三角形剛体粒子モデルの数式解説（atom_vec_tri.cpp）

Open DEM Japan

2025 年 6 月 30 日

離散要素法（DEM）における三角形粒子は、面要素で構成される薄板剛体として扱うことができる。本ファイルでは三角形粒子一枚を剛体として保持し、その並進および回転運動をクォータニオンで更新する実装が示されている。以下では同実装に対応する基礎方程式を教科書的に記述する。

三角形剛体の質量密度を面密度 ρ [kg/m^2] とする。頂点（粒子内部座標）を

$$\boldsymbol{c}_1,\ \boldsymbol{c}_2,\ \boldsymbol{c}_3 \in \mathbb{R}^3$$

とし，粒子の重心（ワールド座標）を $\boldsymbol{x}(t)$，クォータニオンを

$$\boldsymbol{q}(t) = \begin{bmatrix} q_0 \\ q_1 \\ q_2 \\ q_3 \end{bmatrix}, \quad \|\boldsymbol{q}\| = 1 \tag{1}$$

で表す。

■面積と質量　辺ベクトル

$$\boldsymbol{u} = \boldsymbol{c}_2 - \boldsymbol{c}_1, \qquad \boldsymbol{v} = \boldsymbol{c}_3 - \boldsymbol{c}_1 \tag{2}$$

から三角形の面積 S は

$$S = \frac{1}{2}\|\boldsymbol{u} \times \boldsymbol{v}\| \tag{3}$$

で与えられ，質量は

$$m = \rho S \tag{4}$$

となる。data_atom_bonus() では (??) を用いて ρ から m を再計算している。

■剛体運動学　粒子座標系からワールド座標系への変換は回転行列 $\boldsymbol{R}(\boldsymbol{q})$ を用い

$$\boldsymbol{r}_k(t) = \boldsymbol{x}(t) + \boldsymbol{R}(\boldsymbol{q}(t))\,\boldsymbol{c}_k, \qquad k = 1, 2, 3 \tag{5}$$

で与えられる。$\boldsymbol{R}(\boldsymbol{q})$ は

$$\boldsymbol{R}(\boldsymbol{q}) = \begin{pmatrix} q_0^2 + q_1^2 - q_2^2 - q_3^2 & 2(q_1q_2 - q_0q_3) & 2(q_1q_3 + q_0q_2) \\ 2(q_1q_2 + q_0q_3) & q_0^2 - q_1^2 + q_2^2 - q_3^2 & 2(q_2q_3 - q_0q_1) \\ 2(q_1q_3 - q_0q_2) & 2(q_2q_3 + q_0q_1) & q_0^2 - q_1^2 - q_2^2 + q_3^2 \end{pmatrix} \tag{6}$$

である。

■慣性行列　ワールド座標における慣性行列は

$$\boldsymbol{I}(t) = \boldsymbol{R}(\boldsymbol{q}(t))\,\boldsymbol{I}_0\,\boldsymbol{R}(\boldsymbol{q}(t))^{\mathsf{T}} \tag{7}$$

で得られる。ここで $\boldsymbol{I}_0$ は重心を原点とした本体座標系での慣性行列であり

$$I_{0,ij} = \rho \int_S \left(\delta_{ij}\,\|\boldsymbol{\xi}\|^2 - \xi_i \xi_j\right) dS \tag{8}$$

で定義される。`MathExtra::inertia_triangle()` では (??) を解析積分した閉形式解を用い，得られた 3×3 テンソルを Voigt 表記

$$\boldsymbol{\eta} = (I_{xx}, I_{yy}, I_{zz}, I_{yz}, I_{xz}, I_{xy})^{\mathsf{T}} \tag{9}$$

に変換する。Jacobi 回転により対称テンソルを対角化し，主慣性モーメント

$$\boldsymbol{I}_p = \mathrm{diag}(I_1, I_2, I_3) \tag{10}$$

と主軸固有ベクトル

$$[\boldsymbol{e}_x\ \boldsymbol{e}_y\ \boldsymbol{e}_z] \tag{11}$$

を取得する。コード中では `bonus[].inertia` に (??) を，`ex_space`,`ey_space`,`ez_space` に (??) を保持し，必要に応じて右手系を保証するため

$$\boldsymbol{e}_z \leftarrow \begin{cases} \boldsymbol{e}_z, & (\boldsymbol{e}_x \times \boldsymbol{e}_y) \cdot \boldsymbol{e}_z > 0, \\ -\boldsymbol{e}_z, & \text{otherwise} \end{cases} \tag{12}$$

で符号を反転している。

■クォータニオン初期化　本体座標系主軸 $(\boldsymbol{e}_x, \boldsymbol{e}_y, \boldsymbol{e}_z)$ からクォータニオンを得るには

$$q_0 = \tfrac{1}{2}\sqrt{1 + \mathrm{tr}\,\boldsymbol{R}}, \qquad \boldsymbol{q}_v = \frac{1}{4q_0} \begin{bmatrix} R_{32} - R_{23} \\ R_{13} - R_{31} \\ R_{21} - R_{12} \end{bmatrix}, \tag{13}$$

を用いる。`MathExtra::exyz_to_q()` は (??) と等価である。

■動力学方程式　並進運動は

$$m\ddot{\boldsymbol{x}} = \sum \boldsymbol{F}, \tag{14}$$

回転運動は

$$\boldsymbol{I}\,\dot{\boldsymbol{\omega}} + \boldsymbol{\omega} \times (\boldsymbol{I}\boldsymbol{\omega}) = \sum \boldsymbol{M}, \tag{15}$$

で支配される。角速度 $\boldsymbol{\omega}$ とクォータニオンの時間発展は

$$\dot{\boldsymbol{q}} = \tfrac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & -\boldsymbol{\omega}^{\mathsf{T}} \\ \boldsymbol{\omega} & -\boldsymbol{\Omega} \end{bmatrix} \boldsymbol{q}, \quad \boldsymbol{\Omega} = \begin{pmatrix} 0 & -\omega_z & \omega_y \\ \omega_z & 0 & -\omega_x \\ -\omega_y & \omega_x & 0 \end{pmatrix}, \tag{16}$$

である。

■頂点世界座標の取得　接触判定や可視化に必要な頂点座標は (??) を用いて

$$\boldsymbol{r}_k = \boldsymbol{x} + \boldsymbol{R}(\boldsymbol{q})\,\boldsymbol{c}_k, \quad k = 1, 2, 3. \tag{17}$$

■通信バッファとゴースト粒子　分割領域間通信では，実装上

$$\text{座標成分}:(x,y,z),\qquad \text{クォータニオン}:(q_0,q_1,q_2,q_3), \tag{1}$$
$$\text{線形速度}:(v_x,v_y,v_z),\qquad \text{角運動量}:(L_x,L_y,L_z) \tag{18}$$

を順にパックし，ゴースト粒子にも同一順序でアンパックする。`size_forward` や `size_reverse` は (??) の成分数に対応している。

■ボーナス構造体　`bonus[]` は三角形固有の追加物理量を保持する配列であり，

$$\big(\boldsymbol{q},\boldsymbol{c}_1,\boldsymbol{c}_2,\boldsymbol{c}_3,\boldsymbol{I}_p,\mathrm{owner\,id}\big) \tag{19}$$

を 1 要素として持つ。粒子が移動コピーされる際は

$$\texttt{copy\_bonus():}\quad \triangleright\ \text{インデックス参照を更新} \tag{20}$$

して一意性を保つ。

■三角形生成の便宜関数　`set_equilateral()` は正三角形を粒子に割り当て，辺長 a を与えると

$$\boldsymbol{c}_1=\big(-\tfrac{a}{2},-\tfrac{\sqrt{3}}{6}a,0\big),\qquad \boldsymbol{c}_2=\big(\tfrac{a}{2},-\tfrac{\sqrt{3}}{6}a,0\big),\qquad \boldsymbol{c}_3=\big(0,\tfrac{\sqrt{3}}{3}a,0\big), \tag{21}$$

となり，面積 (??) や主慣性モーメント (??) も解析的に与えられる。

■メモリ使用量　粒子ごとの主要配列の総メモリは

$$\mathcal{M}=n_{\max}\sum_i b_i+n_{\max}^{\mathrm{bonus}}\,b_{\mathrm{bonus}}, \tag{22}$$

で算出され，`memory_usage()` は (??) を返す。ここで b_i は各配列 1 要素あたりのバイト数，b_{bonus} は (??) 1 要素分のバイト数である。