

多球体回転エネルギーの数式解説 (compute_erotate_multisphere.cpp)

Open DEM Japan

2025年6月30日

剛体として拘束された N 個の球から成る「マルチスフィア粒子」を考える。 i 番目の球の質量を m_i , 重心位置ベクトルを \mathbf{R}_i , 半径を a_i とし, 全体系の質量を

$$M = \sum_{i=1}^N m_i \quad (1)$$

と定義する。マルチスフィア粒子の重心 (Center of Mass, COM) 位置 \mathbf{R}_c は

$$\sum_{i=1}^N m_i \mathbf{R}_i = M \mathbf{R}_c. \quad (2)$$

各球の COM からの相対位置

$$\mathbf{r}_i = \mathbf{R}_i - \mathbf{R}_c \quad (3)$$

を導入する。剛体回転角速度 $\boldsymbol{\omega}$ を全球で共有するとき, i 番目の球の速度は

$$\dot{\mathbf{R}}_i = \dot{\mathbf{R}}_c + \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}_i. \quad (4)$$

回転運動エネルギーのみを評価したいので, COM 並進による寄与 $M\dot{\mathbf{R}}_c^2$ はここでは扱わず, $\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}_i$ 由来の項に注目する。

まず, 各球自身の固有慣性モーメント (球殻の厚みを無視し一様質量分布と仮定)

$$I_i^{(0)} = \frac{2}{5} m_i a_i^2 \quad (5)$$

を持つ。球の主慣性テンソルは対角形で等方なので, 空間座標への回転を意識せずスカラーで扱える。COM を通る平行軸への移動を平行軸の定理で補正すると, i 番目の球が COM から距離 $\|\mathbf{r}_i\|$ だけ離れていることに対応して

$$\mathbf{I}_i = I_i^{(0)} \mathbf{I}_3 + m_i (\|\mathbf{r}_i\|^2 \mathbf{I}_3 - \mathbf{r}_i \mathbf{r}_i^T), \quad (6)$$

ただし \mathbf{I}_3 は 3×3 単位行列である。これを全球について総和したものがマルチスフィア粒子全体の慣性テンソル

$$\mathbf{I} = \sum_{i=1}^N \mathbf{I}_i \quad (7)$$

となる。

剛体の回転運動エネルギーは基本式

$$E_{\text{rot}} = \frac{1}{2} \boldsymbol{\omega}^T \mathbf{I} \boldsymbol{\omega}. \quad (8)$$

式 (??) を代入し展開すると

$$\begin{aligned} E_{\text{rot}} &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \boldsymbol{\omega}^T \left[I_i^{(0)} \mathbf{I}_3 + m_i (\|\mathbf{r}_i\|^2 \mathbf{I}_3 - \mathbf{r}_i \mathbf{r}_i^T) \right] \boldsymbol{\omega} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \left[I_i^{(0)} \|\boldsymbol{\omega}\|^2 + m_i \|\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}_i\|^2 \right]. \end{aligned} \quad (9)$$

右辺第 1 項は各球自転の寄与, 第 2 項は COM からの偏位に伴う公転的回転エネルギーである。マルチスフィアを LIGGGHTS で剛体として扱う場合, `fix_multisphere` により $\boldsymbol{\omega}$ と \mathbf{I} が更新・保存され, `compute_erotate_multisphere` は単に式 (??) を数値計算しスカラー値を返す実装になっている。

結果をまとめると, マルチスフィア粒子の回転運動エネルギーは

$$E_{\text{rot}} = \frac{1}{2} \boldsymbol{\omega}^T \left[\sum_{i=1}^N (I_i^{(0)} \mathbf{I}_3 + m_i (\|\mathbf{r}_i\|^2 \mathbf{I}_3 - \mathbf{r}_i \mathbf{r}_i^T)) \right] \boldsymbol{\omega} \quad (10)$$

で与えられ, これはコード中の `fix_multisphere::extract_rke()` が返す値と一致する。よって `compute_erotate_multisphere.cpp` は現在のタイムステップで式 (??) を評価し, スカラーとして LAMMPS に報告する役割を果たしている。