

# 粒子ベクトルグラニューラーボンドスタイルの数式解説 (atom\_vec\_bond\_gran.cpp)

Open DEM Japan

2025年6月30日

本クラスは、粒子  $i = 1, \dots, N$  の位置・速度とともに「最大  $B$  本のボンド」を保持するデータ構造を定義し、並列計算時の通信バッファへの詰め込み (pack) と展開 (unpack) を数値的に実装している。以下では、各機能を背後にある数式で記述する。

■粒子バッファ拡張 粒子配列の容量  $n_{\max}$  は

$$n_{\max}^{\text{new}} = \begin{cases} n_{\max}^{\text{old}} + \Delta, & n = 0, \\ n, & n > 0, \end{cases} \quad (1)$$

と更新される ( $\Delta = 10\,000$ )。

■基本状態量 粒子  $i$  について、保存される実数ベクトルは

$$\mathbf{x}_i = (x_i, y_i, z_i) \in \mathbb{R}^3, \quad (2)$$

$$\mathbf{v}_i = (v_{x,i}, v_{y,i}, v_{z,i}) \in \mathbb{R}^3, \quad (3)$$

$$\mathbf{x}_i^{(\text{mol})} = (x_i^m, y_i^m, z_i^m), \quad \mathbf{v}_i^{(\text{mol})} = (v_{x,i}^m, v_{y,i}^m, v_{z,i}^m). \quad (4)$$

■ボンド集合 粒子  $i$  の保持するボンド情報は

$$\mathcal{B}_i = \{ (t_{i,k}, j_{i,k}) \mid k = 1, \dots, b_i \leq B \}, \quad (5)$$

で表し、ここで  $t_{i,k}$  はボンドタイプ、 $j_{i,k}$  は相手粒子インデックス、 $b_i = |\mathcal{B}_i|$  は実際のボンド本数である。

■ボンド履歴量 歴史値 (せん断変位やねじり角など) を

$$H_{i,k}^{(\ell)}, \quad k = 1, \dots, b_i, \quad \ell = 1, \dots, n_h, \quad (6)$$

とし、 $\mathbf{H}_i \in \mathbb{R}^{b_i \times n_h}$  を成す。ここで  $n_h = \text{atom\_} \rightarrow \text{n\_bondhist}$  は履歴チャンネル数である。

■通信バッファ

座標のみ通信 (pack\_comm) 1 粒子あたり

$$m_{\text{comm}} = 9, \quad (7)$$

個 (式 (2) と (4) の各成分) を送る。

座標+速度通信 (pack\_comm\_vel) 1 粒子あたり

$$m_{\text{comm-vel}} = 12, \quad (8)$$

個 (式 (2) - (4) と  $\mathbf{v}_i$ ) を送る。

境界交換 (pack\_border) 1 粒子あたり

$$m_{\text{border}} = 13, \quad (9)$$

個 (式 (2), 整数 ID 群, 式 (4)) を送る。

■再スタートファイル 粒子  $i$  の再スタート書き出しは

$$m_{\text{restart},i} = 13 + 2b_i + n_h b_i + \sum_{p=1}^{N_{\text{fix}}} m_{\text{fix},p,i}, \quad (10)$$

バイトの倍精度値が必要である。最後の項は Fix クラスが追加する拡張量である。

■メモリ使用量 本スタイルが確保するメモリは

$$M = n_{\text{max}} \left[ 3 \underbrace{8}_{\mathbf{x}_i} + 3 \underbrace{8}_{\mathbf{v}_i} + 3 \underbrace{8}_{\mathbf{f}_i} + 3 \underbrace{8}_{\mathbf{x}_i^{(\text{mol})}} + 3 \underbrace{8}_{\mathbf{v}_i^{(\text{mol})}} + (4+B) \underbrace{4}_{\text{int}} + B n_h \underbrace{8}_{H_{i,k}^{(\ell)}} \right] + \mathcal{O}(N_{\text{extra}}), \quad (11)$$

バイトで見積もられる ( $\mathbf{f}_i$  はスレッド数分だけ確保されるが簡略化のため 1 とした)。

■粒子生成 新粒子の既定値は

$$\mathbf{v}_i = \mathbf{0}, \quad \mathbf{x}_i^{(\text{mol})} = \mathbf{0}, \quad \mathbf{v}_i^{(\text{mol})} = \mathbf{0}, \quad b_i = 0, \quad (12)$$

であり、画像フラグは周期境界最大値で初期化される。

■ハイブリッドスタイルとの連携 複数の atom\_style を組み合わせる場合、本スタイルは

$$\text{pack\_border\_hybrid}(i) = (\text{molecule}_i), \quad (13)$$

のみを追加バッファとしてやり取りする。

■まとめ 以上の式 (1) - (13) により、atom\_vec\_bond\_gran.cpp が実装する粒子データの拡張・通信・永続化の全数値仕様が定義される。これにより、多数粒子グラニューラシミュレーションにおいてボンド付き粒子の並列処理を高効率に実現できる。