

”拘束操作モデル”の数式解説 (“fix.f”)

Open DEM Japan

2025年10月12日

本プログラムはユーザ定義の拘束操作を統合し、粒子の運動に補正を加える。拘束条件 $\phi_\ell(\mathbf{r}, t) = 0$ はラグランジュ乗数 λ_ℓ を用いて

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \mathbf{F}_i + \sum_{\ell} \lambda_{\ell} \nabla_{\mathbf{r}_i} \phi_{\ell} \quad (1)$$

と組み込まれる。時間離散化では拘束誤差を最小化する写像

$$\mathbf{r}_i^{n+1} = \mathbf{r}_i^* - \mathbf{J}_i^{-1} \phi(\mathbf{r}_i^*, t^{n+1}) \quad (2)$$

を用いて修正し、連立拘束が同時に満たされるよう反復が実行される。