

球状粒子の回転エネルギー計算 (compute_erotate_sphere.cpp) の数式解説

Open DEM Japan

2025年6月30日

数値粒子法において剛体球の回転運動は、角速度ベクトル ω_i とトルク τ_i を用いて更新される。まず、各球の質量 m_i と半径 r_i から得られる慣性モーメントは

$$I_i = \frac{2}{5} m_i r_i^2 \quad (1)$$

である。これは一様密度を仮定した実体球の古典的結果である。

速度 - ベルレ型積分では、運動量半ステップを挟んで角速度を

$$\omega_i^{n+\frac{1}{2}} = \omega_i^n + \frac{\Delta t}{2I_i} \tau_i^n \quad (2)$$

と予測し (サブルーチンでは halfstep オプションの有無で切り替えられる), この $\omega_i^{n+\frac{1}{2}}$ または元の ω_i^n を用いて回転エネルギーを評価する。

球 i の回転エネルギーは

$$E_i^{\text{rot}} = \frac{1}{2} I_i \|\omega_i^*\|^2, \quad \omega_i^* = \begin{cases} \omega_i^{n+\frac{1}{2}}, & \text{半ステップ評価} \\ \omega_i^n, & \text{フルステップ評価} \end{cases} \quad (3)$$

である (コード中では ω_i^* を omega0, omega1, omega2 に展開している)。

シミュレーション中で選択された粒子集合 \mathcal{G} (groupbit で管理) について総和を取ると、全系の回転エネルギーは

$$E_{\text{rot}} = \sum_{i \in \mathcal{G}} \frac{1}{2} I_i \|\omega_i^*\|^2 \quad (4)$$

となる。

コードでは単位系の整合を図るため、質量 - 速度二乗からエネルギーへの換算係数

mvv2e

を用い、さらに式 (??) の前因子 $\frac{2}{5} = 0.4$ と式 (??) の $\frac{1}{2}$ をまとめて

$$\frac{1}{2} \times \frac{2}{5} = \frac{1}{5}$$

を前計算して

$$E_{\text{rot}}^{(\text{LAMMPS})} = \frac{1}{5} \text{mvv2e} \sum_{i \in \mathcal{G}} m_i r_i^2 \|\omega_i^*\|^2 \quad (5)$$

を直接評価している. `pfactor = 0.5 * mvv2e * 0.4` がこの係数に相当し, ループ内で $\|\omega_i^*\|^2 r_i^2 m_i$ を積算した後に乗算することで, 式 (??) と同値のエネルギーが得られる.

以上が `compute_erotate_sphere.cpp` に実装された球状粒子の回転エネルギー評価アルゴリズムの数式的基盤である.