

原子運動エネルギーの数式解説 (“compute_ke_atom.cpp”)

Open DEM Japan

2025年6月30日

離散要素法 (DEM) における原子 (粒子) の運動エネルギーは、次の基本式に基づいて計算される。ここで添字 i は局所計算ノードに存在する粒子を表す。

$$E_i^{\text{kin}} = \frac{1}{2} m_i \mathbf{v}_i \cdot \mathbf{v}_i \quad (1)$$

このエネルギーをシミュレーション単位系からエネルギー単位系へ変換するために、変換係数 κ (コード中の mvv2e) を掛け合わせる。したがって最終的な数値として用いられる量は

$$\text{KE}_i = \kappa E_i^{\text{kin}} = \frac{1}{2} \kappa m_i \|\mathbf{v}_i\|^2 \quad (2)$$

■質量の選択規則 粒子質量 m_i は“局所質量配列”が存在する場合と、タイプ別質量表を参照する場合で分岐する。これは

$$m_i = \begin{cases} m_i^{(\text{local})} & \text{局所質量が割り当てられている場合} \\ m_{t(i)} & \text{タイプ } t(i) \text{ に属する場合} \end{cases} \quad (3)$$

と記述できる。

■計算対象粒子のフィルタリング 計算は任意の粒子集合 (グループ) G に対して行われ、さらにマルチスフェア剛体を構成する粒子集合 M は除外される。これを示す指示関数

$$\chi_G(i) = \begin{cases} 1 & i \in G \\ 0 & i \notin G \end{cases}, \quad \chi_M(i) = \begin{cases} 1 & i \in M \\ 0 & i \notin M \end{cases} \quad (4)$$

を用いると、実際にメモリへ格納される運動エネルギーは

$$\text{KE}_i^{\text{store}} = (1 - \chi_M(i)) \chi_G(i) \frac{1}{2} \kappa m_i \|\mathbf{v}_i\|^2 \quad (5)$$

■メモリ管理の観点 局所粒子数 N_{local} が増加すると、配列長 n_{max} を超えた時点で再確保を行い、式 (??) に従う値を連続領域に格納する。配列のメモリ使用量は

$$\text{Memory} = n_{\text{max}} \times \text{sizeof}(\text{double}) \quad (6)$$

で評価される。

以上により、ソース “compute_ke_atom.cpp” は式 (??) を逐次的に適用し、全粒子の運動エネルギーを粒子単位で算出・格納するアルゴリズムを実装している。