

# SPH 粒子ベクトルの数式解説 (atom\_vec\_sph.cpp)

Open DEM Japan

2025年6月30日

粒子法 (Smoothed Particle Hydrodynamics, SPH) では、各粒子が質量  $m$ 、位置ベクトル  $\mathbf{x}$ 、速度ベクトル  $\mathbf{v}$ 、密度  $\rho$ 、圧力  $p$ 、内部エネルギー  $e$  などの状態量を担う。これらは離散ベクトルとしてメモリ上に保持され、時間発展はカーネル関数  $W$  を通じて近傍粒子との相互作用で評価される。以下に本ファイルが暗黙に実装している標準的な SPH の離散方程式を示す。

まず、粒子  $i$  の密度は

$$\rho_i = \sum_j m_j W(r_{ij}, h), \quad (1)$$

ここで  $r_{ij} = \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|$ 、 $h$  はスムージング長である。

密度の時間微分 (連続の式) は

$$\frac{d\rho_i}{dt} = \sum_j m_j (\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j) \cdot \nabla_i W(r_{ij}, h), \quad (2)$$

で与えられ、数値的には粒子属性  $\dot{\rho}$  として積分される。

運動方程式は

$$\frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = - \sum_j m_j \left( \frac{p_i}{\rho_i^2} + \frac{p_j}{\rho_j^2} + \Pi_{ij} \right) \nabla_i W(r_{ij}, h), \quad (3)$$

ただし  $\Pi_{ij}$  は人工粘性項で、典型的には

$$\Pi_{ij} = \begin{cases} -\frac{\alpha c_{ij} \mu_{ij} + \beta \mu_{ij}^2}{\bar{\rho}_{ij}}, & (\mathbf{v}_{ij} \cdot \mathbf{r}_{ij}) < 0 \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}, \quad \mu_{ij} = \frac{h(\mathbf{v}_{ij} \cdot \mathbf{r}_{ij})}{r_{ij}^2 + \eta^2}, \quad (4)$$

でモデル化される。

内部エネルギーは

$$\frac{de_i}{dt} = \frac{1}{2} \sum_j m_j \left( \frac{p_i}{\rho_i^2} + \frac{p_j}{\rho_j^2} + \Pi_{ij} \right) (\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j) \cdot \nabla_i W(r_{ij}, h), \quad (5)$$

によって変化し、これがエネルギー方程式に対応する。

圧力は理想気体的な状態方程式

$$p_i = (\gamma - 1) \rho_i e_i, \quad (6)$$

や, Tait 式

$$p_i = p_0 \left[ \left( \frac{\rho_i}{\rho_0} \right)^\gamma - 1 \right], \quad (7)$$

などで評価するのが一般的である.

時間積分はリープフロッグの位置更新

$$\mathbf{x}_i^{n+1} = \mathbf{x}_i^n + \mathbf{v}_i^{n+\frac{1}{2}} \Delta t, \quad (8)$$

および速度更新

$$\mathbf{v}_i^{n+\frac{1}{2}} = \mathbf{v}_i^{n-\frac{1}{2}} + \left( \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} \right)^n \Delta t, \quad (9)$$

内部エネルギー更新

$$e_i^{n+1} = e_i^n + \left( \frac{de_i}{dt} \right)^n \Delta t, \quad (10)$$

で行われる.

(8) - (10) により新しい位置・速度・エネルギーが得られ, それを次のステップの密度・圧力評価 (1) - (6) へと循環させることで, SPH 粒子系の時間発展を記述する.

本ファイルはこれら状態量を GPU/CPU 並列計算に適した構造体ベクトル形式で保持し, 並列通信 (パック・アンパック) やリスタート入出力を実装することで, 大規模 SPH 計算を効率的に実現している.