

ComputeSurface の数式解説 (compute_surface.cpp)

Open DEM Japan

2025 年 7 月 2 日

本アルゴリズムは、粒子群 $G = \{1, \dots, N\}$ のうち「表面粒子」を判定する二段階判定法である。以下、粒子 i の位置を $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^3$ 、質量を m_i とし、グループ全質量 $M = \sum_{i \in G} m_i$ とする。

■(1) 重心と上向き単位ベクトル

$$\mathbf{c} = \frac{1}{M} \sum_{i \in G} m_i \mathbf{x}_i \quad (1)$$

$$\mathbf{n} = \begin{cases} \frac{\mathbf{p} - \mathbf{c}}{\|\mathbf{p} - \mathbf{c}\|}, & (\text{COM 基準}) \\ \mathbf{n}_0, & (\text{外部指定}) \end{cases} \quad (2)$$

ここで \mathbf{p} はユーザ入力 point_up, \mathbf{n}_0 は正規化済み n_vec_up である。

■(2) 第 1 判定 — 位置条件

$$s_i^{(0)} = \Theta[(\mathbf{x}_i - \mathbf{c}) \cdot \mathbf{n}], \quad \Theta(z) = \begin{cases} 1 & (z > 0) \\ 0 & (z \leq 0) \end{cases} \quad (3)$$

すなわち、上向き法線 \mathbf{n} の正側にある粒子を候補集合 $S_0 = \{i \mid s_i^{(0)} = 1\}$ とする。

■(3) 第 2 判定 — 近接角条件 近接粒子対 (i, j) を

$$\|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i\| \leq R_i + R_j$$

で生成し (R_i は半径), 順に次を計算する。

$$\mathbf{d}_{ij} = \mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i, \quad \gamma_{ij} = \frac{\mathbf{d}_{ij} \cdot \mathbf{n}}{\|\mathbf{d}_{ij}\|} = \cos \theta_{ij} \quad (4)$$

ここで θ_{ij} は \mathbf{d}_{ij} と \mathbf{n} のなす角である。

ユーザ指定角度 $0 < \alpha \leq 45^\circ$ に対し

$$|\gamma_{ij}| > \sin \alpha \iff \theta_{ij} < \frac{\pi}{2} - \alpha \quad (5)$$

を満たすとき, すなわち \mathbf{d}_{ij} が「上方向円錐 (半開角 $\pi/2 - \alpha$)」内に入るとき, 下記の消去ルールを適用する。

$$\text{if } \gamma_{ij} > 0: \quad s_i^{(0)} \leftarrow 0 \quad (6)$$

$$\text{if } \gamma_{ij} < 0: \quad s_j^{(0)} \leftarrow 0 \quad (7)$$

これは「円錐内で高い側の粒子に隠れた低い側の粒子」を内部粒子とみなす操作である。

■(4) 最終判定と総数

$$s_i = s_i^{(0)} \quad (i = 1, \dots, N) \quad (8)$$

$$N_{\text{surf}} = \sum_{i=1}^N s_i \quad (9)$$

N_{surf} が出力スカラーであり，並列計算では最終行程で全 MPI プロセス間の総和が取られる。

■(5) 数理的特徴

- (3) は凸多面体近似境界に対して円錐クラスタリングを用いた可視領域判定であり， α が小さいほど厳格な「張り出し」検出となる。
- COM 基準では \mathbf{n} が時刻毎に更新され，回転流動系でも自然座標系を保つ。
- 条件 (5) において $\sin \alpha$ が直接コード内部で二乗値として比較されるため，平方根計算を回避した軽量実装となる。