

球形粒子モデルの数式解説 (atom_vec_sphere.cpp)

Open DEM Japan

2025年6月30日

粒子 i は球形とみなし、位置ベクトルを $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^d$ ($d = 2, 3$)、並進速度を \mathbf{v}_i 、半径を R_i 、密度を ρ_i 、質量を m_i 、角速度を $\boldsymbol{\omega}_i$ 、外力を \mathbf{F}_i 、外トルクを \mathbf{T}_i と定義する。

球の体積 V_i は

$$V_i = \frac{4}{3}\pi R_i^3 \quad (d = 3) \quad (1)$$

$$V_i = \pi R_i^2 \quad (d = 2) \quad (2)$$

で与えられ、質量は

$$m_i = \rho_i V_i \quad (3)$$

周期境界条件の下で粒子を他プロセッサへ通信する際、画像フラグ $(p_x, p_y, p_z) \in \mathbb{Z}^3$ に基づき \mathbf{x}_i を

$$\mathbf{x}_i^{\text{comm}} = \mathbf{x}_i + \boldsymbol{\delta}, \quad \boldsymbol{\delta} = p_x L_x \hat{\mathbf{e}}_x + p_y L_y \hat{\mathbf{e}}_y + p_z L_z \hat{\mathbf{e}}_z \quad (4)$$

へ変換して送信する。半径や質量が時間依存で変化する (radvary) 場合には $\{R_i, m_i, \rho_i\}$ も同時に送受信して一貫性を保つ。

球の主慣性モーメントは

$$I_i = \frac{2}{5} m_i R_i^2 \quad (d = 3) \quad (5a)$$

$$I_i = \frac{1}{2} m_i R_i^2 \quad (d = 2) \quad (5b)$$

力学的時間積分は (例として速度ベルレ法を示す)

$$\dot{\mathbf{v}}_i = \frac{\mathbf{F}_i}{m_i}, \quad \dot{\boldsymbol{\omega}}_i = I_i^{-1} \mathbf{T}_i \quad (6)$$

$$\mathbf{v}_i^{n+\frac{1}{2}} = \mathbf{v}_i^n + \frac{\Delta t}{2} \dot{\mathbf{v}}_i^n, \quad \boldsymbol{\omega}_i^{n+\frac{1}{2}} = \boldsymbol{\omega}_i^n + \frac{\Delta t}{2} \dot{\boldsymbol{\omega}}_i^n \quad (7)$$

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

$$\mathbf{v}_i^{n+1} = \mathbf{v}_i^{n+\frac{1}{2}} + \frac{\Delta t}{2} \dot{\mathbf{v}}_i^{n+1}, \quad \boldsymbol{\omega}_i^{n+1} = \boldsymbol{\omega}_i^{n+\frac{1}{2}} + \frac{\Delta t}{2} \dot{\boldsymbol{\omega}}_i^{n+1} \quad (9)$$

時間可変半径 (たとえば fix adapt による粒径成長) を許容する場合、

$$\frac{dR_i}{dt} = g_i(t, \mathbf{x}_i, \mathbf{v}_i, \dots) \quad (10)$$

を別途定義し、 $R_i \rightarrow R_i + \Delta t g_i$ で更新する。式(1)–(5) はステップ毎に再評価され、通信バッファには $\mathbf{x}_i, R_i, m_i, \rho_i$ を含める必要がある。

メモリ使用量は

$$\mathcal{M} = N[3(|\mathbf{x}| + |\mathbf{v}| + |\mathbf{F}| + |\boldsymbol{\omega}| + |\mathbf{T}|) + 3(|R| + |m| + |\rho|)] \quad (1)$$

$$= N(18 + 9) \times \text{sizeof}(\text{double}) \quad [\text{bytes}] \quad (11)$$

に近似でき，ここで N は各プロセッサが保持する粒子数である．コード末尾の `memory_usage()` はこれと固定配列のオーバーヘッドを合算して報告する．

以上により `atom_vec_sphere.cpp` は $\{\mathbf{x}_i, \mathbf{v}_i, R_i, \rho_i, m_i, \boldsymbol{\omega}_i, \mathbf{F}_i, \mathbf{T}_i\}$ という状態変数集合を整合性の取れた形で並列 DEM 計算に供するための基盤を提供する．