スーパークアドリック粒子ベクトルの数式解説（`atom_vec_superquadric.cpp`）

Open DEM Japan

2025 年 6 月 30 日

本ファイルは LIGGGHTS において“スーパークアドリック（superquadric）” 形状をもつ粒子の幾何情報と動力学量を保持・通信する `AtomVec` 派生クラスである．以下ではアルゴリズムの背後にある連続体力学的・解析的概念を数式でまとめる．

スーパークアドリックは半軸 $\boldsymbol{s} = (a, b, c)$ と **ブロッキネス指数** $\boldsymbol{e} = (e_1, e_2)$ $(e_1, e_2 \geq 2)$ により，

$$\left\{ \left(\frac{|x|}{a} \right)^{e_2} + \left(\frac{|y|}{b} \right)^{e_2} \right\}^{\frac{e_1}{e_2}} + \left(\frac{|z|}{c} \right)^{e_1} = 1 \tag{1}$$

で定義される三次元閉曲面である．指数を 2 にすれば楕円体，さらに $a = b = c$ とすれば球となる．

粒子姿勢は単位四元数

$$\boldsymbol{q} = (q_0, q_1, q_2, q_3), \qquad \boldsymbol{q} \cdot \boldsymbol{q} = 1 \tag{2}$$

で管理される．四元数から剛体回転行列 $\mathbf{R}(\boldsymbol{q})$ への写像は

$$\mathbf{R}(\boldsymbol{q}) = \begin{bmatrix} 1 - 2(q_2^2 + q_3^2) & 2(q_1 q_2 - q_0 q_3) & 2(q_1 q_3 + q_0 q_2) \\ 2(q_1 q_2 + q_0 q_3) & 1 - 2(q_1^2 + q_3^2) & 2(q_2 q_3 - q_0 q_1) \\ 2(q_1 q_3 - q_0 q_2) & 2(q_2 q_3 + q_0 q_1) & 1 - 2(q_1^2 + q_2^2) \end{bmatrix} \tag{3}$$

で与えられる．粒子中心 $\boldsymbol{x}$ を原点とする物体座標 $\boldsymbol{r}_b$ は

$$\boldsymbol{r} = \boldsymbol{x} + \mathbf{R}(\boldsymbol{q})\, \boldsymbol{r}_b \tag{4}$$

により計算され，衝突検出・接触力解析に用いられる．

半径可変でない場合（本実装の前提）における **外接球半径** は

$$R_{\mathrm{bnd}} = \max\{a, b, c\} \tag{5}$$

であり，近傍探索セルサイズの最小基準となる．

体積 V と質量 m は密度 ρ を用いて

$$V = 8abc \underbrace{\frac{\Gamma\left(1 + \frac{1}{e_1}\right) \Gamma\left(1 + \frac{1}{e_2}\right)^2}{\Gamma\left(1 + \frac{3}{e_1}\right) \Gamma\left(1 + \frac{2}{e_2}\right)}}_{C(e_1, e_2)}, \tag{6}$$

$$m = \rho V, \tag{7}$$

で与えられる*1．Γ はガンマ関数.

慣性モーメントは対角成分のみが固有値として残り，

$$I_{xx} = \rho \iiint_V (y^2 + z^2)\,\mathrm{d}V, \qquad I_{yy} = \rho \iiint_V (x^2 + z^2)\,\mathrm{d}V, \qquad I_{zz} = \rho \iiint_V (x^2 + y^2)\,\mathrm{d}V, \tag{8}$$

で定義される．超楕円体の閉形式は

$$I_{xx} = \frac{m}{5}\,(b^2 + c^2), \quad I_{yy} = \frac{m}{5}\,(a^2 + c^2), \quad I_{zz} = \frac{m}{5}\,(a^2 + b^2), \tag{9}$$

であり，指数が大きい（角ばる）ほど数値積分値はこれより大きくなる．ソースコード中の `MathExtraLiggghtsNonspherical::inertia_superquadric` は (??) をガウス積分に帰着し，高精度数値積分で (??) を一般化した値を返す.

角運動量 $\boldsymbol{L}$ と角速度 $\boldsymbol{\omega}$ の関係は

$$\boldsymbol{L} = \mathbf{I}\,\boldsymbol{\omega}, \tag{10}$$

で，ここで $\mathbf{I} = \mathrm{diag}(I_{xx}, I_{yy}, I_{zz})$．数値実装では粒子 i ごとに

$$\boldsymbol{L}_i^{(t+\Delta t/2)} = \boldsymbol{L}_i^{(t-\Delta t/2)} + \boldsymbol{\tau}_i^{(t)}\,\Delta t, \tag{11}$$

$$\boldsymbol{\omega}_i^{(t)} = \mathbf{I}_i^{-1}\,\boldsymbol{L}_i^{(t)}, \tag{12}$$

$$\boldsymbol{q}_i^{(t+\Delta t)} = \boldsymbol{q}_i^{(t)} + \frac{\Delta t}{2}\,\boldsymbol{\Omega}\Big(\boldsymbol{\omega}_i^{(t)}\Big)\,\boldsymbol{q}_i^{(t)}, \quad \boldsymbol{\Omega}(\boldsymbol{\omega}) = \begin{bmatrix} 0 & -\boldsymbol{\omega}^\top \\ \boldsymbol{\omega} & -[\boldsymbol{\omega}]_\times \end{bmatrix}, \tag{13}$$

の順で半陰解法を適用し，最後に

$$\boldsymbol{q}_i^{(t+\Delta t)} \leftarrow \frac{\boldsymbol{q}_i^{(t+\Delta t)}}{\left\|\boldsymbol{q}_i^{(t+\Delta t)}\right\|} \tag{14}$$

として単位制約 (??) を保つ.

表面積 A は解析的に

$$A = 4abc \int_0^{\pi/2}\!\!\int_0^{\pi/2} J(\theta,\phi) \left[\cos^{\frac{2}{e_2}}\theta\, \cos^{\frac{2}{e_1}}\phi\, \sin^{\frac{2}{e_2}}\theta\right]^{\frac{e_1}{2}-1} \sin^{\frac{2}{e_1}-1}\phi\, d\theta\, d\phi, \tag{15}$$

$$J(\theta,\phi) = \sqrt{\left(\frac{\partial \boldsymbol{r}}{\partial\theta} \times \frac{\partial \boldsymbol{r}}{\partial\phi}\right)\cdot\left(\frac{\partial \boldsymbol{r}}{\partial\theta} \times \frac{\partial \boldsymbol{r}}{\partial\phi}\right)}, \tag{16}$$

で表されるが，実装では近似式

$$A \approx 4\pi \left[\frac{a^p b^p + a^p c^p + b^p c^p}{3}\right]^{1/p}, \qquad p = 1.6075 - 0.0004(e_1 + e_2 - 4), \tag{17}$$

を用い，高速・十分な精度で評価する.

通信・入出力部（`pack_*`/`unpack_*` 系メソッド）は**位置** $\boldsymbol{x}$，**四元数** $\boldsymbol{q}$ を含む 7 スロットを *forward comm* に，さらに速度・角速度を加えた 13 スロットを *forward comm vel* に割り当てる．並列計算時には式 (??) に基づく周期境界補正 $\boldsymbol{x} \to \boldsymbol{x} + \boldsymbol{\delta r}$ が入るのみで，運動方程式自体は (??)–(??) に従う.

*1 超楕円体（$e_1 = e_2 = 2$）の場合 $C = \frac{\pi}{6}$ となり $V = \frac{4}{3}\pi abc$ を正しく再現する.