

「接触数計算モデル」の数式解説 (compute_contact_atom_gran.cpp)

Open DEM Japan

2025年6月30日

本計算モデルは、離散要素法 (DEM) シミュレーションにおいて各粒子がある時刻に接触している粒子数を評価する。粒子 i の位置ベクトルを $\mathbf{x}_i(t) \in \mathbb{R}^3$, 半径を R_i とし、近接判定の緩衝距離 (“skin”) を $s \geq 0$ とする。さらに、ペアスタイル `gran` が構築する近接リストによって粒子 i に対して候補粒子集合

$$\mathcal{N}_i(t) = \{j \mid j \neq i, j \text{ は演算対象プロセッサ上に存在し, 近接リストにより候補とされた粒子}\}$$

が与えられる。

粒子対 (i, j) の中心間距離

$$r_{ij}(t) = \|\mathbf{x}_i(t) - \mathbf{x}_j(t)\| \quad (1)$$

が

$$r_{ij}(t) \leq R_i + R_j + s \quad (2)$$

を満たすか、もしくは過去時刻での接触履歴フラグ $H_{ij}(t - \Delta t) = 1$ が保存されている場合 (`history_flag=1`) に粒子対は接触していると判定される。これを指示関数

$$f_{ij}(t) = \begin{cases} 1, & \text{条件 (??) を満たす} \\ 1, & \text{history_flag} = 1 \wedge H_{ij}(t - \Delta t) = 1 \\ 0, & \text{それ以外} \end{cases} \quad (3)$$

で表す。

粒子 i の接触数 $C_i(t)$ は

$$C_i(t) = \sum_{j \in \mathcal{N}_i(t)} f_{ij}(t) \quad (4)$$

として定義される。アルゴリズムでは、粒子 i がユーザ定義グループに属している場合に限り和 (??) を評価するが、同時に $f_{ij}(t) = 1$ であれば粒子 j 側の接触数も対称に

$$C_j(t) \leftarrow C_j(t) + f_{ij}(t) \quad (5)$$

によって増分される。

計算は各 MPI プロセスが保持するローカル粒子ならびにゴースト粒子について実行される。相互作用がニュートン形式 (`newton_pair=1`) であるとき、式 (??) によってゴースト粒子が受け取った増分は “reverse communication” により元の所有プロセスへ集約され、最終的な接触数

$$C_i(t) \leftarrow C_i(t) + C_i^{\text{ghost}}(t) \quad (6)$$

が得られる.

本モデルのメモリ使用量は各粒子に対する倍精度実数 C_i を格納する配列 1 本のみであり

$$\text{Memory} = n_{\max} \times \text{sizeof}(\text{double}) \quad (7)$$

となる (n_{\max} はシミュレーション開始からの最大粒子数).

以上により, `compute_contact_atom_gran` は時刻 t における各粒子の接触個数 $\{C_i(t)\}$ を式 (??) - (??) に基づき計算し, 後続解析 (例: 局所充填率や接触力統計) の基礎量として提供する.