, formulated under uniform particle configurations, is known to deteriorate when the particle configuration is disturbed. The poor accuracy has prompted the invention of many high-accuracy SPH methods which do not assume ideal situations. However, the relationship among these improved methods has not been properly elucidated. In this paper, we show that conventional high-accuracy SPH methods can be regarded as the method of weighted residuals and conclude that their differences derive from their weights. In addition, we construct a generalized SPH model by using the method of weighted least squares, which is a kind of the method of weighted residuals.

Key Words : Smoothed Particle Hydrodynamics method (SPH), Least-Squares SPH (LSSPH)

1. はじめに

数値流体計算法の一つである粒子法は、Lagrange 的でメッシュフリーなため、連続体の大変形や自由表面を含む複数相に対して有効である。特に、天文分野の星形成問題を解くために開発された Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) 法 [1,2] と呼ばれる粒子法は、その高い有用性と汎用性から、天文分野に留まらず、地球惑星科学分野の巨大衝突計算 [3] や、土木工学分野の地すべり計算 [4] など、幅広い分野で応用されてきた。

従来の SPH 法は様々な連続体計算に柔軟に適用可能であるという利点を持つ一方、精度と安定性が乏しいという重大な欠点を持つ。この要因は、SPH 法の基本式が理想的状況を前提として導出されていることにある。具体的には、重み関数が厳密に規格化性条件を満たすこと、粒子配置が規則的であることを仮定している。そのため、粒子配置が乱れた場合や境界付近で粒子欠損が生じた場合には、0 次精度すらも保証されず [5,6]、最悪の場合、数値発散を招く恐れがある。

このような古典的 SPH 法に対する直接的な処方箋として、理想的状況を仮定しない高精度な SPH 法が数多く提案されている。例えば、ある関数 $f(x)$ に対する高精度モデルとして、非対称配置によって失われたカーネル関数の規格化性や整合性を復元する Reproducing Kernel Particle 法 (RKP 法 [7])、そのうち規格化性のみを復元する Corrected SPH kernel correction 法 (CSPH

kernel correction 法 [8,9,10]) などが提案されている。

他方、流体の基礎方程式には空間微分が含まれるため、 $f(x)$ の 1 階微分や 2 階微分が必要になる。1 階微分の高精度 SPH 法としては、テーラー展開の 1 次までを満足し配置の対称性を問わず 1 次精度を有する CSPH gradient correction 法 [10,11]、さらに 2 次までを満足し 2 次精度を有する SPH (2) 法 [6] をはじめ、カーネル関数の異なる階数の微分を複数用いて、高次のテーラー展開を満足するように定式化された Modified SPH 法 (MSPH 法 [12]) などが存在する。2 階微分のラプラシアンに関しては、テーラー展開の 2 次までを満足し 1 次精度を有する手法 [5,13] に加え、その混合微分に関して、同じく 1 次精度を有する SPH (2) 法 [6] などが提案されている。また、移動最小二乗法 (moving-least-squares 法, MLS 法) によるフィッティングで、任意の階数の微分を任意の精度で求める Moving-Least SPH 法 (MLSPH 法 [14]) という、上記の高精度化法とは異なるコンセプトに由来する手法までも存在する。このように、高精度 SPH 法に関する研究は多種多様で有意義な知見が数多く得られている一方、各モデルの共通点や相違点を俯瞰し包括的に取り扱った研究は少なく、利用目的・用途に応じて最適な高精度モデルを適切に選択することは容易ではない。加えて、このような高精度 SPH 法のモデル開発は現在進行形であり、“新たな式” が歯止めなく提案されるために、その全貌を把握することはますます困難となっている。

本研究では、最小二乗法を用いた粒子法の高精度化に関する先行研究 ([15]~[17]) を参考にし、高精度 SPH 法が重み付き残差法によって一般化できることを示すことで、雑然とした高精度モデルの集約化を図る。さらに、SPH 法における任意の階数の微分を、任意の精度で実現するモデルを新たに提案する。

2. 古典的 SPH 法の概観

本節では、SPH 法の基礎式 (0 階微分, 1 階微分, 2 階微分) の導出を行い、実効的な精度を評価する。

(1) 出発式

位置 \mathbf{x} における関数 $f(\mathbf{x})$ を $\mathbf{x}' = \mathbf{x}$ 周りでテーラー展開した式を出発点とする。

$$f(\mathbf{x}') = f(\mathbf{x}) + \sum_a^{\text{ndim}} (x'^a - x^a) \frac{\partial f}{\partial x^a} + \frac{1}{2} \sum_{b,c}^{\text{ndim}} (x'^b - x^b)(x'^c - x^c) \frac{\partial^2 f}{\partial x^b \partial x^c} + R_3 \quad (1)$$

ここで上付き添え字 a, b, c は空間座標, ndim は空間次元を表す。 R_n は n 次以上の余剰項を表す。

(2) 古典的な 0 階微分式

(1) 式の両辺にカーネル関数 $W = W(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|; h)$ を掛けて、 \mathbf{x}' で空間積分する。 h は smoothing length である。

$$\begin{aligned} \int_{\Omega'} f(\mathbf{x}') W d\mathbf{x}' &= f(\mathbf{x}) \int_{\Omega'} W d\mathbf{x}' \\ &+ \sum_a^{\text{ndim}} \frac{\partial f}{\partial x^a} \int_{\Omega'} (x'^a - x^a) W d\mathbf{x}' \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{b,c}^{\text{ndim}} \frac{\partial^2 f}{\partial x^b \partial x^c} \int_{\Omega'} (x'^b - x^b)(x'^c - x^c) W d\mathbf{x}' \\ &+ \int_{\Omega'} R_3 W d\mathbf{x}' \end{aligned} \quad (2)$$

ここで Ω' は \mathbf{x}' を含む任意体積である。カーネル関数の規格化性および対称性を用いると

$$\begin{aligned} \int_{\Omega'} f(\mathbf{x}') W d\mathbf{x}' &= f(\mathbf{x}) \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{b,c}^{\text{ndim}} \frac{\partial^2 f}{\partial x^b \partial x^c} \int_{\Omega'} (x'^b - x^b)(x'^c - x^c) W d\mathbf{x}' \\ &+ \int_{\Omega'} R_4 W d\mathbf{x}' \end{aligned} \quad (3)$$

となる。ここで平均的な粒子間隔を Δx とすると

$$W(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|; h) \sim O((\Delta x)^{-\text{ndim}}) \quad (4)$$

$$\int_{\Omega'} d\mathbf{x}' \sim O((\Delta x)^{\text{ndim}}) \quad (5)$$

と表されるから、最終的に次式を得る。

$$f(\mathbf{x}) = \int_{\Omega'} f(\mathbf{x}') W d\mathbf{x}' + O((\Delta x)^2) \quad (6)$$

上式はカーネル近似 (kernel approximation) と呼ばれ、厳密に 2 次精度である。実際の計算では上式の空間積分を粒子体積の和で離散化 (粒子近似) した次式を用いる。

$$f_i = \sum_j^N f_j W_{ij} \Delta V_j + O((\Delta x)^2) \quad (7)$$

ここで $\mathbf{x} = \mathbf{x}_i$ とし, $f_i = f(\mathbf{x}_i)$, $W_{ij} = W(|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|; h)$ を定義した。 ΔV_j は粒子 j の体積, N は近傍粒子数である。

a) 規格化性に関するテスト計算

(3) 式を導く過程でカーネル関数の規格化性を用いたが、実際には離散化された式を扱うため、規格化性が厳密に満たされていない可能性がある (図 1)。そこで次式の離散化精度を検証してみた。

$$\phi_i = \sum_j^N W_{ij} \Delta V_j \sim 1 \quad (8)$$

粒子体積 ΔV は粒子質量 m , 標準密度 ρ_{ref} を用いて, $m = \Delta V \rho_{\text{ref}}$ を満たす。ここで ρ_{ref} は標準状態における密度で, SPH の離散化に依らない一定密度である。以降は簡単のため $\rho_{\text{ref}} = 1$ を考える。均等配置の場合 $\Delta V = (\Delta x)^{\text{ndim}}$ となる。本計算では $\text{ndim} = 2$ とした。



図-1 離散化された規格化性条件の概念図

Δx (すなわち, 粒子数) を変数とし, $h = 1.2\Delta x$ と固定した。カーネル関数には cubic spline を用い, 誤差評価には相対 L_2 ノルム誤差 (E_2) を用いた。

$$E_2 = \frac{\sqrt{\sum_i (X_i^{\text{cal}} - X_i^{\text{true}})^2}}{\sqrt{\sum_i (X_i^{\text{true}})^2}} \quad (9)$$

ここで X_i^{cal} は粒子 i の計算値, X_i^{true} は粒子 i の解析解を表す。従って, 本計算では $X_i^{\text{cal}} = \phi_i$, $X_i^{\text{true}} = 1$ となる。

結果は図 2 のようになった。この結果は離散化された規格化性の式 ((8) 式) が 0 次精度であることを示唆する。ゆえに, (2) 式における右辺第一項の規格化性条件に関する離散化誤差より, 実効的には以下となる。

$$f_i = \sum_j^N f_j W_{ij} \Delta V_j + O((\Delta x)^0) \quad (10)$$

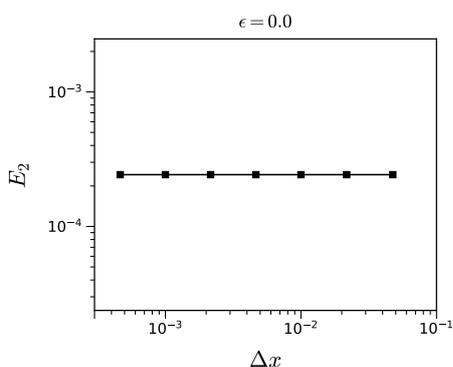


図-2 離散化された規格化条件の収束性. 横軸は粒子間隔, 縦軸は (8) 式に関する相対誤差 E_2 を表す. $\epsilon = 0$ は均等配置であることを表す.

(3) 古典的な 1 階微分式

a) 標準モデル

(1) 式の両辺に ∇W を掛けて, \mathbf{x}' で空間積分する.

$$\begin{aligned} \int_{\Omega'} f(\mathbf{x}') \nabla W d\mathbf{x}' &= f(\mathbf{x}) \int_{\Omega'} \nabla W d\mathbf{x}' \\ &+ \sum_a^{\text{ndim}} \frac{\partial f}{\partial x^a} \int_{\Omega'} (x'^a - x^a) \nabla W d\mathbf{x}' \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{b,c}^{\text{ndim}} \frac{\partial^2 f}{\partial x^b \partial x^c} \int_{\Omega'} (x'^b - x^b)(x'^c - x^c) \nabla W d\mathbf{x}' \\ &+ \int_{\Omega'} R_3 \nabla W d\mathbf{x}' \end{aligned} \quad (11)$$

カーネル関数の規格化性および対称性を用いると

$$\int_{\Omega'} f(\mathbf{x}') \nabla W d\mathbf{x}' = \nabla f + \int_{\Omega'} R_3 \nabla W d\mathbf{x}' \quad (12)$$

となる. 粒子近似して, $\mathbf{x} = \mathbf{x}_i$ とすると以下を得る.

$$\nabla_i f_i = \sum_j^N f_{ji} \nabla_i W_{ij} \Delta V_j + O((\Delta x)^2) \quad (13)$$

しかし, 実際には規格化性条件に関する離散化誤差より, 理想的な状況でも 0 次精度である.

$$\nabla_i f_i = \sum_j^N f_{ji} \nabla_i W_{ij} \Delta V_j + O((\Delta x)^0) \quad (14)$$

粒子配置が乱れたような非理想的な場合では, 実効的なカーネル関数の対称性が破綻する (図 3). 従って, 非理想的な場合では (11) 式の右辺第一項に関する打ち切り誤差より, 以下ようになる.

$$\nabla_i f_i = \sum_j^N f_{ji} \nabla_i W_{ij} \Delta V_j + O((\Delta x)^{-1}) \quad (15)$$

(14) あるいは (15) 式を 1 階微分の標準モデルと呼ぶ.

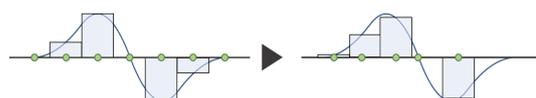


図-3 カーネル関数の対称性が破綻した場合.

b) 差モデル

標準モデルがマイナス精度になった要因は, (11) 式の右辺第一項を落としたことである. そこで, 少なくともこれを考慮すると, 非理想的な状況においても

$$\nabla_i f_i = \sum_j^N f_{ji} \nabla_i W_{ij} \Delta V_j + O((\Delta x)^0) \quad (16)$$

と精度を 1 桁向上させることができる. ここで $f_{ji} = f_j - f_i$ を定義した. 理想的な場合の精度は同じである. これを標準モデルと区別して差モデルと呼ぶ.

(4) 古典的な 2 階微分式

a) 標準モデル

2 階微分の古典的モデルの代表例として, 1 階微分の式 ((14) 式) を再度微分した次式が提案されている [18].

$$\frac{\partial^2 f_i}{\partial x_i^a \partial x_i^b} = \sum_j^N f_j \frac{\partial^2 W_{ij}}{\partial x_i^a \partial x_i^b} \Delta V_j + O((\Delta x)^{-2}) \quad (17)$$

上式は (1) 式の右辺第一項に伴う打ち切り誤差より, 粒子配置の状況に関わらず -2 次精度 (混合微分は 0 次精度) である. このモデルを 2 階微分の標準モデルとする.

b) ラプラシアンモデル

1 階微分の差モデルと同様に, (1) 式の右辺第一項を考慮することで高精度化を行う. ただし, 理想的な場合において (1) 式の右辺第二項が消去されるよう, $\frac{\partial^2 W}{\partial x^a \partial x^b}$ の代わりに, $(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) \cdot \nabla W / r^2$ を掛ける ($r = |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|$). 式変形を重ねると, 以下を得る.

$$\nabla_i^2 f_i = 2 \sum_j^N f_{ji} \frac{\mathbf{x}_{ji} \cdot \nabla_i W_{ij}}{r_{ij}^2} \Delta V_j + O((\Delta x)^0) \quad (18)$$

ここで $r_{ij} = |\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|$ である. 導出には規格化性条件を利用しているため, その離散化誤差より理想的な場合においても 0 次精度である. 非理想的な場合においては (1) 式の右辺第二項に伴う打ち切り誤差より -1 次精度となる.

$$\nabla_i^2 f_i = 2 \sum_j^N f_{ji} \frac{\mathbf{x}_{ji} \cdot \nabla_i W_{ij}}{r_{ij}^2} \Delta V_j + O((\Delta x)^{-1}) \quad (19)$$

本モデルは 2 階微分の中でもラプラシアンに関する形式であるから, ラプラシアンモデルと呼ぶ.

以上から明らかなように, 古典的 SPH 法の基礎式は理想的な場合でも 0 次精度, 非理想的な場合ではマイナス精度となってしまいうため, 高精度化が不可欠である.

3. 従来の高精度 SPH 法の概観

本節では代表的な高精度 SPH 法を俯瞰する. 全モデルに共通な基本方針は, 古典的 SPH 法で打ち切った, テーラー展開の高次の項を考慮することである.

(1) CSPH 法

CSPH 法 [8]~[11]) は 0 階微分と 1 階微分の高精度モデルで, 理想的な場合に 2 次精度, 非理想的な場合でも 1 次精度を保証するモデルである. 0 階微分の式を kernel correction 法, 1 階微分の式を gradient correction 法と区別する [10]. CSPH 法は古典的 SPH 法の拡張版であり, それぞれ (2) 式と (11) 式から出発する.

a) CSPH kernel correction 法

(2) 式において, 右辺第一項の $\int_{\Omega'} W dx'$ を考慮すると

$$\nabla_i f_i = \sum_j f_j \Delta V_j \frac{W_{ij}}{\sum_k W_{ik} \Delta V_k} + O((\Delta x)^1) \quad (20)$$

b) CSPH gradient correction 法

(11) 式において, 右辺第一項に加え, 右辺第二項まで考慮すると

$$\nabla_i f_i = \sum_j f_j \Delta V_j \left[\sum_k \mathbf{x}_{ki} \otimes \nabla_i W_{ik} \Delta V_k \right] \cdot \nabla_i W_{ij} + O((\Delta x)^1) \quad (21)$$

(20) 式および (21) 式は理想的な場合には 2 次精度となる. ただし, CSPH 法ではテーラー展開の 2 階より高次の項が考慮されておらず, 1 次精度以上は見込めない上に, 2 階微分の高精度化も行えず, 限定的である.

(2) SPH(2) 法

SPH(2) 法 [6] は CSPH 法で困難であった 2 階微分の取り扱いを可能にした. 具体的には, (21) 式の右辺に 2 次の項を考慮することで, 高精度化を図っている.

$$\begin{aligned} \nabla_i f_i &= \sum_j f_j \Delta V_j \left[\sum_k \mathbf{x}_{ki} \otimes \nabla_i W_{ik} \Delta V_k \right] \cdot \nabla_i W_{ij} \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{b,c}^{\text{ndim}} \frac{\partial^2 f}{\partial x^b \partial x^c} \sum_j x_{ji}^b x_{ji}^c \Delta V_j \left[\sum_k \mathbf{x}_{ki} \otimes \nabla_i W_{ik} \Delta V_k \right] \cdot \nabla_i W_{ij} \\ &+ O((\Delta x)^2) \end{aligned} \quad (22)$$

右辺の 2 階微分は未知量である. そこで, 上式を元のテーラー展開の式 (1) 式に代入し, 適切な変形を施した後, 2 階微分に関する方程式を解く. 得られた 2 階微分の式はテーラー展開の 2 次までを考慮した式であるから, 少なくとも 1 次精度を有する (理想的には 2 次精度). また, (22) 式に後退代入することで, 1 階微分に関して配置に関わらず 2 次精度を有するモデルが得られる. 3 階より高次の項を取り込むことも原理的には可能であるが, 数学的にかなり煩雑となる.

(3) MSPH 法

MSPH 法 [12] では, (2) 式, (11) 式を離散化した式に加え, カーネル関数の二階微分を掛けた

$$\begin{aligned} \sum_j^N \Delta V_j f_j \frac{\partial^2 W_{ij}}{\partial x_i^\alpha \partial x_i^\beta} &= f_i \sum_j^N \Delta V_j \frac{\partial^2 W_{ij}}{\partial x_i^\alpha \partial x_i^\beta} \\ &+ \sum_a^{\text{ndim}} \frac{\partial f_i}{\partial x_i^a} \sum_j^N x_{ji}^a \Delta V_j \frac{\partial^2 W_{ij}}{\partial x_i^\alpha \partial x_i^\beta} \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{b,c}^{\text{ndim}} \frac{\partial^2 f_i}{\partial x_i^b \partial x_i^c} \sum_j^N x_{ji}^b x_{ji}^c \Delta V_j \frac{\partial^2 W_{ij}}{\partial x_i^\alpha \partial x_i^\beta} \\ &+ O((\Delta x)^1) \end{aligned} \quad (23)$$

を連立して, 未知数 $[f_i, f_{i,x}, f_{i,y}, f_{i,xx}, f_{i,xy}, f_{i,yy}]$ を一挙に求める (ndim = 2). ここで α, β は空間座標を表す. $f_{i,x}$ は f_i の x 微分であることを表し, $f_{i,xx}$ は x の二階微分であることを表す. この方法で 3 階より高次の微分を考慮するには, カーネル関数の 3 階以上の微分が必要となるが, SPH 法の計算で広く用いられる cubic spline のような低級なスプライン関数では扱えない.

(4) MLSPH 法

MLSPH 法 [14] は移動最小二乗法による内挿補間 [19] をベースとして手法であり, 上記の高精度化法とは系統が異なる. 出発式は同じくテーラー展開の式である. ただし, (1) 式において $\mathbf{x}' = \mathbf{x}_j, \mathbf{x} = \mathbf{x}_i$ とした式を扱う.

$$f_j = f_i + \sum_a^{\text{ndim}} x_{ji}^a \frac{\partial f_i}{\partial x_i^a} + \frac{1}{2} \sum_{b,c}^{\text{ndim}} x_{ji}^b x_{ji}^c \frac{\partial^2 f_i}{\partial x_i^b \partial x_i^c} + R_3 \quad (24)$$

上式は一本の式であるが, 着目粒子 i 近傍には粒子 j が多数存在するため, 実際には未知量よりも条件式の方が多し. そのため, 最小二乗法によるフィッティングで未知数を求める. 例として, 二階微分までを考え (ndim = 2), 近傍粒子 j が N 個存在する場合を考える ($j = 1, 2, \dots, N$). この時, 上式は以下のように書ける.

$$\begin{bmatrix} 1 & x_{1i} & y_{1i} & x_{1i}^2 & x_{1i}y_{1i} & y_{1i}^2 \\ 1 & x_{2i} & y_{2i} & x_{2i}^2 & x_{2i}y_{2i} & y_{2i}^2 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_{Ni} & y_{Ni} & x_{Ni}^2 & x_{Ni}y_{Ni} & y_{Ni}^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f_i \\ f_{i,x} \\ f_{i,y} \\ f_{i,xx} \\ 2f_{i,xy} \\ f_{i,yy} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_N \end{bmatrix} \quad (25)$$

低次のテーラー展開は \mathbf{x}_i 近傍で正しいため, 距離に関する重み ψ_{ij} を用いた重み付き最小二乗法を適用する.

$$\mathbf{M}_i \mathbf{X}_i = \mathbf{f}_i \quad (26)$$

$$\mathbf{M}_i = \sum_j \psi_{ij} \mathbf{p}_{ji} \mathbf{p}_{ji}^T \quad (27)$$

$$\mathbf{X}_i = [f_i, f_{i,x}, f_{i,y}, f_{i,xx}, 2f_{i,xy}, f_{i,yy}]^T \quad (28)$$

$$\mathbf{f}_i = \sum_j \psi_j f_j \mathbf{p}_{ji} \quad (29)$$

$$\mathbf{p}_{ji} = [1, x_{ji}, y_{ji}, x_{ji}^2, x_{ji}y_{ji}, y_{ji}^2]^T \quad (30)$$

行列が特異でなければ解は一意に定まる。なお、重み ψ_{ij} は少なくとも正であれば任意である。MLSPPH 法では (28) 式を形状関数の係数と見なすため、内挿補間によって求めた f_i を微分することで、微分値を決める。一方、 f_i の微分を上式から直接取得することも考えられ、Consistent Particle Hydrodynamics in Strong Form 法 (CPHSF 法 [17]) として提案されている。また、最小二乗法を用いた粒子法の高精度化は、moving particle semi-implicit 法 (MPS 法 [20]) にも適用されており least squares MPS 法 (LSMPS 法 [15,16]) と呼ばれている。これらのモデルでは $\psi_{ij} = W_{ij}$ が用いられている。

MLSPPH 法を含む最小二乗法による高精度化は、他の高精度化法と異なり、容易に任意の階数の微分を任意の精度で求めることが可能である。

4. 重み付き残差法による SPH 法の一般化

本節では、上記の高精度 SPH 法が重み付き残差法に集約できることを示し、重みの選び方が本質的な差異であることを示す。

(1) SPH 法における重み付き残差法

真の値 $f(x')$ を $x' = x$ 近傍でテーラー展開することを考える。簡単のため、2次までとする。

$$\begin{aligned} \widetilde{f(x')} &= f(x) + \sum_a^{\text{ndim}} (x'^a - x^a) \frac{\partial f}{\partial x^a} \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{b,c}^{\text{ndim}} (x'^b - x^b)(x'^c - x^c) \frac{\partial^2 f}{\partial x^b \partial x^c} \end{aligned} \quad (31)$$

ここで $\widetilde{f(x')}$ は $f(x')$ の近似値であり、低次で打ち切っているために、通常は $f(x') \neq \widetilde{f(x')}$ である。

領域全体に対する重み付き残差を考え、これが0になるように $f(x')$ の未定係数を決める (重み付き残差法)。

$$\int_{\Omega'} (f(x') - \widetilde{f(x')}) \mathcal{W}(x') dx' = 0 \quad (32)$$

ここで $\mathcal{W}(x')$ は x' に関する適当な重みである。SPH 法の基本方針である粒子近似を適用し、 $x' = x_j, x = x_i$ とすると、SPH 法における重み付き残差法の式を得る。

$$\sum_j^N (f_j - \widetilde{f}_j) \mathcal{W}(x_j) \Delta V_j = 0 \quad (33)$$

ここで N は領域に含まれる全粒子数である。実効的な精度は (31) 式の基底の取り方、すなわち、展開次数に依存する。また、式の形から明らかのように、重み $\mathcal{W}(x_j)$ として $W_{ij}, \partial W_{ij} / \partial x_i^a, \partial^2 W_{ij} / \partial x_i^b \partial x_i^c$ などを用いれば、古典的 SPH 法に還元される。

(2) 従来高精度 SPH 法との対応

a) MSPH 法の再現

(31) 式の未定係数 (f_i の微分値) を決めるには、同じ数の式が必要になる。その $\mathcal{W}(x_j)$ の選び方は任意であり、例えば $W_{ij}, \partial W_{ij} / \partial x_i^a, \partial^2 W_{ij} / \partial x_i^b \partial x_i^c$ を選ぶことが考えられる。これは MSPH 法そのものである。

b) 最小二乗法による高精度粒子法の再現

恣意的な上記の方法とは対照的に、 $\mathcal{W}(x_j)$ を機械的に決定することも可能である。それは最適化を適用することであり、この帰結として得られる解が最小二乗解である。具体的には $\mathcal{W}(x_j)$ として以下を選ぶ。

$$\mathcal{W}(x_j) = \frac{\partial (f_j - \widetilde{f}_j)}{\partial X_i} \psi_{ij} \quad (34)$$

ここで ψ_{ij} は距離 r_{ij} に関する重みで、 X_i は (28) 式で示した未知量である。これを (33) 式に代入すると

$$\sum_j^N \psi_{ij} \frac{\partial}{\partial X_i} (f_j - \widetilde{f}_j)^2 \Delta V_j = 0 \quad (35)$$

が得られ、重み付き最小二乗法の式となる。 ψ_{ij} が単位行列の場合には通常の最小二乗法となる。上式は (25) 式を (26) 式に変形する操作に対応しており、すなわち、(25) 式の $N \times 6$ 行列に対する無数の一般化逆行列の中から、ムーア・ペンローズ型を選んだことに対応している。ここで $\psi_{ij} = W_{ij} / \Delta V_j$ とすると MLSPPH 法、CPHSF 法、LSMPS 法の式系となる。さらに

$$\psi_{ij} = -\frac{1}{r_{ij}} \frac{dW_{ij}}{dr_{ij}} \quad (36)$$

とすると、CSPH gradient correction 法が導出されるため、CSPH 法は最小二乗法の一種と言える。また、CSPH 法を用いた SPH(2) 法も最小二乗法的な手法である。

(3) SPH 法の一般化モデル

以上から、高精度 SPH 法の様々な“異形”は、重み付き残差法の「重み」の違いによって生じることが分かった。最後に、理想的な場合に古典的 SPH 法の 0 階微分の式に還元されるような一般化モデルを提案する。(33) 式の重みとして、以下を選ぶ。

$$\mathcal{W}(x_j) = \frac{\partial (f_j - \widetilde{f}_j)}{\partial X_i} W_{ij} \quad (37)$$

これは $\psi_{ij} = W_{ij}$ の場合の重み付き最小二乗法である。この式系は、MLSPPH 法、CPHSF 法などと異なり、古典的 SPH 法を包括した拡張式である。我々はこのモデルを最小二乗 SPH 法 (Least-Squares SPH 法) と名付けた。LSSPH 法の基本的な枠組みとして、MLSPPH 法のように微分値を一挙に解く方法と、SPH(2) 法のように後退代入を用いて微分値を解く方法の 2 つを提案する。

a) direct 形式

解き方は MLSPPH 法と同じで、行列 M ((26) 式) に関する一次方程式を解けば良い。この方法では未知量である微分値を一度に全て求めることが可能なため direct 形式と呼ぶ。

b) backward 形式

同じく、最小二乗法を用いて微分値を求めるが、この形式では複数の工程を経る。SPH(2) 法を例に取る。まず、重み (36) 式を用いて重み付き最小二乗法を行うと、

未知量である2階微分を含んだ1階微分に関する式が得られる。これを(31)式に戻して、今度は

$$\psi_{ij} = \frac{\mathbf{x}_{ji} \cdot \left[\sum_k^N \mathbf{x}_{ki} \otimes \nabla_i W_{ik} \Delta V_k \right] \nabla_i W_{ij}}{r_{ij}^A} \quad (38)$$

を用いた重み付き最小二乗法を行い、2階微分を求める。得られた2階微分を1階微分の式に後退代入すれば、2階微分までを考慮した1階微分が得られる。このように最小二乗法を複数回行って、後退代入により高精度化する手法をbackward形式と呼ぶ。direct形式よりも複雑ではあるが、1回あたりに解く行列サイズを小さくでき、計算が安定化しやすいという報告もある[21]。

5. 結論

古典的SPH法は実効的な規格化性や対称性が破綻した場合に、精度が劇的に悪化することが分かった。この対処法としてテーラー展開の高次の項を考慮する高精度なSPH法が複数提案されているが、各モデルの共通点や相違点を俯瞰した網羅的な研究は数少なく、その全貌を把握することは困難であった。そのため、本研究で代表的な高精度SPH法の整理を行った。その結果、多くの高精度SPH法が本質的には重み付き最小二乗法による定式化に集約できることが判明した。そこで、理想的な場合に古典的SPH法の0階微分式に原点回帰するようなSPH法の一般化モデル(LSSPH法)を構築した。今後はLSSPH法を幾つかの流体計算に実装し、数値実験を重ねることで、その有効性を検証する。

謝辞: 本研究は、JST次世代研究者挑戦的研究プログラムJPMJSP2136の支援を受けた。

参考文献

- [1] Lucy, L. B., A numerical approach to the testing of the fission hypothesis, *Astron. J.*, **82**, 1013-1024, 1977
- [2] Gingold, R. A., Monaghan, J. J., Smoothed particle hydrodynamics: theory and application to non-spherical stars, *Mon. Notices Royal Astron. Soc.*, **181**, 375-389, 1977
- [3] Benz, W., Slattey, W. L., Cameron, A. G. W., The origin of the moon and the single-impact hypothesis I, *Icarus*, **66**, 3, 515-535, 1986
- [4] Morikawa, D. S., Asai, M., A phase-change approach to landslide simulations: Coupling finite strain elastoplastic TLSPH with non-Newtonian IISPH, *Comput. Geotech.*, **148**, 104815, 2022
- [5] Basic, J., Degiuli, N., Ban, D., A class of renormalised meshless Laplacians for boundary value problems, *J. Comput. Phys.*, **354**, 269-287, 2018
- [6] Asai, M., Fujioka, S., Saeki, Y., Morikawa, D. S., Tsuji, K., A class of second-derivatives in the Smoothed Particle Hydrodynamics with 2nd-order accuracy and its application to incompressible flow simulations, *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, **415**, 116203, 2023
- [7] Liu, W. K., Jun, S., Zhang, Y. F., Reproducing kernel particle methods, *Int. J. Numer. Methods Fluids*, **20**, 8-9, 1081-1106, 1995
- [8] Chen, J. K., Beraun, J. E., Carney, T. C., A corrective smoothed particle method for boundary value problems in heat conduction, *Int. J. Numer. Methods Eng.*, **46**, 2, 231-252, 1999
- [9] Chen, J. K., Beraun, J. E., Jih, C. J., An improvement for tensile instability in smoothed particle hydrodynamics, *Comput. Mech.*, **23**, 4, 279-287, 1999
- [10] Bonet, J., Lok, T-SL., Variational and momentum preservation aspects of smooth particle hydrodynamic formulations, *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, **180**, 1-2, 97-115, 1999
- [11] Randles, P. W., Libersky, L. D., Smoothed Particle Hydrodynamics: Some recent improvements and applications, *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, **139**, 1, 375-408, 1996
- [12] Zhang, G. M., Batra, R. C., Modified smoothed particle hydrodynamics method and its application to transient problems, *Comput. Mech.*, **34**, 137-146, 2004
- [13] Fatehi, R., Manzari, M. T., Error estimation in smoothed particle hydrodynamics and a new scheme for second derivatives, *Comput. Math. Appl.*, **61**, 2, 482-498, 2011
- [14] Dilts, G. A., Moving-least-squares-particle hydrodynamics - I. Consistency and stability, *Int. J. Numer. Methods Eng.*, **44**, 8, 1115-1155, 1999
- [15] Tamai, T., Koshizuka, S., Least squares moving particle semi-implicit method: An arbitrary high order accurate meshfree Lagrangian approach for incompressible flow with free surfaces, *Comput. Part. Mech.*, **1**, 277-305, 2014
- [16] Tamai, T., Murotani, K., Koshizuka, S., On the consistency and convergence of particle-based meshfree discretization schemes for the Laplace operator, *Computers and Fluids*, **142**, 79-85, 2017
- [17] Yamamoto, S., Makino, J., A formulation of consistent particle hydrodynamics in strong form, *Publ. Astron. Soc. Jpn.*, **69**, 2, 35, 2017
- [18] Basa, M., Quinlan, N. J., Lastiwka, M., Robustness and accuracy of SPH formulations for viscous flow, *Int. J. Numer. Methods Fluids*, **60**, 10, 1127-1148, 2009
- [19] Lancaster, P., Salkauskas, K., Surfaces generated by moving least squares methods, *Math. Comput.*, **37**, 155, 141-158, 1981
- [20] Koshizuka, S., Nobe, A., Oka, Y., Numerical analysis of breaking waves using the moving particle semi-implicit method, *Int. J. Numer. Methods Fluids*, **26**, 7, 751-769, 1998
- [21] Wang, Z., Matsumoto, T., Duan, G., Matsunaga, T., Compact moving particle semi-implicit method for incompressible free-surface flow, *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, **414**, 116168, 2023