

”超楕円体粒子の回転運動エネルギー”の数式解説 (“compute_erotate_superquadric.cpp”)

Open DEM Japan

2025年6月30日

離散要素法 (DEM) において、非球形粒子を超楕円体 (スーパークワドリック) で近似するとき、各粒子の回転運動エネルギーは、古典力学の剛体回転理論に基づき次式で与えられる。粒子 i の角速度ベクトルを $\boldsymbol{\omega}_i$ [rad/s]、その角運動量を \mathbf{L}_i [kg m²/s] とすると

$$E_{\text{rot}}^{(i)} = \frac{1}{2} \boldsymbol{\omega}_i \cdot \mathbf{L}_i \quad (1)$$

である。ここで

$$\mathbf{L}_i = \mathbf{I}_i \boldsymbol{\omega}_i \quad (2)$$

は粒子の慣性テンソル \mathbf{I}_i [kg m²] と角速度の積で定義される。

シミュレーションでは多数の粒子が存在するため、あるグループ \mathcal{G} に属する全粒子について (1) を総和し、系の総回転エネルギーを

$$E_{\text{rot}} = \sum_{i \in \mathcal{G}} E_{\text{rot}}^{(i)} = \frac{1}{2} \sum_{i \in \mathcal{G}} \boldsymbol{\omega}_i \cdot \mathbf{L}_i \quad (3)$$

と定義する。

単位系と変換係数

LAMMPS/LIGGGHTS の内部では、運動エネルギーを「質量 × 速度²」の次元で積算した後、エネルギー単位 (例えば SI なら J) へ変換する。この変換を担う定数を

$$\text{mvv2e} [\text{J s}^2 / \text{m}^2 \text{ kg}^{-1}]$$

とすると、コードでは

$$\text{pfactor} = \frac{1}{2} \text{mvv2e}$$

が定義され、(3) の右辺に掛けることで

$$E_{\text{rot}}^{(\text{sim})} = \text{pfactor} \sum_{i \in \mathcal{G}} \boldsymbol{\omega}_i \cdot \mathbf{L}_i \quad (4)$$

を評価している。すなわちプログラムのアルゴリズムは

1. 各プロセス内の局所粒子 i について $\boldsymbol{\omega}_i \cdot \mathbf{L}_i$ を加算し、
2. 並列計算環境下で MPI_ALLREDUCE を用いて全プロセスの和を取り、

3. その結果に $\text{pfactor} = \frac{1}{2}mvv2e$ を掛ける

ことで (3) 相当のエネルギーを計算している.

まとめ

超楕円体粒子の回転運動エネルギーは (1) - (3) によって与えられ, コード “`compute_erotate_superquadric.cpp`” はこれを並列環境で高効率に評価する実装である. 角運動量はあらかじめ計算済みであり, 変換係数 $mvv2e$ を介してシミュレーション単位からエネルギー単位へ正しく換算される.