モースポテンシャル・ボンドモデルの数式解説（`cohesion_model_morse.h`）

Open DEM Japan

2025 年 6 月 29 日

半径 R_i, R_j の二球が中心間距離 r で相互作用するとき，モース型引力は平衡距離 $r_{0,ij}$ を基準に

$$U(r) = D_{ij}\Big[\mathrm{e}^{-2\beta_{ij}(r-r_{0,ij})} - 2\mathrm{e}^{-\beta_{ij}(r-r_{0,ij})}\Big] \tag{1}$$

で与えられる．ここで D_{ij} はモース定数（エネルギー次元），β_{ij} はポテンシャル幅の逆長さである．球—壁の場合は $R_j \to \infty$ とみなし $r = R_i + h$（h は表面間隔）で同じ式を適用する．

力はポテンシャルの勾配で定義され

$$F(r) = -\frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}r} = 2D_{ij}\beta_{ij}\Big[\mathrm{e}^{-2\beta_{ij}(r-r_{0,ij})} - \mathrm{e}^{-\beta_{ij}(r-r_{0,ij})}\Big] \tag{2}$$

であり，引力（負符号）は $r > r_{0,ij}$，斥力（正符号）は $r < r_{0,ij}$ に現れる．コード実装では接触モデルが半径方向の単位ベクトル $\boldsymbol{n} = (\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_j)/r$ を用いて

$$\boldsymbol{F}_i = F(r)\,\boldsymbol{n}, \qquad \boldsymbol{F}_j = -\boldsymbol{F}_i \tag{3}$$

と力を各粒子へ加えるが，数値安定化のため $F(r)$ を

$$F(r) = \frac{D_{ij}}{r}\Big[\mathrm{e}^{-2\beta_{ij}(r-r_{0,ij})} - \mathrm{e}^{-\beta_{ij}(r-r_{0,ij})}\Big] \tag{4}$$

の形で計算している（$1/r$ 因子は球面対称系に沿った正規化）．壁相互作用では $r = R_i + h$ として (4) を用い，法線 $\boldsymbol{n}$ は粒子中心から壁法線方向に取る．本モデルは三次元系専用で粗視化粒子法との併用は許可されないため，計算実行前に次式の最大有効距離 $r_{\max} \simeq r_{0,ij} + 5/\beta_{ij}$ が `neighbor` スキン厚より十分小さいことを確認する必要がある．