

角運動量計算の数式解説 (compute_angmom.cpp)

Open DEM Japan

2025年6月30日

粒子 i の慣性モーメントテンソルを $\mathbf{I}_i \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$, 角速度ベクトルを $\boldsymbol{\omega}_i \in \mathbb{R}^3$ とすると, その角運動量は

$$\mathbf{L}_i = \mathbf{I}_i \boldsymbol{\omega}_i. \quad (1)$$

本ルーチンが返すスカラー量は, ユーザが指定する粒子集合 G に属する各粒子の角運動量ノルムを合計した値である。まず粒子 i について

$$l_i = \|\mathbf{L}_i\|_2 = \sqrt{L_{ix}^2 + L_{iy}^2 + L_{iz}^2}, \quad (2)$$

を計算する。

並列計算では, 各 MPI ランク p が所有する局所粒子集合を P_p とおく。 $G_p = G \cap P_p$ に対して

$$S_p = \sum_{i \in G_p} l_i, \quad (3)$$

を求め, MPI_Allreduce により全ランクで総和を取り

$$S = \sum_{p=1}^P S_p = \sum_{i \in G} l_i, \quad (4)$$

を得る。

最終的に返されるスカラーは式 (??) の S であり, これは選択粒子群の総角運動量ノルムに相当する。