

接触数演算モデルの数式解説 (compute_contact_atom.cpp)

Open DEM Japan

2025年6月30日

離散要素法 (DEM) において、各粒子を実体球とみなし、その接触判定は粒子間距離と半径和によって与えられる。粒子集合を

$$\mathcal{A} = \{1, 2, \dots, N\}$$

とし、粒子 $i \in \mathcal{A}$ の位置ベクトルと半径を

$$\mathbf{x}_i = (x_i, y_i, z_i) \quad (i = 1, \dots, N), \quad (1)$$

$$R_i > 0, \quad (2)$$

で表す。任意の 2 粒子 i, j 間のユークリッド距離

$$d_{ij} = \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|_2 \quad (3)$$

を定義する。ここで演算法では数値的ロバスト性のため距離平方 d_{ij}^2 を直接計算しているが、本質は式 (3) である。

接触許容距離は

$$r_{ij}^{\text{sum}} = R_i + R_j + \delta, \quad (4)$$

ただし $\delta \geq 0$ は計算安定化や後処理用途で導入される「スキン厚さ」である。

粒子対 (i, j) が接触しているか否かはヘヴィサイド関数 $\Theta(\cdot)$ を用いて

$$C_{ij} = \Theta\left((r_{ij}^{\text{sum}})^2 - d_{ij}^2\right) = \begin{cases} 1, & d_{ij} \leq r_{ij}^{\text{sum}}, \\ 0, & d_{ij} > r_{ij}^{\text{sum}}. \end{cases} \quad (5)$$

各粒子 i に対する総接触数は

$$c_i = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N C_{ij}. \quad (6)$$

数値実装では、ネイバリスト $\mathcal{N}(i)$ に含まれる近接粒子のみに対して式 (5) を評価し、

$$c_i = \sum_{j \in \mathcal{N}(i)} C_{ij}, \quad (7)$$

とすることで計算量を削減する。式 (7) は演算法コードにおける二重ループに相当し、接触が認定されると i と j 双方のカウンタに 1 が加算されるため、式 (6) の対称性が保たれる。

並列計算環境では粒子の境界データがゴースト粒子として複数プロセスに重複保持される。接触数 c_i の整合性を確保するため、計算後に

$$c_i \leftarrow c_i + \sum_{p \neq \text{owner}(i)} c_i^{(p)}, \quad (8)$$

なる逆通信 (reverse communication) が実行される. ここで $c_i^{(p)}$ はプロセス p に属するゴースト粒子 i が局所的に算出した接触数であり, 所有プロセスが総和を取る. 式 (8) によりグローバルに整合した接触数が得られる.

実装は 1 粒子当たり `double` 型 1 要素で接触数を保持するため, 最大粒子数 N_{\max} に対する必要メモリは

$$M = N_{\max} \text{sizeof}(\text{double}) \quad [\text{bytes}]. \quad (9)$$

以上により, 本ファイルは各タイムステップで式 (7) と (8) に沿って粒子毎接触数 $\{c_i\}_{i=1}^N$ を評価し, 他演算 (接触力モデルなど) の基礎データとして供給する.