

# 「運動エネルギー」の数式解説 (compute\_ke.cpp)

Open DEM Japan

2025年6月30日

離散要素法 (DEM) の並列シミュレータにおける総運動エネルギーは、計算格子内に存在する粒子集合  $\mathcal{G}$  の並進運動に由来する部分と、多球剛体 (マルチスフィア) に割り当てられた剛体運動に由来する部分を合算して評価される。

まず、各粒子  $i \in \mathcal{G}$  について現在時刻  $t^n$  における速度を  $\mathbf{v}_i^n$ 、質量を  $m_i$ 、外力を  $\mathbf{f}_i^n$  とする。halfstep オプションが有効な場合は、速度を半ステップ

$$\mathbf{v}_i^{n+\frac{1}{2}} = \mathbf{v}_i^n + \frac{\Delta t}{2m_i} \mathbf{f}_i^n \quad (1)$$

へ更新したうえで計算する。オプションが無効な場合は  $\mathbf{v}_i^{n+\frac{1}{2}} \equiv \mathbf{v}_i^n$  と同一視する。

次に、格子内の粒子並進運動による運動エネルギーは

$$K_{\text{trans}} = \frac{1}{2} \sum_{i \in \mathcal{G}} m_i \left\| \mathbf{v}_i^{n+\frac{1}{2}} \right\|^2 \quad (2)$$

で与えられる。

一方、多球剛体に対しては、剛体を構成する粒子の内部拘束を fix で管理し、その fix から抽出される剛体運動エネルギー

$$K_{\text{rigid}} = \sum_{k \in \mathcal{R}} E_k^{\text{rigid}} \quad (3)$$

を加算する ( $\mathcal{R}$  は剛体集合)。ここで  $E_k^{\text{rigid}}$  は剛体  $k$  の並進+回転を含む全運動エネルギーである。

これらを合算し、単位系変換係数 mvv2e に

$$p = \frac{1}{2} \text{mvv2e} \quad (4)$$

を掛け合わせたものが、MPI 全並列領域で縮約された総運動エネルギーとなる：

$$K_{\text{total}} = p(2K_{\text{trans}}) + K_{\text{rigid}} = \text{mvv2e} K_{\text{trans}} + K_{\text{rigid}}. \quad (5)$$

式 (??) は ComputeKE::compute\_scalar() 内で MPI\_Allreduce によってプロセス間で合計され、シミュレーションの時刻  $t^n$  に対応する系全体の運動エネルギーとして出力される。