”非球形粒子の回転エネルギー” の数式解説 (“compute_erotate_asphere.cpp”)

Open DEM Japan

2025 年 6 月 30 日

本節では，離散要素法（DEM）コードにおける `compute_erotate_asphere` アルゴリズムの物理量——とくに非球形粒子の回転運動エネルギー——を式で整理する．粒子集合 $\mathcal{G}$ の各粒子 j について角運動量 $\boldsymbol{L}_j$ が与えられているとする．粒子が持つ幾何学形状に応じて慣性モーメントを決定し，それを用いて回転エネルギーを評価する．シミュレーション内部単位からエネルギー単位への変換係数を κ_{mvv2e} とすると，全回転エネルギーは

$$E_{\text{rot}} = \frac{1}{2}\,\kappa_{\text{mvv2e}} \sum_{j\in\mathcal{G}} \boldsymbol{\omega}_j^{\mathsf{T}} \boldsymbol{I}_j \boldsymbol{\omega}_j, \tag{1}$$

ここで $\boldsymbol{I}_j = \operatorname{diag}(I_{1j}, I_{2j}, I_{3j})$ は粒子 j の主慣性モーメント対角行列，$\boldsymbol{\omega}_j$ は粒子の剛体回転角速度（粒子固有座標系）である．以下では $\boldsymbol{I}_j$ と $\boldsymbol{\omega}_j$ の求め方を形状別に示す．

■(i) 三軸楕円体粒子　半径（半径長）を a_j, b_j, c_j，質量を m_j とすると，対角主慣性モーメントは

$$I_{1j} = \frac{m_j}{5}\left(b_j^2 + c_j^2\right), \qquad I_{2j} = \frac{m_j}{5}\left(a_j^2 + c_j^2\right), \qquad I_{3j} = \frac{m_j}{5}\left(a_j^2 + b_j^2\right). \tag{2}$$

粒子の姿勢を示す四元数 $\boldsymbol{q}_j$ から回転行列 $\boldsymbol{R}_j(\boldsymbol{q}_j)$ を構成し，ラボ座標系の角運動量 $\boldsymbol{L}_j$ を粒子固有座標系に写像して

$$\boldsymbol{L}_j^{(\text{body})} = \boldsymbol{R}_j^{\mathsf{T}}\,\boldsymbol{L}_j, \tag{3}$$

成分毎に

$$\omega_{ij} = \frac{L_{ij}^{(\text{body})}}{I_{ij}} \qquad (i = 1, 2, 3) \tag{4}$$

を得る．式 (**??**) に代入することで楕円体の寄与を計算する．

■(ii) 細長線状粒子（棒）　長さ ℓ_j，質量 m_j の一様細棒について，中心を通る任意の軸に対する慣性モーメントは

$$I_j = \frac{m_j \ell_j^2}{12}. \tag{5}$$

ここでは棒の主慣性が等方と仮定されるため $\boldsymbol{I}_j = I_j \boldsymbol{I}_3$（$\boldsymbol{I}_3$ は 3×3 単位行列）と置き，ラボ系での角速度 $\boldsymbol{\omega}_j$ をそのまま用いて

$$E_j^{(\text{rod})} = \frac{1}{2}\,I_j\,\|\boldsymbol{\omega}_j\|^2. \tag{6}$$

■(iii) **多面体（三角形メッシュ）粒子**　ポリゴンメッシュにより近似された剛体の主慣性モーメントは事前計算され

$$\boldsymbol{I}_j = \mathrm{diag}\big(I_{1j}, I_{2j}, I_{3j}\big), \tag{7}$$

四元数 $\boldsymbol{q}_j$ により (**??**) と同様に $\boldsymbol{L}_j^{(\mathrm{body})}$ を求め，式 (**??**) から $\boldsymbol{\omega}_j$ を得る．そのうえで

$$E_j^{(\mathrm{poly})} = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{3} I_{ij}\,\omega_{ij}^2. \tag{8}$$

■(iv) **総和**　各粒子の形状に応じて (**??**)–(**??**) で得られたエネルギー密度を加算し，最終的に単位変換係数を掛けたものが式 (**??**) に示す E_{rot} である．ここに含まれる κ_{mvv2e} は質量・速度の次元を持つ量 mv^2 からエネルギー単位へ変換する定数である．