Superquadric Orthogonal Surface Model の数式解説（surface_model_superquadric_orthogonal.h）

Open DEM Japan

2025 年 6 月 29 日

本モデルは非球形粒子を超二次曲面（superquadric）で近似し，二粒子間の最短距離と接触状態を **勾配正交条件** により決定する．粒子 i の質量中心を $\boldsymbol{r}_i$，四元数姿勢を q_i，半軸長を $\boldsymbol{a}_i = (a_{1i}, a_{2i}, a_{3i})$，ブロック指数（blockiness）を n_i とする．超二次曲面の暗黙関数は

$$\Phi_i(\boldsymbol{X}) = \left(\left(\frac{|X'_1|}{a_{1i}} \right)^{\frac{2}{n_i}} + \left(\frac{|X'_2|}{a_{2i}} \right)^{\frac{2}{n_i}} \right)^{\frac{n_i}{n_i}} + \left(\frac{|X'_3|}{a_{3i}} \right)^{\frac{2}{n_i}} - 1, \tag{1}$$

ただし $\boldsymbol{X}' = \mathcal{R}_i^\top (\boldsymbol{X} - \boldsymbol{r}_i)$ は粒子座標系での位置，$\mathcal{R}_i$ は q_i に対応する回転行列である．$\Phi_i(\boldsymbol{X}) = 0$ が粒子表面を表す．

粒子 i, j 間の接触は共通法線 $\hat{\boldsymbol{n}}$ に沿う **最小距離点対** $\boldsymbol{c}_i, \boldsymbol{c}_j$ が

$$\nabla\Phi_i(\boldsymbol{c}_i) \parallel \nabla\Phi_j(\boldsymbol{c}_j), \qquad \boldsymbol{c}_j - \boldsymbol{c}_i = \lambda \nabla\Phi_i(\boldsymbol{c}_i), \tag{2}$$

を満たすときに存在すると定義する．ここで $\lambda \in \mathbb{R}$ はスカラー．(**??**) は両勾配が互いに反平行（正交モデル）の条件であり，数値的には連立非線形方程式

$$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{c}_i, \boldsymbol{c}_j) = \begin{bmatrix} \nabla\Phi_i(\boldsymbol{c}_i) \times \nabla\Phi_j(\boldsymbol{c}_j) \\ \boldsymbol{c}_j - \boldsymbol{c}_i - \lambda \nabla\Phi_i(\boldsymbol{c}_i) \end{bmatrix} = \boldsymbol{0} \tag{3}$$

を Newton – Raphson 法で解く．初期推定には Oriented Bounding Box (OBB) 交差判定で得た接近方向を用いる．

解が得られると重なり量（法線方向貫入）を

$$\delta_n = -\big[\Phi_i(\boldsymbol{c}_i) + \Phi_j(\boldsymbol{c}_j)\big] \big(\hat{\boldsymbol{n}} \cdot (\boldsymbol{c}_j - \boldsymbol{c}_i)\big), \tag{4}$$

$$\hat{\boldsymbol{n}} = \frac{\nabla\Phi_i(\boldsymbol{c}_i)}{\|\nabla\Phi_i(\boldsymbol{c}_i)\|}, \qquad \boldsymbol{\Delta} = \boldsymbol{c}_j - \boldsymbol{c}_i$$

で定義する．$\delta_n > 0$ が実際のオーバーラップである．

ヘルツ型弾性接触理論を一般化するため，有効曲率半径

$$R_{\text{eff}} = \frac{R_i R_j}{R_i + R_j}, \qquad R_i = \big(a_{1i} a_{2i} a_{3i}\big)^{1/3}, \tag{5}$$

をまず導入し，さらに曲率制限係数 κ が有効な場合は

$$\frac{1}{R'_{\text{eff}}} = \frac{1}{R_{\text{eff}}} + \kappa \begin{cases} H_i + H_j & \text{(平均曲率選択)} \\ K_i + K_j & \text{(ガウス曲率選択)} \end{cases}, \tag{6}$$

で置き換える．H_i, K_i は $\boldsymbol{c}_i$ における平均・ガウス曲率．これにより極端に小さい半径による数値的不安定を抑制できる．

接触力計算に必要な局所量は

$$\begin{aligned} v_n &= (\boldsymbol{v}_i - \boldsymbol{v}_j)\cdot\hat{\boldsymbol{n}}, \qquad (7) \\ \boldsymbol{v}_t &= (\boldsymbol{v}_i - \boldsymbol{v}_j) - v_n\hat{\boldsymbol{n}} - \bigl(c_i\boldsymbol{\omega}_i + c_j\boldsymbol{\omega}_j\bigr) \times \hat{\boldsymbol{n}}, \qquad (8) \end{aligned}$$

$$c_i = R_i - \tfrac{1}{2}\delta_n, \quad c_j = R_j - \tfrac{1}{2}\delta_n$$

であり，球モデルと同形のフック／ヒストリ接触式にそのまま代入できる．

時間積分では，前ステップ接触点 $\boldsymbol{c}^{\mathrm{prev}}$ を

$$\boldsymbol{c}^{\mathrm{est}} = \boldsymbol{c}^{\mathrm{prev}} + \Delta t\bigl[(1-\rho)\boldsymbol{v}_i + \rho\,\boldsymbol{v}_j\bigr], \qquad \rho = \frac{R_i}{R_i + R_j}, \qquad (9)$$

で予測し，(**??**) の初期値として収束を高速化する．OBB 判定で非交差の場合は新たに最近接点を探索する．(**??**) によって必要最小限の Newton 反復回数で接触／非接触の判定が可能となる．

本モデルにより，超楕円体・立方体状粒子など任意のブロック指数を持つ非球形粒子同士の衝突力学が曲面幾何学に基づいて一貫して評価できる．特に (**??**) の曲率制限は鋭いエッジでの過大応力を回避しつつヘルツ接触理論との連続性を保つ実装上の要である．