

最小二乗 SPH 法の打切り誤差に基づく 古典的 SPH 法の離散化誤差の検証

Verification of the discretization error of classical SPH models
based on the truncation error of the least squares SPH method

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

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

¹⁾九州大学 大学院理学府 地球惑星科学専攻 (〒 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 理学研究院地球惑星科学部門 准教授 (〒 819-0395 福岡市西区元岡 744, E-mail:

yoshida.shigeo.305@m.kyushu-u.ac.jp)

³⁾東京大学 大学院理学系研究科 (〒 113-0033 東京都文京区本郷 7-3-1, E-mail: ykawada@g.ecc.u-tokyo.ac.jp)

⁴⁾神戸大学 大学院システム情報学研究科 特命助教 (〒 657-8501 神戸市灘区六甲台町 1-1, E-mail:

r.nakashima.a10@panda.kobe-u.ac.jp)

⁵⁾九州大学 大学院工学府 土木工学専攻 (〒 819-0395 福岡市西区元岡 744, E-mail: s-fujioka@doc.kyushu-u.ac.jp)

⁶⁾九州大学 工学研究院 附属アジア防災研究センター 教授 (〒 819-0395 福岡市西区元岡 744, E-mail: asai@doc.kyushu-u.ac.jp)

This study analytically and numerically examines the discretization errors of classical smoothed particle hydrodynamics (SPH) models using the truncation error of the least squares SPH (LSSPH) method. The LSSPH method is a high-accuracy particle scheme and a generalized formulation encompassing classical SPH models. We demonstrate that classical SPH models can be derived by appropriately selecting the weight function employed in the LSSPH method. Furthermore, based on both the truncation error analysis of the LSSPH method and a two-dimensional numerical test, we show that classical SPH models exhibit zeroth-order accuracy or lower under irregular particle distributions.

Key Words : SPH, Least Squares SPH (LSSPH), Discretization error analysis

1. はじめに

Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) 法 [1,2] は粒子法の一つであり、高い汎用性を有する数値流体計算法である。メッシュフリーな SPH 法は、境界の大変形や相変化の取り扱いに有効であり、宇宙惑星科学における星形成 [1,2] や巨大衝突 [3], 土木工学における地すべり [4] など、幅広い分野で応用されてきた。

一方、古典的な SPH 法は、粒子配置が乱れた場合に離散化精度が著しく低下することが知られている [5,6]。この問題は、古典的 SPH 法の離散化式が理想的な仮定の下で導出されていることに起因する。具体的には、カーネル関数が規格化性条件を厳密に満たすこと、および粒子配置が対称的であることを仮定している。従って、流れにより粒子配置が乱された場合や境界付近で粒子配置に偏りが生じた場合には、離散化式の整合性が保証されず、0 次精度 (すなわち、解像度を大きくしても精度が向上しない) すら満たされなくなる [6]。

この問題を解決するため、我々は高精度な最小二乗 SPH (Least Squares SPH, LSSPH) 法を開発した [6,7]。LSSPH 法は、最小二乗法の枠組みで定式化された SPH 法であり、Moving Least Squares (MLS) 法 [8] の diffuse derivative モデル [9,10] に基づく [6]。LSSPH 法は、古典的 SPH 法とは異なり、規格化性条件や粒子配置の対称性を仮定しないため、任意の階数の微分係数を任意の

精度で求めることができる。加えて、LSSPH 法は SPH 法の一般化モデルとして位置付けることができ、最小二乗法で用いる重みを適切に選択することで、従来の SPH 法の離散化式を導出することができる [6]。

本研究では、LSSPH 法に関する基礎的研究の位置づけとして、LSSPH 法の一般化式における打切り誤差を用い、従来の SPH 法の離散化誤差を解析的に評価した。さらに、2 次元の数値テストを実施することで、この解析的評価の妥当性を検証した。

2. LSSPH 法の定式化

(1) LSSPH 法の一般化式

ある関数 f に関して、粒子 i の位置 \mathbf{x}_i における関数値 $f(\mathbf{x}_i) =: f_i$ の微分係数を近似的に求めることを考える。そのために、粒子 i 近傍の粒子 j に関して、以下のテーラー展開を考える。

$$\tilde{f}_j = \sum_{k=0}^q \mathbf{a}_{j,k}^T \mathbf{d}_k \quad (1)$$

$$[\mathbf{a}_{j,k}]_{\alpha(k)} := \frac{1}{l_x! l_y! l_z!} x_{ji}^{l_x} y_{ji}^{l_y} z_{ji}^{l_z} \quad (2)$$

$$[\mathbf{d}_k]_{\alpha(k)} := \frac{\partial^k f}{\partial x^{l_x} \partial y^{l_y} \partial z^{l_z}} \Big|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_i} \quad (3)$$

$$l_x + l_y + l_z = k \quad (l_x, l_y, l_z \geq 0) \quad (4)$$

ここで、 \tilde{f}_j ($j = 1, 2, \dots, N$) は f_j を近似した関数 (N は解析領域に含まれる全粒子数で十分大きな数)、 $\mathbf{a}_{j,k}$ は相対位置ベクトル $\mathbf{x}_{ji} := \mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i$ と位置 \mathbf{x}_i における k 階の微分係数 \mathbf{d}_k に関する基底ベクトル、 q はテーラー展開で考慮した最大次数、 l_x, l_y, l_z は x, y, z 方向の基底の次数をそれぞれ表す。 $\alpha(k)$ は、 $\mathbf{a}_{j,k}$ と \mathbf{d}_k の各要素のインデックスを表し、以下のように定義される。

$$\alpha(k) := 1, 2, \dots, \binom{k + (3 - 1)}{k} \quad (k = 0, 1, \dots, q) \quad (5)$$

\mathbf{d}_k の近似値を求めるため、残差 $R_j := f_j - \tilde{f}_j$ の二乗重み付き和を最小にすることを考える。まず、(1) 式を残差 R_j の定義に代入し、全ての j ($j \neq i$) を考慮することで

$$\mathbf{R} = \mathbf{f} - \mathbf{A}\mathbf{d} \quad (6)$$

を得る。ここで、残差ベクトル $\mathbf{R} := [R_1 \dots R_N]^T$ および、ベクトル $\mathbf{f} := [f_1 \dots f_N]^T$ を定義した。 \mathbf{A} および \mathbf{d} は以下のように定義されるブロック行列である。

$$\mathbf{A} := \begin{bmatrix} \mathbf{a}_{1,0}^T & \mathbf{a}_{1,1}^T & \dots & \mathbf{a}_{1,q}^T \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \mathbf{a}_{N,0}^T & \mathbf{a}_{N,1}^T & \dots & \mathbf{a}_{N,q}^T \end{bmatrix} \quad (7)$$

$$\mathbf{d} := [\mathbf{d}_0^T \dots \mathbf{d}_q^T]^T \quad (8)$$

目的関数として、残差の重み付き二乗和を考える。

$$\mathcal{R}_2 := \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \psi_j(r_{ij}) R_j^2 = \frac{1}{2} \mathbf{R}^T \mathbf{\Psi} \mathbf{R} \quad (9)$$

ここで、 $\psi_j(r_{ij})$ (≥ 0) は距離 $r_{ij} := |\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|$ に関して単調減少する正の重み関数で、 $\mathbf{\Psi} := \text{diag}\{\psi_1 \dots \psi_N\}$ は重み関数に関する対角行列である。重み関数を距離の単調減少関数として設定したのは、粒子 j が粒子 i に近いほどテーラー展開が精確になることを考慮したためである。また、粒子 i が全ての粒子と相互作用するのは、物理的にも計算量的にも現実的でないので、重み関数はある典型的な距離でその値がゼロにあることが望ましい(つまり、重み関数は台を持つ)。最後に、最適化 $\partial \mathcal{R}_2 / \partial \mathbf{d} = \mathbf{0}$ を行うと、以下を得る ($\mathbf{0}$ はゼロベクトル)。

$$\tilde{\mathbf{d}} = (\mathbf{A}^T \mathbf{\Psi} \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^T \mathbf{\Psi} \mathbf{f} \quad (10)$$

ここで、 $\tilde{\mathbf{d}}$ は真の値 \mathbf{d} に関する最小二乗推定値を表す。便宜上、モーメント行列 \mathbf{M} とベクトル \mathbf{b} を以下のように定義する。

$$\mathbf{M} := \mathbf{A}^T \mathbf{\Psi} \mathbf{A} \quad (11)$$

$$\mathbf{b} := \mathbf{A}^T \mathbf{\Psi} \mathbf{f} \quad (12)$$

この時

$$\tilde{\mathbf{d}} = \mathbf{M}^{-1} \mathbf{b} \quad (13)$$

となる。微分係数の階数に関してブロック化すると

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} \mathbf{M}_{00} & \dots & \mathbf{M}_{0q} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{M}_{q0} & \dots & \mathbf{M}_{qq} \end{bmatrix} \quad (14)$$

$$\mathbf{b} = [\mathbf{b}_0^T \dots \mathbf{b}_q^T]^T \quad (15)$$

となる。ここで、ブロック行列に関する添え字 $k, l = 0, 1, \dots, q$ を用いて、以下を定義した。

$$\mathbf{M}_{lk} := \sum_{j=1}^N \psi_j \mathbf{a}_{j,l} \mathbf{a}_{j,k}^T \quad (16)$$

$$\mathbf{b}_l := \sum_{j=1}^N \psi_j f_j \mathbf{a}_{j,l} \quad (17)$$

これらを用いると、最終的に

$$\tilde{\mathbf{d}}_k = [\mathbf{M}^{-1} \mathbf{b}]_k \quad (18)$$

を得る。ここで、(18) 式は最小二乗推定値 $\tilde{\mathbf{d}}$ の k 番目のブロック要素、すなわち、 k 階の微分係数をまとめたベクトルを表す。得られた (18) 式は、最小二乗法に基づく粒子法の一般化式であり、MLS 法 [8] の diffuse derivative モデル [9,10] と数学的に等価である。

LSSPH 法では重みとして

$$\psi_j(r_{ij}) \propto \frac{\partial^\beta W(r_{ij}; h)}{\partial r_{ij}^\beta} V_j \quad (19)$$

を用いる。ここで、 $W(r_{ij}; h) =: W_{ij}$ は SPH 法で用いられるカーネル関数、 h は台の大きさを規定するパラメータ (smoothing length)、 V_j は粒子 j の体積、 β は 0 以上の整数である。従来の SPH 法は、LSSPH 法で用いられる重み ((19) 式) を適当に設定することで導出することができる (詳しくは第 3 節を参照)。なお、LSSPH 法は既存の最小二乗法に基づく粒子法 (例えば、Least Squares Moving Particle Semi-implicit (LSMPS) 法 [11]; Consistent Particle Hydrodynamics in Strong Form (CPHSF) 法 [12]) の数学的枠組みと同一である。その唯一の違いは、様々な SPH 法の離散化式を内包するように、重みとして (19) 式を用いることである。こうすることで、SPH 法に関する既往研究で得られた多様な知見を、LSSPH 法の枠組みに直接活用することができる。

(2) LSSPH 法の打ち切り誤差

LSSPH 法における k 階の微分係数 ((18) 式) の打ち切り誤差を考える。まず、(10) 式で表される最小二乗推定値が、真の値 \mathbf{d} に対して誤差 $\mathbf{\Delta}$ を含むと仮定する。

$$\mathbf{\Delta} := \tilde{\mathbf{d}} - \mathbf{d} = \left\{ (\mathbf{A}^T \mathbf{\Psi} \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^T \mathbf{\Psi} \mathbf{f} \right\} - \mathbf{d} \quad (20)$$

ここで、 $\mathbf{\Delta} := [\mathbf{\Delta}_0^T \mathbf{\Delta}_1^T \dots \mathbf{\Delta}_q^T]^T$ は打ち切り誤差に関するブロック行列である。両辺に左から \mathbf{A} を掛け、その後 (6) 式を代入し、得られた式に左から $\mathbf{A}^T \mathbf{\Psi}$ を掛けると

$$\mathbf{A}^T \mathbf{\Psi} \mathbf{A} \mathbf{\Delta} = \mathbf{A}^T \mathbf{\Psi} \mathbf{R}. \quad (21)$$

を得る. l 番目のブロックを取り出すと ($l = 0, 1, \dots, q$)

$$\sum_{j=1}^N \psi_j \mathbf{a}_{j,l} \mathbf{a}_{j,0}^T \Delta_0 + \dots + \sum_{j=1}^N \psi_j \mathbf{a}_{j,l} \mathbf{a}_{j,q}^T \Delta_q = \sum_{j=1}^N \psi_j \mathbf{a}_{j,l} R_j \quad (22)$$

となる. 典型的な粒子間隔 Δx を用いると, $|\mathbf{R}| = O((\Delta x)^{q+1})$ および $|\mathbf{a}_{j,k}| = O((\Delta x)^k)$ ($k = 0, 1, \dots, q$) と書かれるので

$$|\Delta_k| \leq O((\Delta x)^{q+1-k}) \quad (23)$$

を最終的に得る. この結果は, 「テーラー展開 ((1) 式) に関して q 階微分までを考慮した場合, 最小二乗推定値 $\tilde{\mathbf{d}}$ における k 階の微分係数が, 粒子間隔 Δx に関して少なくとも $(q+1-k)$ 次精度を有する」ことを示している. すなわち, (18) 式の打ち切り誤差は

$$\tilde{\mathbf{d}}_k = \mathbf{d}_k + O((\Delta x)^{q+1-k}) \quad (24)$$

と表すことができる.

3. 従来の SPH 法の再現と離散化誤差の解析的評価

本節では, 0,1,2 階微分に関する従来の SPH モデルが, LSSPH 法で用いる重みを適当に選ぶことで再現されることを示す. その上で, LSSPH 法の打ち切り誤差を表す (24) 式を用い, これらの実効的な離散化誤差を解析的に求める. 以下では, スムージング長さ h は粒子間隔 Δx に比例し, 台 Ω に含まれる粒子数は一定であると仮定する.

(1) 0 階微分

$k = 0, q = 0, \psi_j = W_{ij} V_j (\geq 0)$ とすると, (18) 式および (24) 式は以下のように書ける.

$$\tilde{f}_i = \left(\sum_{j \in \Omega_i} W_{ij} V_j \right)^{-1} \sum_{j \in \Omega_i} f_j W_{ij} V_j =: \langle f \rangle_i^{\text{CSPH}} \quad (25)$$

$$\langle f \rangle_i^{\text{CSPH}} = f_i + O((\Delta x)^1) \quad (26)$$

ここで, Ω_i は位置 \mathbf{x}_i を中心とするカーネル関数の台, f_i は位置 \mathbf{x}_i における関数 f の真の値をそれぞれ表す. 記号 $\langle f \rangle_i^{\text{model}}$ は, SPH 法の離散化モデルを用いて計算された位置 \mathbf{x}_i における関数 f の値を表し, 上付き添え字 “model” は, 各離散化モデルの名称を表す. (25) 式は 0 階微分に関する SPH 法の高精度モデルであり, Bonet and Lok [13] によって提案された Corrected SPH (CSPH) kernel correction モデルを表す.

得られた (25) 式から, 0 階微分に関する古典的モデルを導く. 古典的 SPH 法では, 空間微分を粒子体積の和として表現する. 例えば, カーネル関数の規格化性条件

$$\int_{\Omega_i} W_{ij} d\mathbf{x}_j = 1 \quad (27)$$

を離散化 (粒子近似) すると

$$\sum_{j \in \Omega_i} W_{ij} V_j = 1 \quad (28)$$

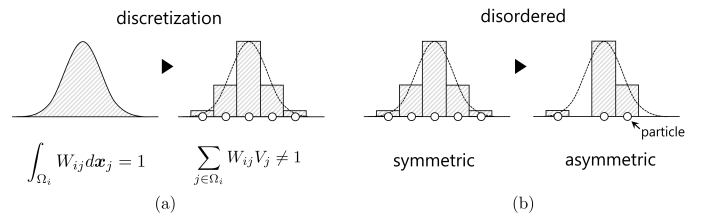


図-1 規格化性条件に関する誤差の概念図 (本図は Shobuzako et al. [6] から引用). (a) 粒子近似に伴う誤差. (b) 粒子配置の対称性の破綻.

となる. これを (25) 式および (26) 式に代入すると

$$\langle f \rangle_i^{\text{classical}} := \sum_{j \in \Omega_i} f_j W_{ij} V_j = f_i + O((\Delta x)^1)_{\text{unity}} \quad (29)$$

というよく知られた古典的 SPH 法の基礎式を得る. ここで, 添え字 unity は規格化性条件が厳密に満たされる場合の精度を表す.

しかし, (28) 式で表される規格化性の式は, 粒子近似に伴う誤差の影響や, 粒子配置の対称性の破綻の影響によって, 厳密には成り立たない (図-1). すなわち,

$$\sum_{j \in \Omega_i} W_{ij} V_j = 1 + O((\Delta x)^0)_{\text{non}} \quad (30)$$

である. ここで, 添え字 non は規格化性条件が満たされない場合の精度を表し, 離散化誤差の導出には, $W_{ij} = O((\Delta x)^{-\text{ndim}})$ および $V_j = O((\Delta x)^{\text{ndim}})$ を用いた (ndim は空間次元を表す). (30) 式を, (25) 式および (26) 式に代入すると

$$\langle f \rangle_i^{\text{classical}} = f_i + O((\Delta x)^0)_{\text{non}} \quad (31)$$

を得る. ゆえに, 0 階微分に関する古典的モデルは, 粒子間隔 Δx に関して 0 次精度であると結論付けられる.

(2) 1 階微分

$k = 1, q = 1, \psi_j = -(V_j/r_{ij})(dW_{ij}/dr_{ij}) (\geq 0)$ とすると, (18) 式および (24) 式は以下のように書ける.

$$\tilde{\nabla} f(\mathbf{x}_i) = \mathbf{B}_i^{-1} \sum_{j \in \Omega_i} (f_j - f_i) \nabla_i W_{ij} V_j =: \langle \nabla f \rangle_i^{\text{CSPH}} \quad (32)$$

$$\langle \nabla f \rangle_i^{\text{CSPH}} = \nabla f(\mathbf{x}_i) + O((\Delta x)^1) \quad (33)$$

$$\mathbf{B}_i := \sum_{j \in \Omega_i} (\nabla_i W_{ij}) \mathbf{x}_{ji}^T V_j \quad (34)$$

ここで, ∇_i は位置 \mathbf{x}_i における空間微分, $\nabla f(\mathbf{x}_i)$ は位置 \mathbf{x}_i における f の 1 階微分の真の値をそれぞれ表す. 本計算では, f_i の値は既知とし, 最小二乗法によっては決定しないものとした. これは, 1 階微分に関する SPH 法の高精度モデルであり, Bonet and Lok [13] によって提案された CSPH gradient correction モデルを表す.

0 階微分と同様にして, 1 階微分に関する古典的 SPH 法の離散化モデルを導く. まず, 対称性から

$$\int_{\Omega_i} \nabla_i (W_{ij} \mathbf{x}_{ji}^T) d\mathbf{x}_j = - \int_{\Omega_i} \nabla_j (W_{ij} \mathbf{x}_{ji}^T) d\mathbf{x}_j = \mathbf{0} \quad (35)$$

が成り立つ。これを粒子近似した式を用いると、(34) 式は

$$\mathbf{B}_i = \sum_{j \in \Omega_i} \nabla_i (W_{ij} \mathbf{x}_{ji}^T) V_j - \sum_{j \in \Omega_i} W_{ij} \nabla_i \mathbf{x}_{ji}^T V_j = \mathbf{I} \sum_{j \in \Omega_i} W_{ij} V_j \quad (36)$$

と簡単化される。ここで、 \mathbf{I} は単位行列である。(30) 式を用いると

$$\mathbf{B}_i = \mathbf{I} + O((\Delta x)^0)_{\text{non}} \quad (37)$$

となり、これを(32)式に代入すると

$$\begin{aligned} \langle \nabla f \rangle_i^{\text{classical-DIF}} &:= \sum_{j \in \Omega_i} (f_j - f_i) \nabla_i W_{ij} V_j \\ &= \nabla f(\mathbf{x}_i) + O((\Delta x)^0)_{\text{non}} \end{aligned} \quad (38)$$

を得る。ここで、テーラ展開から $(f_j - f_i) = O((\Delta x)^1)$ とし、 $\nabla_i W_{ij} V_j = O((\Delta x)^{-1})$ とした。本モデルは、速度の発散を計算する際に専ら用いられる古典的モデルである。以降は(38)式を古典的差モデルと呼ぶ。

粒子配置が対称的であると仮定すると、(38)式から他の古典的モデルを導くことができる。この場合、カーネル関数の対称性を用いることで

$$\sum_{j \in \Omega_i} \nabla_i W_{ij} V_j = \mathbf{0}. \quad (39)$$

が有効であり、これを(38)式に代入することで

$$\begin{aligned} \langle \nabla f \rangle_i^{\text{classical-STD}} &:= \sum_{j \in \Omega_i} f_j \nabla_i W_{ij} V_j \\ &= \nabla f(\mathbf{x}_i) + O((\Delta x)^0)_{\text{non}}^{\text{sym}} \end{aligned} \quad (40)$$

$$\begin{aligned} \langle \nabla f \rangle_i^{\text{classical-SUM}} &:= \sum_{j \in \Omega_i} (f_i + f_j) \nabla_i W_{ij} V_j \\ &= \nabla f(\mathbf{x}_i) + O((\Delta x)^0)_{\text{non}}^{\text{sym}} \end{aligned} \quad (41)$$

がそれぞれ得られる。ここで、添え字 **sym** は粒子配置が対称的である場合の精度を表す。以降は、(40)式を古典的標準モデル、(41)を古典的和モデルと呼ぶ。古典的標準モデルは、SPH法の最も始原的なモデルである[1,2]。古典的和モデルは、保存性の観点から、圧力勾配項(圧力の1階微分項)に広く用いられている。

(39)式は粒子配置が乱れた場合には厳密に満たされない(図-1(b))。この場合、(39)式は(30)式を微分することにより

$$\sum_{j \in \Omega_i} \nabla_i W_{ij} V_j = \mathbf{0} + O((\Delta x)^{-1})_{\text{non}}^{\text{asym}} \quad (42)$$

と改められる。ここで、添え字 **asym** は粒子配置が対称的でない場合の精度を表す。これを(38)式に代入することで

$$\langle \nabla f \rangle_i^{\text{classical-STD}} = \nabla f(\mathbf{x}_i) + O((\Delta x)^{-1})_{\text{non}}^{\text{asym}} \quad (43)$$

$$\langle \nabla f \rangle_i^{\text{classical-SUM}} = \nabla f(\mathbf{x}_i) + O((\Delta x)^{-1})_{\text{non}}^{\text{asym}} \quad (44)$$

を改めて得る。従って、古典的標準モデルおよび古典的和モデルは、粒子間隔 Δx に関して -1 次精度と求められる。これは、粒子間隔を小さくする(解像度を向上させる)と、その誤差が増大することを意味している。

(3) 2階微分

本研究では、2階微分としてラプラシアンを考えた。 $k=2$, $q=2$, $\psi_j = -(V_j/r_{ij}^3)(dW_{ij}/dr_{ij}) (\geq 0)$ とすると、(18)式および(24)式は以下のように書ける。

$$\widetilde{\nabla^2 f}(\mathbf{x}_i) = 2 \sum_{j \in \Omega_i} (f_j - f_i) \frac{\mathbf{x}_{ji} \cdot \nabla_i W_{ij}}{r_{ij}^2} V_j =: \langle \nabla^2 f \rangle_i^{\text{classical-LAP}} \quad (45)$$

$$\langle \nabla^2 f \rangle_i^{\text{classical-LAP}} = \nabla^2 f(\mathbf{x}_i) + O((\Delta x)^0)_{\text{non}}^{\text{sym}} \quad (46)$$

$$\langle \nabla^2 f \rangle_i^{\text{classical-LAP}} = \nabla^2 f(\mathbf{x}_i) + O((\Delta x)^{-1})_{\text{non}}^{\text{asym}} \quad (47)$$

ここで、 $\nabla^2 f(\mathbf{x}_i)$ は位置 \mathbf{x}_i における f のラプラシアン の真の値を表す。本計算では、 f_i の値は既知とし、最小二乗法によっては決定しないものとした。(45)式は、Brookshaw [14] によって提案され、Morris et al. [15] によって3次元に拡張されたラプラシアンの古典的モデルである。1階微分の場合と同様に考えることで、粒子配置が対称的な場合には0次精度、粒子配置が乱れた場合には -1 次精度であることを導くことができる[6]。

(4) 従来 SPH 法の離散化精度のまとめ

以上の解析の結果を表-1にまとめた。本表では、規格化性条件および粒子配置の対称性が満たされない場合の離散化精度を記載した。全ての古典的モデルの離散化精度が、0次精度以下であることは注目に値する。

表-1 古典的 SPH 法の実効的な離散化精度。 n は、規格化性条件および粒子配置の対称性が破綻した場合に、各モデルの離散化精度が $O((\Delta x)^n)$ となることを表す。

| Eq. | Scheme | n |
|------|---|-----|
| (31) | $\langle f \rangle_i^{\text{classical}} := \sum_{j \in \Omega_i} f_j W_{ij} V_j$ | 0 |
| (25) | $\langle f \rangle_i^{\text{CSPH}} = \left(\sum_{j \in \Omega_i} W_{ij} V_j \right)^{-1} \sum_{j \in \Omega_i} f_j W_{ij} V_j$ | 1 |
| (38) | $\langle \nabla f \rangle_i^{\text{classical-DIF}} := \sum_{j \in \Omega_i} (f_j - f_i) \nabla_i W_{ij} V_j$ | 0 |
| (43) | $\langle \nabla f \rangle_i^{\text{classical-STD}} := \sum_{j \in \Omega_i} f_j \nabla_i W_{ij} V_j$ | -1 |
| (44) | $\langle \nabla f \rangle_i^{\text{classical-SUM}} := \sum_{j \in \Omega_i} (f_i + f_j) \nabla_i W_{ij} V_j$ | -1 |
| (32) | $\langle \nabla f \rangle_i^{\text{CSPH}} := \mathbf{B}_i^{-1} \sum_{j \in \Omega_i} (f_j - f_i) \nabla_i W_{ij} V_j$ | 1 |
| (47) | $\langle \nabla^2 f \rangle_i^{\text{classical-LAP}} := 2 \sum_{j \in \Omega_i} (f_j - f_i) \frac{\mathbf{x}_{ji} \cdot \nabla_i W_{ij}}{r_{ij}^2} V_j$ | -1 |

4. 数値的検証

本節では、2次元の数値実験により、第3節で論じた離散化誤差の解析的評価の妥当性を検証する。本研究では、表-1で示した離散化モデルの一部を用いて、関数の空間微分を再現することを考えた。そのテスト関数として以下を考えた[16]。

$$\begin{aligned} f(x, y) = & \frac{3}{4} \exp \left[-(9x-2)^2/4 - (9y-2)^2/4 \right] \\ & + \frac{3}{4} \exp \left[-(9x+1)^2/49 - (9y+1)/10 \right] \\ & + \frac{1}{2} \exp \left[-(9x-7)^2/4 - (9y-3)^2/4 \right] \\ & - \frac{1}{5} \exp \left[-(9x-4)^2 - (9y-7)^2 \right] \end{aligned} \quad (48)$$

ここで, x, y は位置を表し, 解析領域は $0 \leq x \leq 1, 0 \leq y \leq 1$ とした. 誤差評価の指標として, L_2 ノルムで規格化した二乗平均平方根誤差を使用した.

$$E_2 := \frac{\sqrt{\sum_{i=1}^N (\langle \phi \rangle_i - \phi_i)^2}}{\sqrt{\sum_{i=1}^N \phi_i^2}} \quad (49)$$

ここで, ϕ は関数, ϕ_i は位置 x_i における ϕ の真の値, $\langle \phi \rangle_i$ は SPH 法の離散化モデルを用いて計算された位置 x_i における ϕ の値をそれぞれ表す. 本研究では, ϕ として次の3つの場合を考えた.

- (48) 式の 0 階微分 (i.e., f)
- (48) 式の x に関する 1 階微分 (i.e., $\partial f / \partial x =: f_x$)
- (48) 式のラプラシアン (i.e., $\nabla^2 f$)

計算設定として, 実際の流体計算で発生するような乱れた粒子配置を想定した. 具体的には, 規則的に粒子を配置した後, 一様乱数によって各粒子の位置を乱した (図-2). 位置摂動の大きさの最大値は, 規則的な配置における均等粒子間隔 Δx の 0.3 倍とした. 境界付近の粒子は粒子配置の乱れが大きいため, 本研究では台が解析領域内に完全に含まれる粒子と, そうでない粒子とに分けて解析した. 以降は前者を内部粒子, 後者を境界近傍粒子と呼ぶ (図-2).

本研究では, LSSPH 法の離散化精度も同時に検証した. LSSPH 法の重みとして $\psi_j(r_{ij}) = W_{ij}V_j$ を使用した. この場合, 規格化性条件が厳密に満たされる理想の場合において, SPH 法の基礎式 ((29) 式) に還元される. 本計算では, 0 階微分を計算する際は $q = 1$, 1 階微分および 2 階微分を計算する際は $q = 2$ とした. この時, (24) 式から, それぞれ 2 次精度, 2 次精度, 1 次精度になることが期待される. また, 1 階微分および 2 階微分を計算する際は, 自身の関数値 f_i は既知であるとし, 最小二乗法では決定しないものとした.

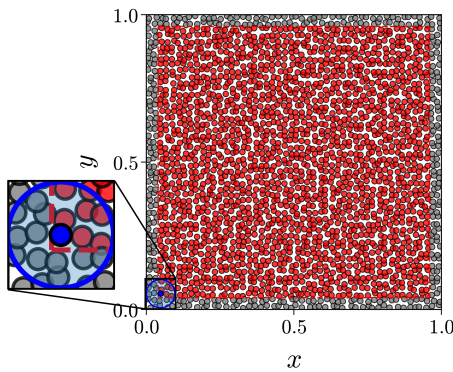


図-2 計算で用いた粒子配置 (本図は Shobuzako et al. [6] の図を改変したものを引用). 赤色は内部粒子, 灰色は境界近傍粒子をそれぞれ表す. 青色の円は左下に位置する粒子 (青色で示した) の台の大きさを表す.

(1) 内部粒子の結果

内部粒子に関して, 0 階微分の結果を図-3, 1 階微分の結果を図-4, 2 階微分の結果を図-5 にそれぞれ示した. 0 階微分に関しては, 古典的モデル, CSPH kernel

correction モデル, LSSPH モデル ($k = 0, q = 1$), 1 階微分に関しては, 古典的標準モデル, 古典的差モデル, CSPH gradient correction モデル, LSSPH モデル ($k = 1, q = 2$), 2 階微分に関しては, 古典的ラプラシアンモデル, LSSPH ($k = 2, q = 2$) をそれぞれ考慮した. 全ての場合において, 第 3 節の解析的評価と整合的な結果を得た. 古典的な 0 階微分モデルは, 規格化性条件の破綻によって 0 次精度になることが期待されるため, ϕ として (28) 式の左辺を考慮した場合も計算した (図-3 のシアン色の破線). その結果, 解析的議論から期待される 0 次精度を実際に確認することができた.

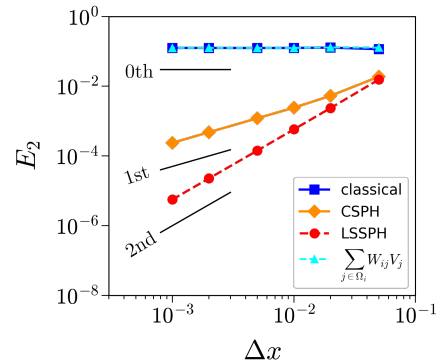


図-3 粒子間隔 Δx に対する f に関する誤差 E_2 の収束性 (本図は Shobuzako et al. [6] の図を改変したものを引用). 本図は内部粒子に関する結果を表す. 青色の実線は 0 階微分に関する古典的モデル, 黄色の実線は CSPH kernel correction モデル, 赤色の破線は LSSPH モデル ($k = 0, q = 1$), シアン色の破線は ϕ として (28) 式の左辺を用いた場合の結果をそれぞれ表す.

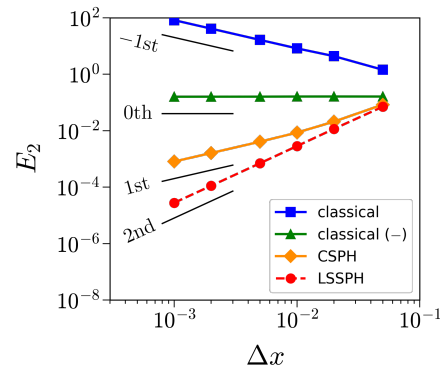


図-4 粒子間隔 Δx に対する f_x に関する誤差 E_2 の収束性 (本図は Shobuzako et al. [6] の図を改変したものを引用). 本図は内部粒子に関する結果を表す. 青色の実線は古典的標準モデル, 緑色の実線は古典的差モデル, 黄色の実線は CSPH gradient correction モデル, 赤色の破線は LSSPH モデル ($k = 1, q = 2$) の結果をそれぞれ表す.

(2) 境界近傍粒子に関する結果

境界近傍粒子の結果を図-6 に示した. 計算で用いたモデルは内部粒子の場合と同じである. この場合も内部粒子の結果と同様に, 第 3 節の解析的評価と整合的な結果を得た.

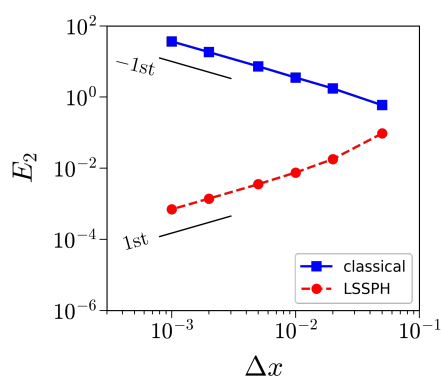


図-5 粒子間隔 Δx に対する $\nabla^2 f$ に関する誤差 E_2 の収束性 (本図は Shobuzako et al. [6] の図を改変したものを引用). 本図は内部粒子に関する結果を表す. 青色の実線は古典的ラプラシアンモデル, 赤色の破線は LSSPH モデル ($k=2, q=2$) の結果をそれぞれ表す.

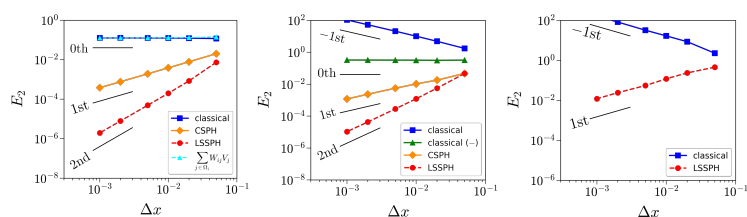


図-6 粒子間隔 Δx に対する誤差 E_2 の収束性 (本図は Shobuzako et al. [6] の図を改変したものを引用). 本図は境界近傍粒子に関する結果を表す. (左図) 0 階微分, (中図) 1 階微分, (右図) 2 階微分. 各モデルの説明は図-3-図-5 と同じ.

5. 結論

本研究では, LSSPH 法に関する基礎的研究という位置づけとして, LSSPH 法の一般化式における打ち切り誤差を用い, 従来 SPH 法の離散化誤差を解析的に評価した. その結果, 古典的 SPH 法の離散化モデルの全てにおいて, 0 次精度以下になることが明らかとなった. さらに, 2次元の簡単な数値テストを実施し, これらの理論的解析の結果を検証した. 以上の結果から, SPH 法による流体計算の精度や整合性を保証するには, 高精度 SPH 法の実装が不可欠であることが示唆された.

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., Slattery, 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 TLSPPH with non-Newtonian IISPH, *Comput. Geotech.*, **148**, 104815, 2022.
- [5] 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.
- [6] Shobuzako, K., Yoshida, S., Kawada, Y., Nakashima, R., Fujioka, S., Asai, M., A generalized smoothed particle hydrodynamics method based on the moving least squares method and its discretization error estimation, *submitted to Results Appl. Math.*
- [7] 菖蒲迫健介, 吉田茂生, 浅井光輝, 川田佳史, 中島涼輔, 藤岡秀二郎, 最小二乗法を用いた SPH 法の高精度化について, 計算工学講演会論文集, **29**, 2024.
- [8] Lancaster, P., Salkauskas, K., Surfaces generated by moving least squares methods, *Math. Comput.*, **37**, 155, 141-158, 1981.
- [9] Nayroles, B., Touzot, G., Villon, P., Generalizing the finite element method: Diffuse approximation and diffuse elements, *Comput. Mech.*, **10**, 5, 307-318, 1992.
- [10] Breitkopf, P., Rassinoux, A., Villon, P., An Introduction to Moving Least Squares Meshfree Methods, *Revue Européenne des Éléments*, **11**, 2012.
- [11] 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.
- [12] Yamamoto, S., Makino, J., A formulation of consistent particle hydrodynamics in strong form, *Publ. Astron. Soc. Jpn.*, **69**, 2, 35, 2017.
- [13] Bonet, J., Lok, T.-S. L., Variational and momentum preservation aspects of smooth particle hydrodynamic formulations, *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, **180**, 1-2, 97-115, 1999.
- [14] Brookshaw, L., A method of calculating radiative heat diffusion in particle simulations, *Publ. Astron. Soc. Aust.*, **6**, 207-210, 1985.
- [15] Morris, L.P., Fox, P. J., Zhu, Y., Modeling Low Reynolds Number Incompressible Flows Using SPH, *J. Comput. Phys.*, **136**, 1, 214-226, 1997.
- [16] Franke, R., A critical comparison of some methods for interpolation of scattered data, *Institution: Monterey, California: Naval Postgraduate School*, 1979.