剛体アトムベクトルの数式解説（atom_vec_body.cpp）

Open DEM Japan

2025 年 6 月 30 日

系は質量中心位置 $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^3$，四元数 $\boldsymbol{q} = (q_0, q_1, q_2, q_3) \in \mathbb{R}^4$，線形速度 $\boldsymbol{v} \in \mathbb{R}^3$，角運動量 $\boldsymbol{L} \in \mathbb{R}^3$，慣性主軸まわり慣性モーメント $\boldsymbol{I} = (I_1, I_2, I_3)\,(> 0)$ をもつ剛体粒子集合 $\mathcal{B}$ を対象とする．

周期境界条件による並進補正は

$$\boldsymbol{\delta} = n_x \boldsymbol{a}_1 + n_y \boldsymbol{a}_2 + n_z \boldsymbol{a}_3, \qquad n_\alpha \in \mathbb{Z},\ (\alpha = x, y, z), \tag{1}$$

ただし直交格子では $\boldsymbol{a}_1 = (L_x, 0, 0)$, $\boldsymbol{a}_2 = (0, L_y, 0)$, $\boldsymbol{a}_3 = (0, 0, L_z)$，非直交（triclinic）では $\boldsymbol{a}_2 = (xy, L_y, 0)$, $\boldsymbol{a}_3 = (xz, yz, L_z)$ を用いる．

■通信バッファへの書き込み　送信粒子 i の “実” 位置・姿勢は

$$\boldsymbol{x}_i^{\mathrm{s}} = \boldsymbol{x}_i + \boldsymbol{\delta}, \qquad\qquad \boldsymbol{q}_i^{\mathrm{s}} = \boldsymbol{q}_i, \tag{2}$$

であり，線形速度・角運動量は

$$\boldsymbol{v}_i^{\mathrm{s}} = \boldsymbol{v}_i, \qquad \boldsymbol{L}_i^{\mathrm{s}} = \boldsymbol{L}_i. \tag{3}$$

これらをバッファ $\boldsymbol{B} \in \mathbb{R}^k$ に

$$\boldsymbol{B} = \left(\boldsymbol{x}_i^{\mathrm{s}}, \boldsymbol{q}_i^{\mathrm{s}}, \boldsymbol{v}_i^{\mathrm{s}}, \boldsymbol{L}_i^{\mathrm{s}}, \boldsymbol{I}_i, \boldsymbol{u}_i\right)$$

の順で直列化する（$\boldsymbol{u}_i$ は整数/実数の追加属性列）．

■四元数の規格化　姿勢は単位四元数である必要があるため

$$\|\boldsymbol{q}\|_2 = 1 \quad \Longrightarrow \quad \boldsymbol{q} \leftarrow \frac{\boldsymbol{q}}{\|\boldsymbol{q}\|_2}, \tag{4}$$

を常に保つ．

■角速度との対応　角運動量と角速度 $\boldsymbol{\omega}$ の関係は

$$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{I}\,\boldsymbol{\omega}, \tag{5}$$

慣性行列が対角の場合は $\omega_\alpha = L_\alpha / I_\alpha\ (\alpha = 1, 2, 3)$．四元数の時間発展は

$$\dot{\boldsymbol{q}} = \tfrac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & -\boldsymbol{\omega}^\top \\ \boldsymbol{\omega} & \boldsymbol{\Omega} \end{pmatrix}\boldsymbol{q}, \quad \boldsymbol{\Omega} = \begin{pmatrix} 0 & -\omega_3 & \omega_2 \\ \omega_3 & 0 & -\omega_1 \\ -\omega_2 & \omega_1 & 0 \end{pmatrix}, \tag{6}$$

を数値積分する（本ファイルでは時間積分自体は扱わず，あくまでデータ構造の転送・保持を実装）．

■逆通信による力・トルクの集約　受信側で加わった力 $\Delta\boldsymbol{F}$ およびトルク $\Delta\boldsymbol{\tau}$ を

$$\boldsymbol{F}_i \leftarrow \boldsymbol{F}_i + \Delta\boldsymbol{F}, \qquad \boldsymbol{\tau}_i \leftarrow \boldsymbol{\tau}_i + \Delta\boldsymbol{\tau}, \tag{7}$$

と合算する．

■剛体属性 "ボーナス" 構造　ボーナス領域は

$$\mathcal{S}_i = (\boldsymbol{q}_i, \boldsymbol{I}_i, n_i^{(I)}, n_i^{(D)}, \boldsymbol{\iota}_i, \boldsymbol{\delta}_i) \tag{8}$$

で構成され，ここで $n_i^{(I)}$，$n_i^{(D)}$ は整数／実数の追加自由度数，$\boldsymbol{\iota}_i \in \mathbb{Z}^{n_i^{(I)}}$，$\boldsymbol{\delta}_i \in \mathbb{R}^{n_i^{(D)}}$ を表す．通信では $\boldsymbol{\iota}_i$ を

$$\text{stride} = \begin{cases} n_i^{(I)} & (\text{sizeof}\, \mathit{double} = \text{sizeof}\, \mathit{int}), \\ \lceil n_i^{(I)}/2 \rceil & (\text{sizeof}\, \mathit{double} = 2\, \text{sizeof}\, \mathit{int}), \end{cases} \tag{9}$$

に詰め直して倍精度領域へ格納する．

■再スタート・ファイル　粒子 i の再スタートレコードは

$$(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{v}_i, \boldsymbol{q}_i, \boldsymbol{I}_i, \boldsymbol{L}_i, n_i^{(I)}, n_i^{(D)}, \boldsymbol{\iota}_i, \boldsymbol{\delta}_i) \in \mathbb{R}^{25+\alpha_i}, \tag{10}$$

であり $\alpha_i = n_i^{(D)} + \text{stride}$ が個別自由度分を与える．

■メモリ使用量　全剛体・付属データのメモリは

$$M = \sum_{\beta} \text{bytes}(\beta) + \sum_{i \in \mathcal{B}} \Big(n_i^{(I)}\, \text{sizeof(int)} + n_i^{(D)}\, \text{sizeof(double)} \Big) + \text{bytes(bonus)} + \text{bytes(pool)}, \tag{11}$$

β はベクトル配列 $\{\boldsymbol{x}, \boldsymbol{v}, \boldsymbol{F}, \boldsymbol{L}, \boldsymbol{q}, \boldsymbol{I}\}$ に対応する．

以上の式 (**??**)–(**??**) により，`AtomVecBody` は剛体粒子データ

$$\big\{ (\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{q}_i, \boldsymbol{v}_i, \boldsymbol{L}_i, \boldsymbol{I}_i, n_i^{(I)}, n_i^{(D)}, \boldsymbol{\iota}_i, \boldsymbol{\delta}_i) \big\}_{i \in \mathcal{B}}$$

を保持し，通信演算 Φ_{pack}，Φ_{unpack}，Φ_{reverse} を可逆に実装して大規模並列離散要素法の基盤を形成している．