

ハマーカー (van der Waals) モデルの数式解説 (cohesion_model_hamaker.h)

Open DEM Japan

2025年6月29日

二球状粒子 $i \cdot j$ (半径 R_i, R_j , 中心間距離 r) 間に働く van der Waals 引力をハマーカー定数 A_{ij} を用いて評価する.

■有効半径と表面間隔

$$R_{\text{eff}} = \frac{R_i R_j}{R_i + R_j}, \quad h = \begin{cases} r - (R_i + R_j) & (\text{粒子-粒子}) \\ r - R_i & (\text{粒子-壁}) \end{cases} \quad (1)$$

h は表面間隔 (正值) である.

■ハマーカー引力 (球対球) 古典 DLVO 理論による正確式 $F = -\frac{A_{ij} R_{\text{eff}}}{6h^2}$ を, プログラムでは有効半径を分母へ移して

$$F(h) = -\frac{A_{ij}}{6 h^2 R_{\text{eff}}} \quad (2)$$

として実装している (符号 “-” は引力を表す).

■最小間隔による発散回避 原子間ポテンシャルの短距離発散を防ぐため, 型対依存のカットオフ h_{cut}^{ij} を導入し

$$F_{\text{Hamaker}}(h) = \begin{cases} -\frac{A_{ij}}{6 h^2 R_{\text{eff}}} & (h > h_{\text{cut}}^{ij}) \\ -\frac{A_{ij}}{6 h_{\text{cut}}^{ij 2} R_{\text{eff}}} & (h \leq h_{\text{cut}}^{ij}) \end{cases} \quad (3)$$

と連続的に打ち切る.

■接触時の最大引力 衝突判定ルーチンでは $h = 0$ と見なして (3) 下段を適用し,

$$F_{\text{max}} = -\frac{A_{ij}}{6 h_{\text{cut}}^{ij 2} R_{\text{eff}}} \quad (4)$$

を粒子法線方向に付加する.

■有効カットオフとスキン厚 計算量削減のため, (3) が $|F|/|F_{\text{max}}| = 10^{-4}$ となる

$$h_{\text{max}}^{ij} = 100 h_{\text{cut}}^{ij} \quad (5)$$

を近接探索の最大有効距離とし, $\text{neighbor skin} \geq \max_{ij} h_{\text{max}}^{ij}$ が強制される.

■力の作用と実装概要 法線単位ベクトル $\mathbf{n} = (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)/r$ を用いて、粒子 i への力は

$$\mathbf{F}_i = F_{\text{Hamaker}}(h) \mathbf{n}, \quad \mathbf{F}_j = -\mathbf{F}_i. \quad (6)$$

トルクはゼロとし、接触判定の有無で (3) 上段/下段を切替えている。このモデルは三次元専用であり、粗視化 (CG) 計算とは併用不可である。