

# エリプソイドアトムベクトルの数式解説 (atom\_vec\_ellipsoid.cpp)

Open DEM Japan

2025年6月30日

離散要素法 (DEM) で非球形粒子を取り扱う際、本ソースコードは粒子形状を三軸エリプソイドでモデル化し、位置・姿勢・慣性量などをメモリ上で管理するための数学的操作を実装している。以下ではコード中で用いられる主要な数式を教科書的に整理する。

まず、粒子中心を原点とし、半径ベクトルを

$$(a, b, c) = (a_x, a_y, a_z) \quad (1)$$

とすると、エリプソイド表面は

$$\frac{x'^2}{a^2} + \frac{y'^2}{b^2} + \frac{z'^2}{c^2} = 1 \quad (2)$$

で定義される。データファイルでは直径  $L_x, L_y, L_z$  が与えられるため、コード内では

$$a = \frac{L_x}{2}, \quad b = \frac{L_y}{2}, \quad c = \frac{L_z}{2} \quad (3)$$

と半径へ変換している。

■体積と質量 一様密度  $\rho$  のエリプソイド体積は

$$V = \frac{4\pi}{3} abc, \quad (4)$$

質量は

$$m = \rho V = \rho \frac{4\pi}{3} abc. \quad (5)$$

データ入力時に与えられる値は密度  $\rho$  であり、コードでは (??) を用いて質量 (??) に変換している。

■慣性モーメント 質量分布が一様なエリプソイドの主慣性モーメントは

$$I_{xx} = \frac{1}{5} m (b^2 + c^2), \quad (6a)$$

$$I_{yy} = \frac{1}{5} m (c^2 + a^2), \quad (6b)$$

$$I_{zz} = \frac{1}{5} m (a^2 + b^2). \quad (6c)$$

主軸が粒子に固着しているため、姿勢が変わっても値自体は変化しない。

■姿勢表現 コードは単位四元数

$$\mathbf{q} = (q_0, q_1, q_2, q_3)^T \quad (7)$$

を用いてエリプソイドの回転を管理する。正規化条件

$$q_0^2 + q_1^2 + q_2^2 + q_3^2 = 1 \quad (8)$$

を満たすよう、入力後には

$$\mathbf{q} \leftarrow \frac{\mathbf{q}}{\|\mathbf{q}\|} \quad (9)$$

で正規化が行われる。

四元数から方向余弦行列  $\mathbf{R}$  を得る標準公式は

$$\mathbf{R}(\mathbf{q}) = \begin{pmatrix} 1 - 2(q_2^2 + q_3^2) & 2(q_1q_2 - q_0q_3) & 2(q_1q_3 + q_0q_2) \\ 2(q_1q_2 + q_0q_3) & 1 - 2(q_1^2 + q_3^2) & 2(q_2q_3 - q_0q_1) \\ 2(q_1q_3 - q_0q_2) & 2(q_2q_3 + q_0q_1) & 1 - 2(q_1^2 + q_2^2) \end{pmatrix}. \quad (10)$$

これにより粒子の局所主軸から世界座標への変換が行える。

■角運動量と角速度 角運動量ベクトル  $\mathbf{L}$  は

$$\mathbf{L} = \mathbf{I}\boldsymbol{\omega}, \quad (11)$$

ここで  $\mathbf{I} = \text{diag}(I_{xx}, I_{yy}, I_{zz})$  は主慣性テンソル、 $\boldsymbol{\omega}$  は角速度である。時間積分には四元数の運動方程式

$$\dot{\mathbf{q}} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -\boldsymbol{\omega}^T \\ \boldsymbol{\omega} & -[\boldsymbol{\omega}]_{\times} \end{pmatrix} \mathbf{q} \quad (12)$$

が用いられる ( $[\boldsymbol{\omega}]_{\times}$  は  $\boldsymbol{\omega}$  の外積行列)。

■力学更新 トルク  $\boldsymbol{\tau}$  が与えられるとき、角運動量は

$$\frac{d\mathbf{L}}{dt} = \boldsymbol{\tau}, \quad (13)$$

並進運動についても

$$m \frac{d^2 \mathbf{x}}{dt^2} = \mathbf{F} \quad (14)$$

が成り立つ。コードは (??) - (??) を陽解法で更新したのち、(??) で四元数の正規化を再度行う。

■通信パック 並列計算では粒子データを送受信する必要があり、コードは

$$(\mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{q}, \mathbf{L}, m, \mathbf{I})$$

の一部を配列にシリアライズしてパック/アンパックする。これは数式と言うより線形メモリ操作なので詳細は割愛するが、必ず  $\mathbf{q}$  が 4 要素、形状が 3 要素という固定長になることが通信安定化の鍵である。

■メモリ使用量 粒子数  $N$  とボーナスデータ (エリプソイド特有の形状・姿勢情報) 数  $N^*$  に対し、

$$\text{Memory} = N \left( 3 \text{sizeof}(\text{double}) + 3 \text{sizeof}(\text{double}) + 3 \text{sizeof}(\text{double}) \right) + N^* \text{sizeof}(\text{Bonus}) + \dots \quad (15)$$

となり、コードでは必要に応じて `grow()` や `grow_bonus()` が呼ばれ、定数 `DELTA = 10000` 単位で拡張する。

以上が `atom_vec_ellipsoid.cpp` が内包する主要な数値である。本ファイルはエリプソイド粒子の形状・質量・姿勢を正確に保持しつつ、高速通信と動的メモリ拡張を可能にすることで、大規模 DEM 計算における非球形粒子シミュレーションの基盤を提供している。