

# “粒子間局所接触計算”の数式解説 (compute\_pair\_gran\_local.cpp)

Open DEM Japan

2025年6月30日

粒子  $i$  と  $j$  の位置を  $\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j$ , 半径を  $R_i, R_j$  とし,  $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i$  (長さ  $r = \|\mathbf{r}_{ij}\|$ ) を定義する. 球粒子間の幾何学的重なり量  $\delta$  は

$$\delta = R_i + R_j - r, \quad (1)$$

で与えられる.  $\delta > 0$  なら接触が生じ,  $\delta \leq 0$  なら非接触である. 接触法線を

$$\mathbf{n} = \frac{\mathbf{r}_{ij}}{r}, \quad (2)$$

と定義する. 粒子間でモデルが計算した総接触力  $\mathbf{F}_c$  (コード内 `fc`) は法線成分  $\mathbf{F}_n$  と接線成分  $\mathbf{F}_t$  に分解される:

$$\mathbf{F}_n = (\mathbf{F}_c \cdot \mathbf{n}) \mathbf{n}, \quad (3)$$

$$\mathbf{F}_t = \mathbf{F}_c - \mathbf{F}_n. \quad (4)$$

同様に粒子  $i$  に働く接触トルク  $\mathbf{T}_c$  は

$$\mathbf{T}_n = (\mathbf{T}_c \cdot \mathbf{n}) \mathbf{n}, \quad (5)$$

$$\mathbf{T}_t = \mathbf{T}_c - \mathbf{T}_n. \quad (6)$$

球-球接触に対して, 重なりレンズの円形接触面積  $A$  は

$$A = \frac{\pi}{4r^2} (r + R_i + R_j)(r + R_i - R_j)(r - R_i + R_j)(-r + R_i + R_j), \quad (7)$$

で与えられる (コード式を整理).

接触点  $\mathbf{c}$  は球表面上の重心補間で

$$\mathbf{c} = \frac{R_j \mathbf{x}_i + R_i \mathbf{x}_j}{R_i + R_j}, \quad (8)$$

となる. 非球形粒子やメッシュ壁の場合はコード内で専用の幾何計算が呼ばれるが, 本稿では球粒子式のみを示す.

壁 (メッシュ面) との接触では粒子中心  $\mathbf{x}_i$  と壁面最近接点  $\mathbf{p}$  の距離  $d = \|\mathbf{x}_i - \mathbf{p}\|$  を用い,

$$\delta_{\text{wall}} = R_i - d, \quad (9)$$

により重なりを定義する. 接触法線は壁外向き単位法線  $\mathbf{n}_w$  を用いて  $\mathbf{n} = -\mathbf{n}_w$  とする. トルクは壁との接触面積比  $\alpha$  (コード `area_ratio`) を掛けて

$$\mathbf{T}_c^{(\text{wall})} = \alpha \mathbf{T}_c^{\text{model}}, \quad (10)$$

によりスケーリングされる。

計算ループでは各タイムステップにつき

1. 近接距離がしきい値  $(R_i + R_j)(1 + \varepsilon)$  ( $\varepsilon = \text{contactDistanceFactor}$ ) を下回る粒子対を近傍リストから抽出し数  $N_{\text{pair}}$  を数える。
2. そのうち  $\delta > 0$  を満たす真の接触対数  $N_{\text{overlap}}$  を求め、配列を再確保して接触数分の行を確保する。
3. それぞれの接触について式 (1) – (8) (壁接触なら (9) – (10)) を計算し、必要に応じて速度成分  $v_i, v_j$  を格納する。
4. 熱伝導モデルが有効なら、熱流束  $q$  を末尾列に追加する。

以上の演算は LIGGGHTS で標準化されたポストフォース・コールバックにより力学モデルから独立に呼び出されるため、本クラスは接触力モデル (PairGran) や壁モデル (FixWallGran) を透過的に参照できる。