

表面デフォルトモデルの数式解説 (surface_model_default.h)

Open DEM Japan

2025年6月29日

本ファイルは「壁（三角形メッシュ）↔粒子」および「粒子↔粒子」接触に対して、幾何学的前処理と運動学量の算出だけを担う最小限の表面モデルである。力学モデル（正規・接線・転がりなど）は Normal/Rolling/Tangential モデルに委ねられ、本クラスはそれらへ渡すパラメータを計算・格納する。以下に主要数式を示す。

■1. 法線方向量 粒子 i と j の中心位置を $\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j$, 半径を R_i, R_j とする。粒子間距離

$$r = \|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i\|, \quad \mathbf{n} = \frac{\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i}{r} \quad (1)$$

を定義すると、正規オーバーラップ

$$\delta_n = (R_i + R_j) - r. \quad (2)$$

■2. 接触点ベクトル 中心間ベクトル $\boldsymbol{\delta} = (x_j - x_i, y_j - y_i, z_j - z_i)$ を dx, dy, dz で表す。接触半径は

$$c_{ri} = R_i - \frac{1}{2}\delta_n, \quad c_{rj} = R_j - \frac{1}{2}\delta_n, \quad (3)$$

壁相手であれば $c_r = R_i - \delta_n/2$.

■3. 相対並進速度分解

$$\mathbf{v}_r = \mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j = (v_{r1}, v_{r2}, v_{r3}), \quad (4)$$

$$v_n = \mathbf{v}_r \cdot \mathbf{n}, \quad \mathbf{v}_n = v_n \mathbf{n}, \quad (5)$$

$$\mathbf{v}_t = \mathbf{v}_r - \mathbf{v}_n. \quad (6)$$

■4. 相対回転速度 壁接触の場合

$$\boldsymbol{\omega}_{\text{eff}} = c_r \boldsymbol{\omega}_i / r, \quad (7)$$

粒子同士では

$$\boldsymbol{\omega}_{\text{eff}} = \frac{c_{ri} \boldsymbol{\omega}_i + c_{rj} \boldsymbol{\omega}_j}{r}. \quad (8)$$

ここで $\boldsymbol{\omega}_i, \boldsymbol{\omega}_j$ は各粒子の角速度。

■5. 転がり寄与を含む接線相対速度

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_{tr} &= \mathbf{v}_t - \boldsymbol{\delta} \times \boldsymbol{\omega}_{\text{eff}} \\ &= (v_{t1} - (dz\omega_{\text{eff},2} - dy\omega_{\text{eff},3}), v_{t2} - (dx\omega_{\text{eff},3} - dz\omega_{\text{eff},1}), v_{t3} - (dy\omega_{\text{eff},1} - dx\omega_{\text{eff},2})). \end{aligned} \quad (9)$$

式 (??) がコード中の `vtr1, vtr2, vtr3` に相当し、後続の接線モデルでばね伸縮量更新に使われる。

■6. エネルギー履歴の準備 (壁接触時) オプションで

$$E_{\text{elas}} = \int F_n d\delta_n, \quad E_{\text{diss}} = \int |\mathbf{F}_{\text{damp}} \cdot \mathbf{v}| dt \quad (10)$$

を格納するため、`delta_offset_` と `dissipation_offset_` が履歴配列に割り当てられる。粒子相手の場合は `FixPropertyAtom` を介して E_{diss} ベクトルを自動生成する。

■7. 出力変数一覧

$$\begin{array}{ll} \mathbf{n} \rightarrow \text{en}[0:2], & \delta_n \rightarrow \text{deltan}, \\ v_n \rightarrow \text{vn}, & \mathbf{v}_{tr} \rightarrow \text{vtr}[1:3], \\ \boldsymbol{\omega}_{\text{eff}} \rightarrow \text{wr}[1:3], & c_{ri}, c_{rj} \rightarrow \text{cri}, \text{crj}. \end{array}$$

これらが `NormalModel` などに渡り、実際の力 F_n, F_t や転がり・ねじれモーメントが決定される。

■8. まとめ `surface_model_default.h` は

- 接触の正規オーバーラップ (??) と接触半径 (??),
- 並進・回転速度を分離した相対速度 (??) - (??),
- エネルギー履歴格納の初期化 (??),

を行う汎用的な前処理器であり、力モデルを切り替えても共通に利用できるよう設計されている。