

# 分子慣性モーメント計算の数式解説 (compute\_inertia\_molecule.cpp)

Open DEM Japan

2025年6月30日

本プログラムは、離散要素法 (DEM) シミュレーションにおいて同一分子 ID を共有する粒子集合を「分子」とみなし、各分子について

- 総質量  $M_m$
- 質量重心  $\mathbf{r}_m$
- 慣性テンソル  $\mathbf{I}_m$

を並列計算によって求める。以下にその数式を示す。

■分子  $m$  の総質量  $N_m$  個の粒子から成る分子  $m$  について、粒子  $i$  の質量を  $m_i$  とすると

$$M_m = \sum_{i=1}^{N_m} m_i \quad (1)$$

■質量重心 粒子座標  $\mathbf{x}_i$  は周期境界を跨いでいるため、プログラム内部では `unmap()` により「アンラップ座標」 $\tilde{\mathbf{x}}_i$  が用いられる。これを用いた質量重心は

$$\mathbf{r}_m = \frac{1}{M_m} \sum_{i=1}^{N_m} m_i \tilde{\mathbf{x}}_i \quad (2)$$

■相対位置ベクトル

$$\boldsymbol{\rho}_i = \tilde{\mathbf{x}}_i - \mathbf{r}_m \quad (3)$$

■慣性テンソルの各成分

$$I_{xx}^{(m)} = \sum_{i=1}^{N_m} m_i (\rho_{i,y}^2 + \rho_{i,z}^2), \quad I_{xy}^{(m)} = - \sum_{i=1}^{N_m} m_i \rho_{i,x} \rho_{i,y}, \quad (4a,d)$$

$$I_{yy}^{(m)} = \sum_{i=1}^{N_m} m_i (\rho_{i,x}^2 + \rho_{i,z}^2), \quad I_{yz}^{(m)} = - \sum_{i=1}^{N_m} m_i \rho_{i,y} \rho_{i,z}, \quad (4b,e)$$

$$I_{zz}^{(m)} = \sum_{i=1}^{N_m} m_i (\rho_{i,x}^2 + \rho_{i,y}^2), \quad I_{xz}^{(m)} = - \sum_{i=1}^{N_m} m_i \rho_{i,x} \rho_{i,z}. \quad (4c,f)$$

■慣性テンソルの行列表現 これら 6 成分を用いて

$$\mathbf{I}_m = \begin{pmatrix} I_{xx}^{(m)} & I_{xy}^{(m)} & I_{xz}^{(m)} \\ I_{xy}^{(m)} & I_{yy}^{(m)} & I_{yz}^{(m)} \\ I_{xz}^{(m)} & I_{yz}^{(m)} & I_{zz}^{(m)} \end{pmatrix} \quad (5)$$

が得られる。対角成分は回転軸に垂直な二方向距離の二乗和に比例し、非対角成分は負の符号を伴う積和となることに注意されたい。

■並列集計 MPI により

`MPI_Allreduce`

を用いて各プロセスが計算した部分和を集約し、総質量  $M_m$ 、重心  $\mathbf{r}_m$ 、および慣性テンソル  $\mathbf{I}_m$  が得られる。このときプログラムは 6 成分のみを保持し、 $\mathbf{I}_m$  全体を `array` に格納して他のモジュールへ提供する。

以上が `compute_inertia_molecule.cpp` に実装された分子慣性モーメント計算アルゴリズムの数式的背景である。