局所結合情報計算モデルの数式解説（compute_bond_local.cpp）

Open DEM Japan

2025 年 6 月 30 日

本モデルは，各計算ノードが保持する原子（粒子）間の結合（bond）に関し，**距離**，**ポテンシャルエネルギー**，**結合力の大きさ**を局所配列へ書き出すアルゴリズムである。以下ではコードの逐次処理を解析的に表現し，離散要素法（DEM）における基本変数と対応付けながら数式化する。

まず，原子（インデックス i）とその結合相手 j の位置ベクトルを

$$\boldsymbol{x}_i, \quad \boldsymbol{x}_j \in \mathbb{R}^3$$

とする。周期境界条件下では，最小画像原理 $\mathcal{M}(\cdot)$ を用いて

$$\boldsymbol{r}_{ij} = \mathcal{M}(\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_j) \tag{1}$$

を定義する。ここで

$$r_{ij}^2 = \boldsymbol{r}_{ij} \cdot \boldsymbol{r}_{ij}, \qquad r_{ij} = \sqrt{r_{ij}^2} \tag{2}$$

が結合長である。

結合タイプ α に対する 1 本のポテンシャルエネルギーは

$$U_\alpha(r_{ij}) = U_\alpha\big(r_{ij}\big), \tag{3}$$

結合力の大きさは

$$F_{ij} = -\frac{\mathrm{d}U_\alpha}{\mathrm{d}r}\Big|_{r=r_{ij}} = r_{ij}\, f_{\mathrm{bond}}, \tag{4}$$

で与えられる。ここで f_{bond} はコード内部で `bond->single` から返却されるスカラーであり，実装上 $F_{ij} = r_{ij}\, f_{\mathrm{bond}}$ が直接利用される。

グループ判定およびニュートンオプションにより，結合集合 $\mathcal{S}$ は

$$\mathcal{S} = \Big\{(i,j)\,\Big|\, i \in \mathcal{L},\ j \in \mathcal{L},\ g_i = g_j = 1,\ \big[\mathrm{newton} = 0 \Rightarrow \mathrm{tag}_i < \mathrm{tag}_j\big],\ \mathrm{type}_{ij} \neq 0\Big\}, \tag{5}$$

となる。ただし $\mathcal{L}$ はローカル原子集合，g_i はグループ所属判定子，`type_`ij は結合タイプである。コードは $\mathcal{S}$ に属するすべての (i,j) につき

$$\text{距離 } r_{ij}, \qquad \text{エネルギー } U_\alpha(r_{ij}), \qquad \text{力の大きさ } F_{ij}$$

のうちユーザが要求した項目を配列へ格納する。

アルゴリズムのステップをまとめると

1. 計算ノードが保持するローカル原子集合 $\mathcal{L}$ を走査し，集合 $\mathcal{S}$ のサイズ

$$N_{\mathrm{bond}} = |\mathcal{S}| \tag{6}$$

を決定する。

2. 必要に応じてメモリ再確保を行う。再確保は

$$n_{\max} \leftarrow n_{\max} + 10\,000 \quad (\text{繰返し，} n_{\max} \geq N_{\mathrm{bond}} \text{ まで}) \tag{7}$$

のループによって実現される。

3. 各 $(i,j) \in \mathcal{S}$ に対し式 (1)–(4) を評価し，ユーザ指定の列順に

$$\big(r_{ij},\ U_\alpha(r_{ij}),\ F_{ij}\big)$$

からなる行ベクトルをローカル配列へ格納する。

最後に，本コンピュートが消費するメモリ量は

$$M = n_{\max}\, n_{\mathrm{val}}\ \mathrm{sizeof(double)}\ [\mathrm{byte}], \tag{8}$$

で評価され，コードでは `memory_usage` として報告される。