磁石振り子シミュレータ
PEM

牧野真人

平成 32 年 9 月 12 日

目 次

第1章　はじめに

シミュレーションエンジン PEM についての説明をする。PEM は力学に関してのシミュレーションを行う。力学のシミュレーションであるから、力 F を受ける質量 m の物体が加速度 a で運動するニュートンの運動方程式

$$ma = F \tag{1.1}$$

が基礎になる。しかし、PEM では、回転の運動方程式を中心に解く。コマ、振り子のように、一様重力場中で一固定点を持った剛体の回転の問題を解く。特に、剛体は、磁石を持つとして、磁気ダイポールをもっており、外磁場やダイポール同士で相互作用する。

剛体の運動は、オイラー角あるいは、四元数を用いて計算されることが多いが PEM では、粒子固定の直交座標系 $\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \boldsymbol{u}_3$ を計算していく。厳密解を解くなどの場合は、オイラー角は有用であるし、四元数は、分子動力学シミュレーションのような多数の多体問題を解く場合は効率が高い。一方で、私の感覚であるが、粒子固定の直交座標系で計算する場合は、分かりやすい。そのため、ここでは、粒子固定の直交座標系を用いる。

さらに、他に見られない特徴として回転微分演算子

$$\boldsymbol{\mathcal{R}} = \sum_{i=1,2,3} \boldsymbol{u}_i \times \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{u}_i} \tag{1.2}$$

を用いる。

第2章　記号など

第3章　理論

3.1　基礎方程式

実験室が基底ベクトル $\boldsymbol{e}_x, \boldsymbol{e}_y, \boldsymbol{e}_z$ で記述される空間とする。ここで、$\boldsymbol{e}_i \cdot \boldsymbol{e}_j = \delta_{ij}, (i, j = x, y, z)$ である。右手系として $\boldsymbol{e}_i \times \boldsymbol{e}_j = e_{ijk}\boldsymbol{e}_k$ である。ある一体の剛体を考える。この剛体は剛体に固定された基底ベクトル $\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \boldsymbol{u}_3$ で剛体の方向を定義する。この場合も $\boldsymbol{u}_i \cdot \boldsymbol{u}_j = \delta_{ij}, (i, j = 1, 2, 3)$ である。トルク $\boldsymbol{T}$ が与えられた際、角運動量 $\boldsymbol{L}$ の時間微分で与えられる。

$$\frac{d\boldsymbol{L}}{dt} = \boldsymbol{T} \tag{3.1}$$

また、剛体の角速度 $\boldsymbol{\omega}$ は、剛体の慣性モーメントテンソル $\boldsymbol{I}$ として

$$\boldsymbol{I} \cdot \boldsymbol{\omega} = \boldsymbol{L} \tag{3.2}$$

となる。慣性モーメントテンソルは、時間に応じて変化する。しかし、慣性モーメントテンソルはあらかじめ、粒子に固定した座標系で計算するほうが便利である。そのため、慣性モーメントテンソルは、次のようにする。

$$\boldsymbol{I}(t) = \sum_{i,j=1,2,3} I_{ij}\boldsymbol{u}_i(t)\boldsymbol{u}_j(t) \tag{3.3}$$

I_{ij} は時間に依存しない定数である。粒子固定の座標系で最初に求めておけばよい。一方で、行列 I_{ij} の逆行列を $(I^{-1})_{ij}$ とすると角速度は

$$\boldsymbol{\omega} = \sum_{i,j=1,2,3} (I^{-1})_{ij}\boldsymbol{L} \cdot \boldsymbol{u}_i\boldsymbol{u}_j \tag{3.4}$$

となる。これから、

$$\frac{d\boldsymbol{u}_i}{dt} = \boldsymbol{\omega} \times \boldsymbol{u}_i \tag{3.5}$$

となる。

トルク $\boldsymbol{T}$ が与えられると式 (3.1) より角運動量 $\boldsymbol{L}$ の時間発展を計算する。次にあらかじめ計算していた慣性モーメントテンソル I_{ij} をもとに、式 (3.4) より角速度 $\boldsymbol{\omega}$ を計算する。そして、式 (3.5) より、剛体に固定された基底ベクトル $\boldsymbol{u}_i$ を計算することで粒子の向きが計算されていく。このようにして、剛体の運動を計算していくのが、本シミュレータである。

3.2 慣性モーメントテンソル

慣性モーメントテンソルは、

$$\boldsymbol{I} = \rho \int_V \left(r^2 \boldsymbol{\delta} - \boldsymbol{r}\boldsymbol{r} \right) dV \tag{3.6}$$

第 4 章　シミュレーション方法

第5章