

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

Open DEM Japan

2025 年 6 月 30 日

本クラス AtomVecSPH2 は Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) における粒子 **状態量ベクトル** を管理する。各粒子  $i$  について保持する物理量は

$$\{\mathbf{r}_i, \mathbf{v}_i, \mathbf{F}_i, p_i, \rho_i, \dot{\rho}_i, \mathbf{e}_i, \dot{\mathbf{e}}_i, r_i, m_i\},$$

である。ここで  $r_i$  は粒子半径,  $m_i$  は質量である。半径が時間発展で変化する場合 (radvary=1) にも対応する。以下ではコードが前提とする標準的な弱圧縮性 SPH (WCSPH) の式を教科書的に整理する。

■(1) **スムージング長とカーネル関数** 粒子  $i$  のスムージング長  $h_i$  は半径  $r_i$  から

$$h_i = \alpha r_i \quad (1)$$

のように設定する ( $\alpha \simeq 2$  が経験的に用いられる)。核関数  $W(\mathbf{r}, h)$  はコンパクト支持を持つ放射状関数で、本実装では 3 次の B スプライン

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

を想定する。

■(2) **密度計算** 圧縮性を抑え込むために密度をカーネル総和で再評価し、

$$\rho_i = \sum_j m_j W(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j, h_i) \quad (3)$$

とする。密度時間微分は連続の式に基づき

$$\dot{\rho}_i = \sum_j m_j (\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j) \cdot \nabla_i W_{ij}, \quad \nabla_i W_{ij} = \nabla_i W(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j, h_i) \quad (4)$$

で計算し、コード上では `drho[i]` に蓄積される。

■(3) **運動方程式** 運動量保存式を対称勾配により離散化すると

$$\frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = - \sum_j m_j \left( \frac{p_i}{\rho_i^2} + \frac{p_j}{\rho_j^2} + \Pi_{ij} \right) \nabla_i W_{ij} + \mathbf{g}, \quad (5)$$

となる。ここで  $\Pi_{ij}$  は人工粘性 (Monaghan 形式など) を表し、 $\mathbf{g}$  は外力 (重力) である。右辺第 1 項に相当する力が配列 `f[i][k]` として保存され、後段の `unpack_reverse` で MPI 領域間で反映される。

■(4) 圧力と状態方程式 本ベクトルでは圧力  $p_i$  を直接保持し、他クラス（例：`compute_sph_eos`）が

$$p_i = c_0^2 (\rho_i - \rho_0) \quad (6)$$

などの弱圧縮性 EOS で更新する想定である（ $c_0$  は人工音速、 $\rho_0$  は参照密度）。

■(5) 内部エネルギー エネルギー保存式

$$\frac{de_i}{dt} = \frac{p_i}{\rho_i^2} \sum_j m_j (\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j) \cdot \nabla_i W_{ij} \quad (7)$$

により  $\dot{e}_i$  を評価し、`de[i]` として通信される。

■(6) 粒子質量と半径の関係 半径が可変のため、質量  $m_i$  は独立に保持する。球形粒子を仮定すると密度から

$$m_i = \rho_i \frac{4\pi}{3} r_i^3, \quad (8)$$

で更新されうが、コードコメント “in case of sph an calculation of the mass due density and radius doesn't make any sense” が示すように質量を直接与える運用も許容される。

■(7) 時間積分 位置と速度は（例として）対称化 Leap - Frog により

$$\mathbf{v}_i^{n+1/2} = \mathbf{v}_i^{n-1/2} + \Delta t \mathbf{F}_i^n / m_i, \quad (???)$$

$$\mathbf{r}_i^{n+1} = \mathbf{r}_i^n + \Delta t \mathbf{v}_i^{n+1/2}, \quad (???)$$

で更新される。ここに  $\mathbf{F}_i^n = m_i d\mathbf{v}_i/dt|_{t_n}$  である。密度・内部エネルギーも同様に  $\rho_i^{n+1} = \rho_i^n + \Delta t \dot{\rho}_i^n$ ,  $e_i^{n+1} = e_i^n + \Delta t \dot{e}_i^n$  と陽的に進める。

■(8) MPI 通信とベクトルサイズ 本ファイルの主要目的は式 (??)-(??) の計算に必要な状態量を各 MPI ランク間で送受信するパッキングである。半径が固定 (`radvary=0`) なら送信サイズは 6（位置 3 +  $p, \rho, e$ ）、可変なら 8（さらに  $r_i, m_i$ ）となる。通信完了後、`unpack_comm` 等で粒子配列に展開し、力やエネルギーの反作用項は (??) の対称性に基づき `pack_reverse/unpack_reverse` で集計する。

■(9) 再スタート・データファイル 式 (??)-(??) に必要な  $r_i, m_i, \rho_i, e_i, p_i$  を再スタートデータ (`pack_restart`) に 16 値/粒子で書き出し、読み込み時には `unpack_restart` で完全に復元する。なお SPH では通常の LAMMPS データファイル (`Atoms, Velocities` セクション) による初期化を推奨しないため、対応関数ではエラーを投げている。

以上により、`AtomVecSPH2` は SPH 法の基礎方程式 (??)-(??) の評価に必要な可変半径粒子の完全な状態ベクトルを効率的に保持・通信し、シミュレーションを可能にしている。