DEM の基礎

菖蒲迫 健介 @九大 D3

Ver.0 (2025/07/08):書き始め Ver.1 (2025/07/23):初稿完成

■ 目的

Discrete Element Method (DEM) の基本を理解する.

■ DEMとは?

DEM とは物質の連続体的な振る舞いを**離散的な剛体球**で表現する粒子法 (メッシュフリー法) の一種である。DEM 粒子は剛体の基礎方程式に従い,並進運動と回転運動を行う。通常,粒子に働く力 (外力) として,**接触力 (弾性力**と**粘性力**) と**一様重力**を考える。接触力の計算には,図 0.1 に示すような粘弾性モデル (ケルビン・フォークトモデル) が使用される*1.

DEM は Cundall and Strack (1979) に由来する*2. 当時は個別要素法 (Distinct Element Method) と命名された. その後,離散要素法 (Discrete Element Method) とも呼ばれるようになった. どちらも略してしまえば DEM であるが,現在は Discrete Element Method の方が主流のようである [例:酒井ほか (2012); 浅井 (2022)].

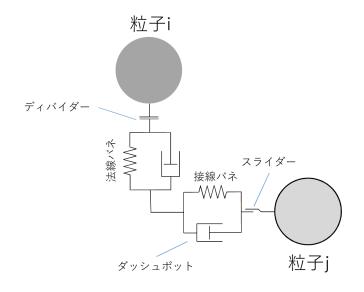


図 0.1 DEM における相互作用の概念図. 図の出典は浅井 (2022).

^{*1} ケルビン・フォークトモデルとは線形バネと速度に比例する抵抗を並列につないだ粘弾性モデルである.

^{*2} 被引用数は 22041 である. (2025 年 7 月 8 日)

1 DEM の基礎方程式

DEM 粒子の運動は剛体の基礎方程式に従う. 外力として**重力とケルビン・フォークトモデルによる粒子間の相互作用力**を考える. DEM では粒子のわずかな重なり (オーバーラップ) を許容し,これを変位として扱う*3. 以降, DEM 粒子は一様な剛体球とする.

■ DEM の基礎方程式

DEM 粒子 i は以下の**剛体の方程式**に従うものとする $*^4$.

剛体の基礎方程式

$$m_i \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \sum_j \mathbf{F}_j \tag{1.1}$$

$$I_i \frac{d\omega_i}{dt} = \sum_j T_j \tag{1.2}$$

ここで、添え字i は粒子i に関する物理量であることを表し、 m_i は質量、 $v_i := \dot{x}_i$ は速度、 F_j は粒子j から受ける外力、 I_i は慣性モーメント、 ω_i は粒子i の位置を原点とした角速度、 T_j は粒子j から受けるトルクをそれぞれ表す。DEM 粒子が一様な剛体球の場合

$$I_i = \frac{2}{5}m_i r_i^2 (1.3)$$

である. ここで, r_i は球の半径を表す.

1.1 DEM の運動量保存式

DEM 計算では他の粒子との接触を通じて相互作用を行う. そこで運動方程式を

$$m_i \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \sum_j \mathbf{f}_{ij} + m_i \mathbf{g} \tag{1.4}$$

としておく、ここで, f_{ij} は粒子 j との接触力,g は重力加速度である.以降は接触力を接触面に対する法線方向成分 $f_{n_{ij}}$ と接線方向成分 $f_{t_{ij}}$ に分離して考える.すなわち

$$\mathbf{f}_{ij} = \mathbf{f}_{n_{ij}} + \mathbf{f}_{t_{ij}} \tag{1.5}$$

1.1.1 接触力の法線方向成分

ケルビン・フォークトモデルによる接触力の法線方向成分 f_{n_i} は

$$\mathbf{f}_{n_{ij}} = -k_n \mathbf{\delta}_{n_{ij}} - \eta_n \mathbf{v}_{n_{ij}} \tag{1.6}$$

^{*3} 本当の剛体球は変形しないので粒子のオーバーラップは発生しない. DEM 粒子はあくまで剛体球の近似である.

^{*4} 剛体の方程式の導出は付録 A を参照.

として与えられる。ここで, k_n はばね定数の法線方向成分, η_n は粘性減衰係数 (抵抗係数) の法線方向成分である。 $\delta_{n_{ij}}$ は粒子 i,j 間の法線方向の相対変位, $v_{n_{ij}}$ は粒子 i,j 間の法線方向の相対速度で

$$\boldsymbol{\delta}_{n_{ij}} \coloneqq \{|\boldsymbol{x}_{ij}| - (r_i + r_j)\}\boldsymbol{n}_{ij} \tag{1.7}$$

$$\boldsymbol{v}_{n_{ij}} \coloneqq (\boldsymbol{v}_{ij} \cdot \boldsymbol{n}_{ij}) \boldsymbol{n}_{ij} \tag{1.8}$$

と定義される. ここで、 $x_{ij}\coloneqq x_i-x_j$ は相対位置、 $v_{ij}\coloneqq v_i-v_j$ は相対速度、 n_{ij} は単位法線ベクトルで

$$\boldsymbol{n}_{ij} = \frac{\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_j}{|\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_j|} \tag{1.9}$$

と定義される。通常,ばね係数は実験的に決め,粘性係数はばね係数と反発係数の関係に基づいて 決められる (詳しくは付録 B を参照).

■ 衝突判定

衝突判定には (1.7) 式の一部を利用する.

$$\begin{cases} |x_{ij}| - (r_i + r_j) < 0 & \to 接触あり \\ \text{otherwise} & \to 接触なし (この時 $f_{ij} = \mathbf{0}) \end{cases}$ (1.10)$$

1.1.2 接触力の接線方向成分

ケルビン・フォークトモデルによる接触力の接線方向成分 $f_{t_{ij}}$ は、法線方向と同様に

$$\mathbf{f}_{t_{ij}} = -k_t \mathbf{\delta}_{t_{ij}} - \eta_t \mathbf{v}_{t_{ij}} \tag{1.11}$$

として与えられる。ここで,添え字 t は接線方向成分を表す。法線方向の場合と異なり,単純な幾何学からは相対速度や変位を決められないので順に考える。

■ 相対速度の接線方向成分

 $oldsymbol{v}_{t_{ij}}$ は相対速度から法線方向成分を差し引けば良さそうだが,回転していることに注意して

$$\boldsymbol{v}_{t_{ij}} = \boldsymbol{v}_{ij} - (\boldsymbol{v}_{ij} \cdot \boldsymbol{n}_{ij}) \boldsymbol{n}_{ij} - (r_i \boldsymbol{\omega}_i + r_j \boldsymbol{\omega}_j) \times \boldsymbol{n}_{ij}$$

$$(1.12)$$

を用いる*5.

■ 相対変位の接線方向成分

基本的には

$$\boldsymbol{\delta}_{t_{ij}} = \int_{t_{c_0}}^{t_c} \boldsymbol{v}_{t_{ij}}(\boldsymbol{x}(t))dt$$
(1.13)

によって求める。ここで, t_{c_0} は接触した時点の時刻, t_c は接触している現時刻を表す。積分を離散化するが,変位は接触開始時の接触位置からのずれとなることに注意して

$$\boldsymbol{\delta}_{t_{ij}}^{\mathbf{n}} \approx \sum_{\mathbf{n}=N_0}^{N} \boldsymbol{v}_{t_{ij}}^{\mathbf{n}} \Delta t \approx \left\{ \sum_{\mathbf{n}=N_0}^{N} |\boldsymbol{v}_{t_{ij}}^{\mathbf{n}}| \Delta t \right\} \boldsymbol{t}_{ij}^{N} = \underbrace{\sum_{\mathbf{n}=N_0}^{N-1} |\boldsymbol{\delta}_{t_{ij}}^{\mathbf{n}}| \boldsymbol{t}_{ij}}_{\mathbf{g}\hat{\boldsymbol{h}} \setminus \hat{\boldsymbol{t}} \times \hat{\boldsymbol{v}}_{t_{ij}}} \Delta t$$
(1.14)

^{*5 [}メモ] 非常に多くの文献で符号に間違いが見られるので注意.

と近似する。ここで, $\delta_{t_{ij}}^n$ は n ステップ時における接線方向の変位, $v_{t_{ij}}^n$ は n ステップ時における速度の接線方向成分を表し, N_0 は接触開始時刻における計算ステップ数,N は接触している現在の計算ステップ数を表す。2 つ目の近似は N-1 ステップ時までに累積した変位を N ステップ時における単位接線ベクトル t_{ij}^N の方向で近似したことに由来する。ここで,単位接線ベクトルは

$$\boldsymbol{t}_{ij} = \frac{\boldsymbol{v}_{t_{ij}}}{|\boldsymbol{v}_{t_{ij}}|} \tag{1.15}$$

から決める. $v_{tij} = 0$ の場合は接線方向の変位が変化しないので

$$\delta_{t_{ij}}^{n} = \delta_{t_{ij}}^{n-1} \quad (v_{t_{ij}} = 0)$$
 (1.16)

である. なお、接触してから累積した変位の情報は、各接触粒子に対して個別に保持しておく必要がある.

1.1.3 摩擦力の考慮

クーロンの摩擦モデルを考え、接触力の接線方向成分が最大静止摩擦力を越えると滑りが生じる ようにして、接線方向にはそれ以上力が加わらないようにする. すなわち

$$\begin{cases}
\mathbf{f}_{t_{ij}} = \mathbf{f}_{t_{ij}} & (|\mathbf{f}_{t_{ij}}| \le \mu |\mathbf{f}_{n_{ij}}|) \\
\mathbf{f}_{t_{ij}} = -\mu |\mathbf{f}_{t_{ij}}| \mathbf{t}_{ij} & (|\mathbf{f}_{t_{ij}}| > \mu |\mathbf{f}_{n_{ij}}|)
\end{cases}$$
(1.17)

とする. ここで、 μ は摩擦係数である. 滑ると接線方向の力はそれ以上大きくならないので

$$\delta_{t_{ij}}^{n} = \delta_{t_{ij}}^{n-1} \quad (|f_{t_{ij}}| > \mu |f_{n_{ij}}|)$$
 (1.18)

とする.

1.2 DEM の角運動量保存式

(1.2) 式は接触力の接線方向成分 $f_{t_{ij}}$ を用いて

$$I_{i}\frac{d\boldsymbol{\omega}_{i}}{dt} = \sum_{i} \left(\boldsymbol{x}_{ji} \times \boldsymbol{f}_{t_{ij}} + \boldsymbol{M}_{ij}\right)$$
(1.19)

と書ける。ここで,最初の項は接線方向の力によって生じるトルク,二つ目の項は回転摩擦によるトルクを表す。なお,トルクの計算には粒子iから見た粒子jの相対位置 x_{ji} を用いることに注意。

■ 回転摩擦を考える場合

通常の DEM 粒子は完全な球体であるため、いびつな形状を持つ実際の粒子を精確には表現できない. この応急処置として、回転摩擦という人為的なトルクを導入することがある.

$$\mathbf{M}_{ij} = -\mu_r r_i |\mathbf{f}_{n_{ij}}| \frac{\boldsymbol{\omega}_i - \boldsymbol{\omega}_j}{|\boldsymbol{\omega}_i - \boldsymbol{\omega}_j|}$$
(1.20)

ここで、回転摩擦係数 μ_r は実験から決めるようである.

2 数值的安定性条件

基礎方程式 ((1.1) 式および (1.2) 式) の時間離散化として,最もシンプルな**前進オイラー法**を採用する.この時 Δt の上限は,以下に示す von Neumann の安定性解析から得られる.

2.1 単振動に関する線形安定性解析

問題は 1 次元とし,まずは粘性減衰項を消去した運動方程式を考える*6.着目粒子 i の接触粒子 j との相互作用を考え,基準状態として静止状態 (u=0 かつ相対変位が 0) を考える.この基準状態に摂動 u=u,x=x を加えると次のような線形の運動方程式が得られる.

$$\begin{cases}
m\dot{u} + kx = 0 \\
\dot{x} = u
\end{cases}$$
(2.1)

これを前進オイラー法で離散化すると

$$\begin{cases} m \frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} + kx^n = 0\\ \frac{x^{n+1} - x^n}{\Delta t} = u^{n+1} \end{cases}$$
 (2.2)

となる.ここで, Δt は時間刻み幅である.また,位置の更新は速度を更新した後に行うので,新 しい速度 u^{n+1} を用いることに注意.まとめると

$$m\frac{x^{n+1} - 2x^n + x^{n-1}}{(\Delta t)^2} + kx^n = 0$$
(2.3)

となる. 上式は 3 つの異なる時間ステップにおける量が混在しているので扱いづらい. そこで, (x^{n+1}, x^n) を一つのペア (ベクトル) として扱うことにする. この時, 以下の行列を得る.

$$\begin{pmatrix} x^{n+1} \\ x^n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 - \frac{k(\Delta t)^2}{m} & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x^n \\ x^{n-1} \end{pmatrix}$$
 (2.4)

ここで、2 列目には $x^n=x^n$ という自明な式を加えた.これは未来のベクトル (x^{n+1},x^n) と現在のベクトル (x^n,x^{n-1}) を関係づける式である.便宜上

$$X^{n+1} = AX^n \tag{2.5}$$

と書いておく. ここで

$$\boldsymbol{X}^{n+1} \coloneqq \begin{pmatrix} x^{n+1} \\ x^n \end{pmatrix} \tag{2.6}$$

$$\mathbf{A} \coloneqq \begin{pmatrix} 2 - \frac{k(\Delta t)^2}{m} & -1\\ 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{2.7}$$

(2.5) 式は漸化式であり、初期摂動 X^1 から順に計算することで

$$\boldsymbol{X}^{n+1} = \boldsymbol{A}^n \boldsymbol{X}^1 \tag{2.8}$$

^{*6} 同時に考えると面倒なので、粘性減衰項に関する安定性解析(後述)とは独立に考えた.

が得られる. 従って、与えた摂動 X^1 が (n+1) ステップ時に増大している (**数値的に不安定である**) か、あるいは減衰している (**数値的に安定である**) かは行列 A^n に依存する. 次に A^n を求める ために、行列 A の対角化を考える.

$$\mathbf{P}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{P} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0\\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix} \tag{2.9}$$

ここで, λ_1,λ_2 は $m{A}$ の固有値, 行列 $m{P}$ は $m{A}$ の固有ベクトルを横に並べた行列である. この時, 以下が成り立つ.

$$\underbrace{(\boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{P})(\boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{P})\cdots(\boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{P})}_{n \text{ (B)}} = \boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{A}^{n}\boldsymbol{P} = \begin{pmatrix} \lambda_{1}^{n} & 0\\ 0 & \lambda_{2}^{n} \end{pmatrix}$$
(2.10)

すなわち

$$\mathbf{A}^{n} = \mathbf{P} \begin{pmatrix} \lambda_{1}^{n} & 0 \\ 0 & \lambda_{2}^{n} \end{pmatrix} \mathbf{P}^{-1} \tag{2.11}$$

これを (2.8) 式に代入して整理すると

$$\mathbf{P}^{-1}\mathbf{X}^{n+1} = \begin{pmatrix} \lambda_1^n & 0 \\ 0 & \lambda_2^n \end{pmatrix} \mathbf{P}^{-1}\mathbf{X}^1$$
 (2.12)

となる. P^{-1} は定ベクトルなので, (n+1) ステップ時の解 X^{n+1} が発散するかしないかは A の 固有値だけに依存することが分かる. 以上から数値的に安定であるためには

$$|\lambda_1| < 1 \quad \text{and} \quad |\lambda_2| < 1 \tag{2.13}$$

が満たされる必要がある.

A の固有方程式を計算すると

$$\lambda^2 - \left(2 - \frac{k(\Delta t)^2}{m}\right)\lambda + 1 = 0\tag{2.14}$$

となるので, 固有値は

$$\lambda = \frac{1}{2} \left[2 - \frac{k(\Delta t)^2}{m} \pm \sqrt{\left(2 - \frac{k(\Delta t)^2}{m}\right)^2 - 4} \right]$$
 (2.15)

である. 判別式により固有値の値が変わるので、順に調べる.

■ 固有値が異なる2つの実数である場合

この場合, 判別式が正なので

$$\left(2 - \frac{k(\Delta t)^2}{m}\right)^2 - 4 = \frac{k(\Delta t)^2}{m} \left(\frac{k(\Delta t)^2}{m} - 4\right) > 0$$

$$\left(\sqrt{\frac{k}{m}} \Delta t + 2\right) \left(\sqrt{\frac{k}{m}} \Delta t - 2\right) > 0$$

$$\Delta t > 2\sqrt{\frac{m}{k}} \quad \because \left(\sqrt{\frac{k}{m}} \Delta t + 2\right) > 0 \quad (2.16)$$

という条件のもとで考える. 安定性条件 $|\lambda| < 1 \Leftrightarrow -1 < \lambda < 1$ より

$$-1 < \frac{1}{2} \left[2 - \frac{k(\Delta t)^2}{m} \pm \sqrt{\left(2 - \frac{k(\Delta t)^2}{m}\right)^2 - 4} \right] < 1$$
 (2.17)

となり、整理すると

$$\underbrace{\frac{k(\Delta t)^2}{m} - 4}_{>0} < \pm \sqrt{\frac{k(\Delta t)^2}{m} \left(\frac{k(\Delta t)^2}{m} - 4\right)} < \frac{k(\Delta t)^2}{m} \tag{2.18}$$

となる。ところが、判別式が正であることを踏まえると不等号の一番左が正になるので、 λ の複号が負の場合に上式を満たせなくなる。従って、固有値が異なる 2 つの実数になる場合、すなわち

$$\Delta t > 2\sqrt{\frac{m}{k}} \tag{2.19}$$

の場合は数値的に不安定である.

■ 固有値が縮退する場合

この場合はそもそも対角化可能でないが一応考えておく (∵ 重複度と固有空間の次元が不一致)。 判別式がゼロになるので, (2.16) 式より

$$\Delta t = 2\sqrt{\frac{m}{k}} \tag{2.20}$$

である. この時, $\lambda = -1$ である.

■ 固有値が二つの異なる虚数である場合

判別式が負なので (2.16) 式より

$$\Delta t < 2\sqrt{\frac{m}{k}} \tag{2.21}$$

である. この時

$$\lambda = \frac{1}{2} \left[2 - \frac{k(\Delta t)^2}{m} \right] \pm \hat{i} \left[\frac{1}{2} \sqrt{\left(2 - \frac{k(\Delta t)^2}{m} \right)^2 - 4} \right] =: a \pm \hat{i}b$$
 (2.22)

となる.ここで、 \hat{i} は虚数単位である.安定性条件 $|\lambda|=1\Leftrightarrow a^2+b^2<1$ より

$$a^2 + b^2 < 1 \quad \Rightarrow \quad \Delta t < 2\sqrt{\frac{m}{k}} \tag{2.23}$$

が得られる. これは固有値が二つの異なる虚数となる条件((2.21)式)と同じである.

■ 単振動の場合の安定性解析まとめ

線形ばねの運動方程式を前進オイラー法で離散化した場合の数値的安定性条件は以下である.

$$\Delta t < 2\sqrt{\frac{m}{k}} \tag{2.24}$$

2.2 粘性減衰に関する線形安定性解析

今度は以下を考える. なお、それ以外の設定は単振動の場合と同じである.

$$\begin{cases} m\dot{u} + \eta u = 0\\ \dot{x} = u \end{cases} \tag{2.25}$$

これを前進オイラー法で離散化すると

$$\begin{cases} m \frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} + \eta u^n = 0\\ \frac{x^{n+1} - x^n}{\Delta t} = u^{n+1} \end{cases}$$
 (2.26)

となる. まとめると

$$m\frac{x^{n+1} - 2x^n + x^{n-1}}{(\Delta t)^2} + \eta \frac{x^n - x^{n-1}}{\Delta t} = 0$$
 (2.27)

となる. この時, 以下の行列を得る.

$$\begin{pmatrix} x^{n+1} \\ x^n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 - \frac{k(\Delta t)^2}{m} & -1 + \frac{\eta \Delta t}{m} \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x^n \\ x^{n-1} \end{pmatrix}$$
 (2.28)

単振動の場合と異なるのは赤字の部分だけである. 固有方程式を解くと

$$\lambda = 1, \quad 1 - \frac{\eta \Delta t}{m} \tag{2.29}$$

を得る.数値的に安定性になる条件 $|\lambda| < 1$ から

- λ = 1 の場合:中立安定
- $\lambda = 1 \eta \Delta/m$ の場合:

$$-1 < \lambda < 1 \quad \Rightarrow \quad \Delta t < \frac{2m}{\eta} \tag{2.30}$$

2.3 まとめ

以上をまとめると

$$\Delta t = \min\left(2\sqrt{\frac{m}{k}}, \frac{2m}{\eta}\right) \tag{2.31}$$

となる. 通常の DEM 計算では、粘性係数よりもばね係数の方を大きくするので

$$k \gg \frac{\eta^2}{m} \quad \Rightarrow \quad 2\sqrt{\frac{m}{k}} \ll \frac{m}{n}$$
 (2.32)

である. そこで, 実用上はばね係数に関する時間ステップ条件を用いる.

3 壁との接触

粒子iが壁に接触した場合の変位の法線方向成分 $\delta_{n_{im}}$ は,点と面の距離の公式を用いて

$$\boldsymbol{\delta}_{n_{iw}} = \left\{ \frac{|ax_i + by_i + cz_i + d|}{\sqrt{a^2 + b^2 + c^2}} - r_i \right\} \boldsymbol{n}_{iw}$$
(3.1)

によって決める. ここで、粒子 i の位置を $x_i = (x_i, y_i, z_i)$ とし、壁面を

$$ax + by + cz + d = 0 ag{3.2}$$

とした。また、 n_{iw} は (1.9) 式において接触粒子 j を壁の接触点 x_w に置き換えたものである。接線方向の計算は接触粒子 j の位置 x_j を接触点の位置 x_w に置き換えれば良い。ただし、壁の動く速度や回転に留意すること。

点と面の距離の公式

まず,面を定義する一般式を求める a .ある平面に垂直なベクトルの一つを m n=(a,b,c) とし,平面上の任意の一点を $A(x_0,y_0,x_0)$ とする.この時,点 P(x,y,z) が同じ平面上にあれば, $\overrightarrow{AP}\perp m n$ が成り立つ.すなわち

$$\overrightarrow{AP} \cdot \boldsymbol{n} = 0 \quad \Leftrightarrow \quad a(x - x_0) + b(y - y_0) + c(z - z_0) = 0$$

$$\Leftrightarrow \quad ax + by + cz + d = 0 \tag{3.3}$$

ここで, $d=ax_0+by_0+cz_0$ とした.上式が平面を表す式である.ここで,係数 a,b,c は 法線ベクトルの各成分であることに注意.

次に,点と面の距離を表す式を考える b . 上で定義された平面に対して,平面上にない点 B(x',y',z') から垂線を引き,その交点の座標を H(X,Y,Z) とする.この時, $\overrightarrow{HB}\parallel n$ なので,実数 t を用いて

$$\overrightarrow{HB} = t\mathbf{n} \Leftrightarrow (x' - X, y' - Y, z' - Z) = t(a, b, c)$$
(3.4)

両辺に対して n との内積を取り、-aX - bY - cZ = d を用いると

$$a(x'-X) + b(y'-Y) + c(z'-Z) = t(a^2 + b^2 + c^2)$$

$$ax' + by' + cz' + d = t(a^2 + b^2 + c^2) \neq 0$$
(3.5)

$$t = \frac{ax' + by' + cz' + d}{a^2 + b^2 + c^2}$$
 (3.6)

よって、HB の長さ、すなわち |tn| は

$$|t|\sqrt{a^2 + b^2 + c^2} = \frac{|ax' + by' + cz' + d|}{\sqrt{a^2 + b^2 + c^2}}$$
(3.7)

となる. これが点と平面の距離を表す公式である.

^a[参考文献] 平面の方程式とその3通りの求め方, 高校数学の美しい物語.

^b[参考文献] 点と平面の距離公式と例題・2 通りの証明, 高校数学の美しい物語.

謝辞

DEM や剛体の基礎理論に関して、指導教員の吉田茂生先生 (准教授)、研究室の後輩である寺田莉士さん、そして友人の中村草平さん (@九大物理) にご助言を賜りました。また、本ノートの作成に当たっては川田佳史さん (@東大理) の IATEX テンプレートを使用させて頂きました。ここに深く感謝申し上げます。

参考文献

■ 論文

[1] Cundall, P. A. and Strack, O. D. L. (1979) A discrete numerical model for granular assemblies, *Géotechnique*, **29**, 1, 47–65.

■本

- [2] 浅井光輝 (2022) 明解粒子法: SPH,MPS,DEM の理論と実践, 丸善出版.
- [3] 後藤仁志 (2018) 粒子法:連続体・混相流・粒状体のための計算科学,森北出版.
- [4] 酒井幹夫, 茂渡悠介, 水谷慎 (2012) 粉体の数値シミュレーション (Numerical simulation of granular flows), 丸善出版.
- [5] 篠本滋, 坂口英継 著, 植松恒夫, 青山秀明 編, 益川敏英 監修 (2013) 力学, 東京図書.
- [6] 村上 正康, 佐藤 恒雄, 野澤 宗平, 稲葉 尚志 (2016) 教養の線形代数, 培風館.

■ ネット資料

- [7] @fujitagodai4 (fujita godai) (2022) DEM における時間増分の決め方について. Qiita. https://qiita.com/fujitagodai4/items/0658d4b07a72897c7a59 (Last access: 2025/07/09).
- [8] @fujitagodai4 (fujita godai) (2022) DEM (個別要素法・離散要素法) の紹介. Qiita. https://qiita.com/fujitagodai4/items/c936fd82247e46731289 (Last access: 2025/07/08).
- [9] 高校数学の美しい物語 (2021) 平面の方程式とその3通りの求め方. https://manabitimes.jp/math/679

(Last access: 2025/07/09).

- [10] 高校数学の美しい物語 (2023) 点と平面の距離公式と例題・2 通りの証明.
 - https://manabitimes.jp/math/859

(Last access: 2025/07/09).

付録 A 剛体の基礎方程式

本節では DEM の基礎となる**剛体の基礎方程式**を導出する.

A.1 質点系の基礎

多数の質点の集まりを**質点系**あるいは**多粒子系**という.変形しない物体である**剛体**は,質点系の特殊な場合である.

質点系の教科書的な議論における主な目的は、物体の運動を**重心運動**と重心から見た**相対運動**に分離することである。一般にn 個の質点から成る質点系に対する**自由度**は3n 個である (3 次元の場合)。そのため、各粒子に関する運動方程式 (3 つの成分を持つ)をn 個連立して解けば良い。しかし、「変形しない」という剛体の強力な制約条件の下では、自由度が高々6 つとなるため (後述)、n 本の式を連立するのは非効率である。つまり、始めから6 本の式だけを考えて、残りの (n-6) 本の式を無視できるような枠組みがあると効率的で見通しが良い。その枠組みこそ、物体の運動を「重心運動と重心からの相対運動に分けて考える」というものである。

A.1.1 重心の位置と速度

重心あるいは**質量中心**の位置 X_G を以下で定義する.

$$\boldsymbol{X}_{G} \coloneqq \frac{\sum_{i} m_{i} \boldsymbol{x}_{i}}{\sum_{i} m_{i}} = \frac{\sum_{i} m_{i} \boldsymbol{x}_{i}}{M}$$
(A.1)

ここで

$$M := \sum_{i} m_{i} \tag{A.2}$$

であり、 m_i は粒子 i の質量、 x_i は粒子 i の位置である。すなわち重心とは、各粒子の質量で重み付けして全質量で平均を取った位置ベクトルである。また、重心の速度 V_G は速度の定義から

$$\mathbf{V}_{G} := \frac{d\mathbf{X}_{G}}{dt} = \frac{1}{M} \sum_{i} m_{i} \frac{d\mathbf{x}_{i}}{dt}$$
(A.3)

である.

A.1.2 重心の運動方程式

各粒子の運動方程式は以下のように書ける.

$$m_i \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \mathbf{F}_i + \sum_j \mathbf{F}_{ij} \tag{A.4}$$

ここで、 $v_i \coloneqq dx_i/dt$ 、 F_i は粒子 i に働く外力、 F_{ij} は粒子 i が粒子 j から受ける内力を表す.なお、作用反作用の法則から $F_{ij} = -F_{ji}$ なので

$$\sum_{i} \sum_{j} \mathbf{F}_{ij} = \frac{1}{2} \sum_{i} \sum_{j} (\mathbf{F}_{ij} + \mathbf{F}_{ji}) = \mathbf{0}$$
(A.5)

を満たす. (A.4) 式の両辺をi に関して和を取ると

$$\sum_{i} \left(m_i \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} \right) = \sum_{i} \mathbf{F}_i + \sum_{i} \sum_{j} \mathbf{F}_{ij}$$
(A.6)

となり、(A.3) 式および(A.5) 式を用いることで

$$M\frac{d\mathbf{V}_G}{dt} = \sum_{i} \mathbf{F}_i \tag{A.7}$$

という重心の運動方程式を得る. 重心の運動方程式の右辺には外力項だけが現れる.

A.2 質点系の全運動量と全運動エネルギー

A.2.1 質点系の全運動量

質点系における全運動量 P は、各粒子の運動量 $p_i \coloneqq m_i v_i$ および (A.3) 式を用いて

$$P := \sum_{i} p_i = \sum_{i} m_i v_i = M V_G$$
(A.8)

と書ける. そこで重心の運動方程式 ((A.7) 式) より

$$\frac{d\mathbf{P}}{dt} = \sum_{i} \mathbf{F}_{i} \tag{A.9}$$

を得る. すなわち, 外力が働かない系では全運動量が保存する.

A.2.2 質点系の全運動エネルギー

質点系における全運動エネルギー K は

$$K := \sum_{i} \frac{1}{2} m_i \mathbf{v}_i^2 \tag{A.10}$$

である. ここで、重心から見た相対位置 x'_i 、相対速度 v'_i を以下のように定義する.

$$x_i' \coloneqq x_i - X_G \tag{A.11}$$

$$\mathbf{v}_i' \coloneqq \mathbf{v}_i - \mathbf{V}_G \tag{A.12}$$

この時, (A.10) 式は

$$K = \sum_{i} \frac{1}{2} m_{i} \mathbf{v}_{i}^{2} = \sum_{i} \frac{1}{2} m_{i} (\mathbf{V}_{G} + \mathbf{v}_{i}^{\prime})^{2}$$

$$= \frac{1}{2} \mathbf{V}_{G}^{2} \sum_{i} m_{i} + \sum_{i} (m_{i} \mathbf{v}_{i}^{\prime}) \cdot \mathbf{V}_{G} + \sum_{i} \frac{1}{2} m_{i} \mathbf{v}_{i}^{\prime 2}$$

$$= \frac{1}{2} M \mathbf{V}_{G} + \sum_{i} \frac{1}{2} m_{i} \mathbf{v}_{i}^{\prime 2}$$
(A.13)

ここで、赤字の部分は、 v_i' の定義および (A.8) 式より

$$\sum_{i} m_{i} \mathbf{v}'_{i} = \sum_{i} m_{i} (\mathbf{v}_{i} - \mathbf{V}_{G}) = \sum_{i} m_{i} \mathbf{v}_{i} - M \mathbf{V}_{G} = \mathbf{0}$$
(A.14)

となることを用いた.この式は重心から見た相対運動の運動量の和が常にゼロとなることを表している*⁷.

質点系の全運動エネルギーは、重心運動のエネルギーと重心から見た相対運動のエネルギーの和で表せることが分かった。これを物理的に解釈すると以下となる [篠本, 坂口ほか, 2013].

- 通常の物体は多数の原子や分子から成る集合体 (質点系) である
- 重心運動のエネルギーは、この集合体の**運動エネルギー**を指す
- 相対運動のエネルギーは、内部の熱運動に起因する熱エネルギー (内部エネルギー) を指す

A.3 質点系の全角運動量

A.3.1 質点系の全角運動量

粒子iに関する角運動量 l_i は

$$\boldsymbol{l}_i \coloneqq \boldsymbol{x}_i \times \boldsymbol{p}_i = \boldsymbol{x}_i \times m_i \boldsymbol{v}_i \tag{A.16}$$

と定義される. 従って, 質点系の全角運動量 L は

$$\boldsymbol{L} \coloneqq \sum_{i} (\boldsymbol{x}_{i} \times m_{i} \boldsymbol{v}_{i}) \tag{A.17}$$

である.

全運動エネルギーの場合と同様に、原点周りの重心運動の角運動量と、重心周りの相対運動の角運動量に分離してみる。定義 (A.11) 式および (A.12) 式を用いると

$$L = \sum_{i} (\boldsymbol{x}_{i} \times m_{i} \boldsymbol{v}_{i}) = \sum_{i} \left[(\boldsymbol{X}_{G} + \boldsymbol{x}'_{i}) \times m_{i} (\boldsymbol{V}_{G} + \boldsymbol{v}'_{i}) \right]$$

$$= \boldsymbol{X}_{G} \times M \boldsymbol{V}_{G} + \boldsymbol{X}_{G} \times \sum_{i} m_{i} \boldsymbol{v}'_{i} + \sum_{i} m_{i} \boldsymbol{x}'_{i} \times \boldsymbol{V}_{G} + \sum_{i} \boldsymbol{x}'_{i} \times m_{i} \boldsymbol{v}'_{i}$$

$$= \boldsymbol{X}_{G} \times M \boldsymbol{V}_{G} + \sum_{i} \boldsymbol{x}'_{i} \times m_{i} \boldsymbol{v}'_{i}$$

$$= \boldsymbol{L}_{G} + \boldsymbol{L}' \tag{A.18}$$

ここで

$$L_G := X_G \times MV_G = X_G \times P \tag{A.19}$$

$$L' := \sum_{i} x_i' \times m_i v_i' \tag{A.20}$$

赤字部分には (A.14) を用い、青字部分は定義 (A.1) 式および (A.11) 式から

$$\sum_{i} m_i \mathbf{x}_i' = \sum_{i} m_i \mathbf{x}_i - \mathbf{X}_G \sum_{i} m_i = \mathbf{0}$$
(A.21)

$$\sum_{i} \mathbf{x}_{i}' = \sum_{i} \mathbf{x}_{i} - \sum_{i} \frac{m \sum_{j} \mathbf{x}_{j}}{M} = \sum_{i} \mathbf{x}_{i} - \frac{\sum_{i} m}{M} \cdot \sum_{j} \mathbf{x}_{j} = \mathbf{0}$$
(A.15)

となる. これは「重心が相対位置の和 (あるいは相対速度の和) がゼロになるような点」として定義されたことを意味する.

 $^{^{*7}}$ というより寧ろ, $m_i v_i'$ あるいは $m_i x_i'$ の和がゼロになるように重心を定義したのである.簡単のため,全粒子の質量を m とし,相対位置の定義 ((A.11) 式)を i について和を取ると

となることを用いた*8. 従って、質点系の全角運動量は「原点周りの重心運動の角運動量と重心周りの相対運動の角運動量の和」で表すことができる。なお、相対運動の運動量の和はゼロであったが((A.14)式)、相対運動の角運動量の和はゼロにならないことに注意。

A.3.2 全角運動量の時間変化

全角運動量の時間変化を求めると

$$\frac{d\mathbf{L}}{dt} = \underbrace{\sum_{i} \mathbf{v}_{i} \times m_{i} \mathbf{v}_{i}}_{=0} + \sum_{i} \mathbf{x}_{i} \times \frac{d(m_{i} \mathbf{v}_{i})}{dt} = \sum_{i} \mathbf{x}_{i} \times \left(\mathbf{F}_{i} + \sum_{j} \mathbf{F}_{ij}\right)$$
(A.22)

となる. 最後の変形には (A.4) 式を用いた. ここで

$$\sum_{i} \sum_{j} \boldsymbol{x}_{i} \times \boldsymbol{F}_{ij} = \frac{1}{2} \sum_{i} \sum_{j} (\boldsymbol{x}_{i} \times \boldsymbol{F}_{ij} + \boldsymbol{x}_{j} \times \boldsymbol{F}_{ji}) = \frac{1}{2} \sum_{i} \sum_{j} \boldsymbol{x}_{ij} \times \boldsymbol{F}_{ij} = \boldsymbol{0}$$
(A.23)

である. 式変形には $F_{ij} = -F_{ji}$ および $F_{ij} \parallel x_{ij} \coloneqq x_i - x_j$ を用いた. ゆえに

$$\frac{d\boldsymbol{L}}{dt} = \sum_{i} \boldsymbol{x}_{i} \times \boldsymbol{F}_{i} \tag{A.24}$$

を得る. すなわち, 質点系の全角運動量は外力による力のモーメントがない場合に保存する. 加えて, 物体全体の回転を考える際は分子間力などの内力を考えなくて良いことが分かる.

A.3.3 相対運動の角運動量の時間変化

(A.19) 式から, 原点周りの重心運動の角運動量の時間変化は

$$\frac{d\mathbf{L}_G}{dt} = \underbrace{\mathbf{V}_G \times M\mathbf{V}_G}_{=0} + \mathbf{X}_G \times M\frac{d\mathbf{V}_G}{dt} = \mathbf{X}_G \times \sum_i \mathbf{F}_i$$
(A.25)

となる. ここで, (A.7) 式を用いた. そこで相対運動の角運動量の時間変化は

$$\frac{d\mathbf{L}'}{dt} = \frac{d\mathbf{L}}{dt} - \frac{d\mathbf{L}_G}{dt} = \sum_{i} (\mathbf{x}_i - \mathbf{X}_G) \times \mathbf{F}_i = \sum_{i} \mathbf{x}'_i \times \mathbf{F}_i$$
(A.26)

となる. 従って、相対運動の角運動量の時間変化は、重心周りの外力のモーメントの和によって決まる.

重心運動の角運動量変化の式 ((A.25) 式) を解くことは,重心運動の運動量変化の式 ((A.7) 式) を解くことと等価である.なぜなら,(A.7) 式の両辺に X_G との外積を取ることで

$$\mathbf{X}_G \times M \frac{d\mathbf{V}_G}{dt} = \mathbf{X}_G \times \sum_i \mathbf{F}_i \quad \Rightarrow \quad \frac{d\mathbf{L}_G}{dt} = \mathbf{X}_G \times \sum_i \mathbf{F}_i$$
 (A.27)

となるからである。従って、重心の運動方程式と重心の角運動量の変化式は本質的には等価である。一方、全角運動量の変化式には相対運動の寄与 $d\mathbf{L}'/dt$ が含まれるので、全運動量の変化式と全角運動量の変化式は等価にならない。

^{*8} これは重心の定義と言っても良い. 詳しくは (A.15) 式周辺を参照.

A.3.4 外力が一様な重力の場合

外力として、重力 $F_i = m_i g$ を考える場合、(A.26) 式の右辺は

$$\sum_{i} \mathbf{x}_{i}' \times m_{i} \mathbf{g} = \sum_{i} m_{i} \mathbf{x}_{i}' \times \mathbf{g} = \mathbf{0}$$
(A.28)

となる.ここで,(A.21) 式を用いた.従って,重力のみが働く場合は $\dot{L}'=0$ となるので

$$\frac{d\mathbf{L}}{dt} = \frac{d\mathbf{L}_G}{dt} = \mathbf{X}_G \times M\mathbf{g} \tag{A.29}$$

となる。すなわち,外力が一様重力の場合では,質点系に働く力のモーメントが重心に全質量が集中した場合の重力のモーメントと等しくなる.特に DEM では「重心を中心とする角運動量 L' が重力の影響を受けない」ことが重要である.

A.4 ここまでのまとめ

■ 重心運動の運動量・角運動量の時間変化を表す式

$$M\frac{d\mathbf{V}_G}{dt} = \sum_{i} \mathbf{F}_i \tag{A.7}$$

$$\frac{d\mathbf{L}_G}{dt} = \mathbf{X}_G \times \sum_i \mathbf{F}_i \tag{A.25}$$

ここで

$$V_G := \frac{dX_G}{dt} = \frac{d}{dt} \left(\frac{\sum_i m_i x_i}{M} \right)$$
(A.3)

$$L_G := X_G \times MV_G \tag{A.19}$$

■ 相対運動の運動量・角運動量の「和」の時間変化を表す式

$$\frac{d\mathbf{p}'}{dt} = \mathbf{0} \tag{A.14}$$

$$\frac{d\mathbf{L}'}{dt} = \sum_{i} \mathbf{x}'_{i} \times \mathbf{F}_{i} \tag{A.26}$$

ここで、重心から見た相対位置 $x_i' = x_i - X_G$ に関して

$$\mathbf{p}' \coloneqq \sum_{i} m_i \mathbf{v}_i' = 0 \tag{A.14}$$

$$L' := \sum_{i} x_i' \times m_i v_i' \tag{A.20}$$

■ 重要なこと

- 質点系の並進運動は、重心に関する「質点」の運動方程式から決まる
- 質点系の回転運動は、重心運動の角運動量の変化式と、相対運動の角運動量の変化式の和によって決まる
- もしくは質点系の回転運動は、相対運動の角運動量の変化式のみでも決められる

A.5 剛体の運動

剛体とは、物体の大きさは考慮するが、体積変化や形の変化がない(つまり、変形しない)理想的な物体である.

A.5.1 剛体の自由度

剛体の位置は重心の位置で代表させることができるので、その自由度は3である。剛体の回転は、独立した3軸周りの回転が考えられるので、その自由度は3である。ゆえに、剛体の自由度は6であり、6つの方程式があればその運動を記述できる。そこで剛体の基礎方程式として以下を採用する。

剛体の基礎方程式

$$M\frac{d\mathbf{V}_G}{dt} = \sum_{i} \mathbf{F}_i \tag{A.30}$$

$$\frac{d\mathbf{L}'}{dt} = \sum_{i} \mathbf{x}'_{i} \times \mathbf{F}_{i} \tag{A.31}$$

A.5.2 慣性モーメント

重心位置を原点とし,z 軸に固定された剛体を考える。z 軸周りの剛体の回転運動を考え,その角速度を $\omega \coloneqq \dot{\theta}$ とする。質量 m_i の質点 i が回転軸 (重心) からの距離 r_i の位置にあるとし,これを円柱座標系で表す。

$$\mathbf{x}_i' = (r_i \cos \theta_i, r_i \sin \theta_i, z_i) \tag{A.32}$$

速度は

$$\mathbf{v}_i' = (-r_i \omega \sin \theta_i, r_i \omega \cos \theta_i, 0) \tag{A.33}$$

である. ただし、剛体なので $\partial r_i'/\partial t=0$ および $\dot{\theta}_i=\omega$ を用いた. そこで全角運動量は

$$L'_{z} = \sum_{i} (\boldsymbol{x}'_{i} \times m_{i} \boldsymbol{v}'_{i})_{z} = \sum_{i} m_{i} r_{i}^{2} \omega =: I \omega$$
(A.34)

となる。ここで

$$I := \sum_{i} m_i r_i^2 \tag{A.35}$$

を慣性モーメント (moment of inertia) と呼ぶ. 通常, 剛体は連続体なので上式を連続化した

$$I := \int_{V} \rho(x, y, z) r^{2} dx dy dz \tag{A.36}$$

が用いられる。ここで,r は軸からの距離である。 慣性モーメントは回転運動に対する剛体の慣性の大きさを表す。これを用いると,剛体の角運動量の式 ((A.31) 式) は

$$I\frac{d\omega}{dt} = \sum_{i} (\boldsymbol{x}_{i}^{\prime} \times \boldsymbol{F}_{i})_{z} \tag{A.37}$$

と書ける. なお, 回転軸が固定されていない場合は I の時間発展を考える必要がある.

■ 慣性モーメントの例: 球の場合

半径 a, 質量 M の剛体球の慣性モーメントを求めてみると

$$I = \int_{-a}^{a} \left(\int_{0}^{\sqrt{a^2 - z^2}} \rho r^2 2\pi r dr \right) dz = \frac{2}{5} M a^2$$
 (A.38)

となる. ただし,

$$\rho = \frac{3M}{4\pi a^3} \tag{A.39}$$

を用いた.

付録 B 反発係数 e を用いた抵抗係数 η の表現

壁衝突時の反発係数 e と他の物理量を用いて、抵抗係数 η を記述することを考える. そのため に、壁面に対する法線方向の運動方程式を考える.

$$m\ddot{x} + \eta \dot{x} + kx = 0 \tag{B.1}$$

これを解くと

$$x = A \exp\left(-\frac{\eta}{2m}t\right) \exp\left(\hat{i}\alpha t\right) + B \exp\left(-\frac{\eta}{2m}t\right) \exp\left(-\hat{i}\alpha t\right)$$
 (B.2)

となる. ここで、A,B は適当な複素数の定数で、以下を定義した.

$$\alpha \coloneqq \sqrt{\frac{k}{m} - \frac{\eta^2}{4m^2}} \tag{B.3}$$

ただし,以下を仮定した((2.32)式の条件と整合的である).

$$\frac{k}{m} - \frac{\eta^2}{4m^2} > 0 \quad \Rightarrow \quad k > \frac{\eta^2}{4m} \tag{B.4}$$

壁に衝突した時刻を t=0 とし、衝突した重心位置を原点 (x=0) に取り、その衝突速度を u_a と すると一般解は

$$x = \frac{u_a}{\alpha} \sin(\alpha t) \exp\left(-\frac{\eta}{2m}t\right) \tag{B.5}$$

となる. 壁から離れる時刻は $t=\pi/\alpha$ で、その際の速度を $-u_b$ とすると

$$\dot{x} = \frac{u_a}{\alpha} \left[\alpha \cos(\alpha t) \exp\left(-\frac{\eta}{2m}t\right) - \frac{\eta}{2m} \sin(\alpha t) \exp\left(-\frac{\eta}{2m}t\right) \right]$$
 (B.6)

$$-u_b = -u_a \exp\left(-\frac{\eta\pi}{2\alpha m}\right) \tag{B.7}$$

$$e := \frac{u_b}{u_a} = \exp\left(-\frac{\eta\pi}{2\alpha m}\right) \tag{B.8}$$

が得られる.弾性衝突 (e=1) は $\eta=0$ の場合,すなわち,抵抗がない場合に達成される.最後に η について解くと,反発係数を用いた抵抗係数の式が得られる.

$$\eta = -2(\ln e)\sqrt{\frac{mk}{\pi^2 + (\ln e)^2}}$$
(B.9)