

# ボンドカウンタ計算の数式解説 (compute\_bond\_counter.cpp)

Open DEM Japan

2025年6月30日

以下では `compute_bond_counter.cpp` が行う処理を、離散要素法 (DEM) の時間発展に沿って数式で叙述する。アルゴリズムは「粒子-粒子」、「粒子-壁」の二系統のボンドを対象に、生成・破壊・総数を計測し、各 MPI ランクの局所値をルートプロセスへ集約して、スカラーではなく長さ 6 のベクトルとして出力する。

まず、シミュレーションは時間刻み  $\Delta t$  で離散化され、ステップ番号を  $n \in \mathbb{N}$ 、実時間を  $t = n\Delta t$  と置く。MPI コミュニケータに属するランクを  $r = 0, \dots, R-1$  とすると、各ランク  $r$  が保持する直近計測区間  $\mathcal{I} = (t_0, t_0 + T]$  における計数量は

$$(c_{p,r}^+(t), c_{p,r}^-(t), c_{w,r}^+(t), c_{w,r}^-(t), n_{p,r}(t), n_{w,r}(t)) \quad (t \in \mathcal{I}) \quad (1)$$

で表される。添字  $p$  は粒子-粒子 (pair),  $w$  は粒子-壁 (wall) を示し、上付き記号  $+$  は生成 (created),  $-$  は破壊 (broken), 無印  $n$  は存在総数 (total) を意味する。

各ランクで逐次更新された (1) を、区間末端  $t = t_0 + T$  で `MPI_Reduce` を用いてルートランクへ集約すると

$$C_p^\pm(t) = \sum_{r=0}^{R-1} c_{p,r}^\pm(t), \quad C_w^\pm(t) = \sum_{r=0}^{R-1} c_{w,r}^\pm(t), \quad (2)$$

$$N_p(t) = \sum_{r=0}^{R-1} n_{p,r}(t), \quad N_w(t) = \sum_{r=0}^{R-1} n_{w,r}(t) \quad (3)$$

が得られる。これにより生成・破壊イベントを全球的に把握できる。

存在総数は「前回出力時点での総数」に区間中の差分を加味して

$$N_p^*(t) = N_p(t) + C_p^+(t) - C_p^-(t), \quad (4)$$

$$N_w^*(t) = N_w(t) + C_w^+(t) - C_w^-(t) \quad (5)$$

と補正した値が最終的に報告される。ここで  $N_\bullet^*(t)$  が `compute_vector` の返す 6 要素ベクトル

$$\mathbf{v}(t) = (C_p^+, C_p^-, C_w^+, C_w^-, N_p^*, N_w^*)^\top \quad (6)$$

を構成する。

二重カウントの排除は、粒子  $i, j$  間のイベントについて指示関数

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{newton\_bond が true の場合,} \\ 1 & j < n_{\text{local}}(r) \text{ の場合,} \\ 1 & \text{さもなくば tag}_i < \text{tag}_j, \\ 0 & \text{上記以外} \end{cases} \quad (7)$$

を設け,  $\delta_{ij} = 1$  のときのみ (1) への加算を許可することで実現する. 壁に対するイベントは常に一意であるため  $\delta_{ij} = 1$  とみなす.

アルゴリズム全体を擬似コードで要約すると

```

初期化:  $c_{\bullet,r}^{\pm} \leftarrow 0$ ,  $n_{\bullet,r} \leftarrow$  現存ボンド数 ( $t = t_0$ ) (8)
for  $n = t_0/\Delta t + 1$  to  $(t_0 + T)/\Delta t$  do
  (i) 生成/破壊イベント検出
  (ii)  $c_{\bullet,r}^{\pm} += \delta_{ij}$ 
end for
(iii)  $n_{\bullet,r} \leftarrow$  再走査による現存ボンド数
(iv) 式 (2)–(6) に基づき  $v(t)$  を計算・出力
(v)  $t_0 \leftarrow t_0 + T$  として (8) を再実行

```

となる.

このようにして本プログラムは MPI 並列環境下でも重複なく正確なボンド統計を提供し, 後段の可視化や破壊挙動解析に資する定量データを実時間系列として出力する.