

「球形粒子の回転運動エネルギー」の数式解説 (compute_erotate_sphere_atom.cpp)

Open DEM Japan

2025年6月30日

本プログラムは、球形粒子それぞれについて剛体回転に伴う運動エネルギーを評価し、粒子毎の値として出力する。ここでは離散要素法 (DEM) において一般的に用いられる球形剛体の力学を基礎とし、計算式を導出する。

i 番目の球形粒子の

- 質量を m_i ,
- 半径を r_i ,
- 角速度ベクトルを $\boldsymbol{\omega}_i = (\omega_{ix}, \omega_{iy}, \omega_{iz})^T$,

とする。球は質量中心まわりに一様に分布していると仮定し、その慣性モーメントは

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

で与えられる。剛体の回転運動エネルギーは

$$E_i^{(\text{rot})} = \frac{1}{2} I_i \|\boldsymbol{\omega}_i\|^2, \quad \|\boldsymbol{\omega}_i\|^2 = \omega_{ix}^2 + \omega_{iy}^2 + \omega_{iz}^2. \quad (2)$$

式(1)を式(2)に代入すると

$$E_i^{(\text{rot})} = \frac{1}{2} \left(\frac{2}{5} m_i r_i^2 \right) \|\boldsymbol{\omega}_i\|^2 = \frac{1}{5} m_i r_i^2 \|\boldsymbol{\omega}_i\|^2. \quad (3)$$

実装では、単位系 (例: `units si` あるいは `units cgs`) に依存しないよう、質量と角速度の積 $m_i \|\boldsymbol{\omega}_i\|^2$ をエネルギーへ換算する係数

$$\varepsilon_{\text{conv}} = \frac{1}{2} (\text{mrvv2e}) \times \left(\frac{2}{5} \right) = \frac{1}{5} \text{mrvv2e}, \quad (4)$$

を導入し、最終的に

$$E_i^{(\text{code})} = \varepsilon_{\text{conv}} r_i^2 \|\boldsymbol{\omega}_i\|^2 m_i, \quad (5)$$

として内部エネルギー単位へ変換して格納する。

粒子が計算対象群に含まれない場合や、多球 (*multisphere*) モデルによって単一剛体に束縛されている場合は、当該粒子の回転エネルギー寄与は

$$E_i^{(\text{rot})} = 0$$

とし、重複計算を避ける。以上が本プログラムで評価される球形粒子の回転運動エネルギーの理論的背景である。