

剛体系の運動エネルギー計算の数式解説 (“compute_ke_rigid.cpp”)

Open DEM Japan

2025年6月30日

LAMMPS における `compute_ke_rigid` は、`fix_rigid` (あるいは `fix_rigid_small`) が管理する剛体クラスタに対して、時刻 t における総運動エネルギー

$$K(t) = \sum_{i=1}^{N_b} K_i(t) \quad (1)$$

を計算し、その値をスカラー量として返す。ここで N_b は剛体クラスタ (以下「剛体」と呼ぶ) の総数であり、各剛体 i について

$$K_i = T_i + R_i \quad (2)$$

と定義する。右辺第 1 項 T_i は剛体重心の並進運動エネルギー、第 2 項 R_i は剛体固有軸まわりの回転運動エネルギーである。以下ではそれぞれの式を導出する。

■並進運動エネルギー 剛体 i の質量を M_i 、重心速度を $\mathbf{V}_i = \dot{\mathbf{R}}_i$ とすると、並進運動エネルギーは

$$T_i = \frac{1}{2} M_i \|\mathbf{V}_i\|^2 \quad (3)$$

で与えられる。

■回転運動エネルギー 剛体の角速度を $\boldsymbol{\omega}_i$ 、慣性モーメントテンソル (空間座標系表現) を \mathbf{I}_i とすると、

$$R_i = \frac{1}{2} \boldsymbol{\omega}_i^\top \mathbf{I}_i \boldsymbol{\omega}_i \quad (4)$$

である。

■慣性モーメントテンソルの空間座標系表現 `fix_rigid` 内部では、ボディ固定座標系における慣性テンソル $\mathbf{I}_{0,i}$ とクォータニオン \mathbf{q}_i (あるいは回転行列 \mathbf{Q}_i) が保持されている。空間座標系に変換するときは

$$\mathbf{I}_i = \mathbf{Q}_i \mathbf{I}_{0,i} \mathbf{Q}_i^\top \quad (5)$$

で得られる。ここで \mathbf{Q}_i は \mathbf{q}_i から構成される正規直交行列である。

■総運動エネルギー 式 (3) と (4) を (2) に代入し、さらに (5) を用いれば

$$K(t) = \sum_{i=1}^{N_b} \left[\frac{1}{2} M_i \|\mathbf{V}_i\|^2 + \frac{1}{2} \boldsymbol{\omega}_i^\top \mathbf{Q}_i \mathbf{I}_{0,i} \mathbf{Q}_i^\top \boldsymbol{\omega}_i \right] \quad (6)$$

となる。compute_ke_rigid.cpp は fix_rigid (もしくは fix_rigid_small) のメンバ関数 extract_ke() を呼び出し、式 (??) を評価した結果をそのまま返す実装となっている。

以上が compute_ke_rigid.cpp に対応する数式的背景である。