

# ”主制御モデル”の数式解説 (“lammmps.f”)

Open DEM Japan

2025年10月12日

本プログラムはシミュレーション全体の制御フローをまとめ、主要なサブルーチンを呼び出す。計算は初期化、時間発展、終了処理で構成され、それぞれの段階で系の状態  $\mathcal{S}$  は

$$\mathcal{S}_{k+1} = \Phi_k(\mathcal{S}_k) \quad (1)$$

なる写像により更新される。時間発展段階では

$$\mathcal{S}(t + \Delta t) = \mathcal{I}(\mathcal{F}(\mathcal{S}(t)), \Delta t) \quad (2)$$

が実行され、ここで  $\mathcal{F}$  は力計算、 $\mathcal{I}$  は積分器を表す。モジュール間の整合性を保ちつつ逐次的に操作が行われる。