

回転エネルギー総和計算の数式解説 (compute_erotate.cpp)

Open DEM Japan

2025年6月30日

本節では、DEM シミュレーションにおける粒子の **回転運動エネルギー** を総和する手順を、教科書的に定式化する。対象となる粒子形状は

- 完全球 (sphere)
- 剛体マルチスフィア集合 (multisphere)
- スーパークワドラティック形状 (superquadric)

であり、求める総エネルギーは以下の加法的関係で与えられる。

$$E_{\text{rot}} = \sum_{i \in S} E_i^{\text{sphere}} + \sum_{k \in M} E_k^{\text{multi}} + \sum_{s \in Q} E_s^{\text{sq}} \quad (1)$$

ここで S , M , Q はそれぞれ球, マルチスフィア, スーパークワドラティック粒子の集合を表す。各粒子 (または剛体集合) の回転エネルギーは剛体力学の基礎式

$$E = \frac{1}{2} \boldsymbol{\omega}^T \mathbf{I} \boldsymbol{\omega} \quad (2)$$

に従う。 $\boldsymbol{\omega}$ は角速度ベクトル, \mathbf{I} は体中心慣性テンソルである。以下、各形状ごとに \mathbf{I} の具体形を示す。

■ **球粒子** 半径 R_i , 質量 m_i の等質球については慣性テンソルが

$$\mathbf{I}_i = \frac{2}{5} m_i R_i^2 \mathbf{I}_3 \quad (3)$$

と各主軸で等方的であるため、式 (??) を (??) へ代入すると

$$E_i^{\text{sphere}} = \frac{1}{5} m_i R_i^2 \|\boldsymbol{\omega}_i\|^2 \quad (4)$$

が得られる。

■ **マルチスフィア剛体集合** 剛体集合 k は複数球 ($j = 1, \dots, N_k$) から構成される。集合重心を原点としたとき、各サブ球の位置ベクトルを \mathbf{r}_{kj} , 半径を R_{kj} , 質量を m_{kj} とする。並進に対する平行軸の定理より

$$\mathbf{I}_k = \sum_{j=1}^{N_k} \left[\frac{2}{5} m_{kj} R_{kj}^2 \mathbf{I}_3 + m_{kj} (\|\mathbf{r}_{kj}\|^2 \mathbf{I}_3 - \mathbf{r}_{kj} \mathbf{r}_{kj}^T) \right] \quad (5)$$

これを用いれば集合 k の回転エネルギーは

$$E_k^{\text{multi}} = \frac{1}{2} \boldsymbol{\Omega}_k^T \mathbf{I}_k \boldsymbol{\Omega}_k \quad (6)$$

となる。 $\boldsymbol{\Omega}_k$ は集合全体の角速度である。

■**スーパークワドラティック粒子** 一般スーパークワドラティック体（半長軸 a, b, c , 指数 n_1, n_2 ）に対する慣性テンソルは、対称性を考慮した体積積分

$$\mathbf{I}_s = \rho_s \iiint_{V_s} (\|\mathbf{r}\|^2 \mathbf{I}_3 - \mathbf{r} \mathbf{r}^T) dV \quad (7)$$

で得られる（ ρ_s は密度）。指数 n_1, n_2 の値によって閉形式が変化するが、数値積分または既知の解析公式により \mathbf{I}_s が算定できれば、式 (??) と同一形で

$$E_s^{\text{sq}} = \frac{1}{2} \boldsymbol{\omega}_s^T \mathbf{I}_s \boldsymbol{\omega}_s \quad (8)$$

が成り立つ。

■**総和演算の意義** 実装上は、形状ごとに専用の「`compute_erotate/shape`」ルーチンが存在し、式 (??), (??), (??) を通じて求めたスカラー量を返す。 `compute_erotate.cpp` はそれらの子計算オブジェクトを自動生成・呼び出し、最終的に式 (??) に相当する総エネルギーを得る。したがって、粒子群に複数形状が混在していてもユーザは単一コマンドで回転エネルギーを取得できる。