

質量中心計算の数式解説 (compute_com.cpp)

Open DEM Japan

2025年6月30日

離散要素法 (DEM) では、粒子系を構成する各粒子 i の位置ベクトルを $\mathbf{r}_i = (x_i, y_i, z_i)^T$, 質量を m_i とする。粒子系からある **グループ** G を取り出し、その質量中心 (center of mass; COM) を求める。compute_com.cpp は、以下に示す古典力学的定義をそのまま計算しているに過ぎない。

まず、グループ G に属する粒子の総質量 M は

$$M = \sum_{i \in G} m_i, \quad (1)$$

で与えられる。次に、質量中心 $\mathbf{R}_{\text{CM}} = (X_{\text{CM}}, Y_{\text{CM}}, Z_{\text{CM}})^T$ は

$$\mathbf{R}_{\text{CM}} = \frac{1}{M} \sum_{i \in G} m_i \mathbf{r}_i, \quad (2)$$

で定義される。すなわち、各成分は

$$X_{\text{CM}} = \frac{1}{M} \sum_{i \in G} m_i x_i, \quad (3)$$

$$Y_{\text{CM}} = \frac{1}{M} \sum_{i \in G} m_i y_i, \quad (4)$$

$$Z_{\text{CM}} = \frac{1}{M} \sum_{i \in G} m_i z_i. \quad (5)$$

ComputeCOM::init() では式 (??) を一度だけ評価して M を保存し、ComputeCOM::compute_vector() ではステップごとに式 (??) を計算して \mathbf{R}_{CM} を vector[0..2] に格納する。したがって、本クラスは離散質点系の質量中心を (??) の定義そのままに返す軽量の演算器である。