磁石振り子シミュレータ PEM

牧野真人

2020年9月19日

目 次

第1章	はじめに	5
第2章	記号など	7
第3章	理論	9
3.1	基礎方程式	9
3.2	慣性モーメントテンソル	10
	3.2.1 一般の式	10
	3.2.2 解析解	11
	3.2.3 表面積分での評価	12
3.3	トルク	13
	3.3.1 重力	13
	3.3.2 外場と磁気ダイポールによるトルク	14
	3.3.3 磁気ダイポール間のトルク	14
第4章	シミュレーション方法	17
4.1	慣性モーメント	17
4.2	時間積分	18
	4.2.1 オイラー法	18
	4.2.2 4 次のルンゲクッタ法	18
第5章	操作例	2 1
第6章	UDF 説明	23
第7章	action 説明	25
第8章	Python 説明	27

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 u_1,u_2,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

$$\mathcal{R} = \sum_{i=1,2,3} \mathbf{u}_i \times \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}_i}$$
 (1.2)

を用いる。

第2章 記号など

このマニュアルでは、スカラー量は、通常のフォントでAのように書く。ベクトル、テンソル量は太字でx, Bのように書く。

基底ベクトルの添字は、 i,j,k,\dots でベクトルのデカルト座標での成分は ギリシャ文字 $\alpha,\beta,\gamma\dots$ で表すようにする。

たとえば、ベクトル

第3章 理論

3.1 基礎方程式

図 3.1 のように実験室が基底ベクトル e_x,e_y,e_z で記述される空間とする。ここで、 $e_i\cdot e_j=\delta_{ij}, (i,j=x,y,z)$ である。右手系として $e_i\times e_j=e_{ijk}e_k$ 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 u_1,u_2,u_3 で剛体の方向を定義する。この場合も $u_i\cdot u_j=\delta_{ij}, (i,j=1,2,3)$ である。図 3.1 の (a) は剛体が剛体の基底ベクトルで表され、同様に、振り子も固定点のまわりで運動する剛体として計算できる。

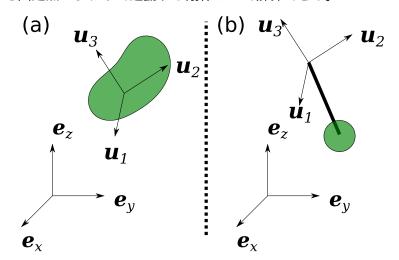


図 3.1: 実験室の基底ベクトル e_x,e_y,e_z と剛体固定基底ベクトル u_x,u_y,u_z 。(a) 剛体の場合。(b) 振り子の場合も剛体として扱う。

トルクTが与えられた際、角運動量Lの時間微分で与えられる。

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

また、剛体の角速度 ω は、剛体の慣性モーメントテンソルIとして

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

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。

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

$$\boldsymbol{\omega} = \sum_{i,j=1,2,3} (I^{-1})_{ij} \boldsymbol{L} \cdot \boldsymbol{u}_i \boldsymbol{u}_j$$
 (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 T が与えられると式 (3.1) より角運動量 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 ω 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 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

3.2.1 一般の式

慣性モーメントテンソルは、一様な質量密度 ρ を持つとして

$$I = \rho \int_{V} (r^{2} \delta - rr) dV$$
 (3.6)

と表される。r は、回転中心からの位置ベクトルで、r は r の長さである。 積分は、物体の体積 V に渡って行う体積積分である。

式 (3.6) は、特定の回転中心で評価される。しかし、任意の回転中心で慣性モーメントテンソル I' を評価するために、力学の教科書でスタイナーの定理と呼ばれる平行移動の公式は、次のとおりとなる。移動前の慣性モーメントテンソルを I、質量を M、原点から r' の位置に平行移動すると、平行移動後のテンソル I' は

$$I' = I + M \left(r'^2 \delta - r' r' \right) \tag{3.7}$$

となる。

また、複数の形状がいくつかで、一つの形状が出来ている場合、それぞれの形状での慣性モーメントテンソルを足し合わせれば良い。ただし、形状が重ねっている場合は、適切ではない。

3.2.2 解析解

PEM に図 3.2 の解析解の慣性モーメントを用いている。これらを平行移動の公式を用いて、さまざまな形状の振り子、コマなどのシミュレーションが出来る。

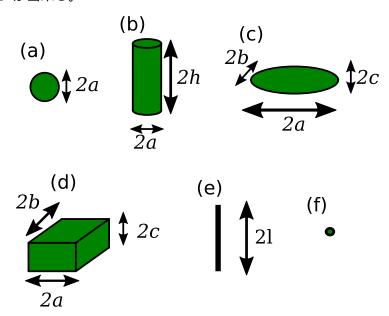


図 3.2: さまざまな形状。(a) 半径 a の球。(b) 底面の半径 a、高さ h の円筒。(c) 系の長さ a,b,c の楕円体。(d) 辺の長さが 2a,2b,2c の直方体。(e) 太さのない長さ 2l の直線。(f) 大きさのない質点

球

図 3.2(a) は、半径 a の球である。この慣性モーメント I は等方的で

$$I = \frac{2}{5}Ma^2\delta \tag{3.8}$$

となる。

円柱

図 3.2(b) は底面の円の半径が a で、長さが 2h の円柱である。円柱の軸の方向の単位ベクトルを d とすると慣性モーメントテンソル I は

$$I = M\left(\frac{a^2}{4} + \frac{h^2}{48}\right)(\boldsymbol{\delta} - \boldsymbol{dd}) + M\frac{a^2}{2}\boldsymbol{dd}$$
 (3.9)

となる。

楕円体

図 3.2(c) は径の長さが a,b,c の楕円体である。それぞれの径の方向の単位ベクトルを u_1,u_2,u_3 とする。このときの慣性モーメントテンソル I は

$$I = \frac{M}{5} \left\{ \left(b^2 + c^2 \right) \mathbf{u}_1 \mathbf{u}_1 + \left(a^2 + c^2 \right) \mathbf{u}_2 \mathbf{u}_2 + \left(a^2 + b^2 \right) \mathbf{u}_3 \mathbf{u}_3 \right\}$$
 (3.10) となる。

直方体

図 3.2(d) は辺の長さが 2a, 2b, 2c の直方体である。それぞれの方向の単位ベクトルを u_1, u_2, u_3 とする。このときの慣性モーメントテンソル I は

$$I = \frac{M}{3} \left\{ \left(b^2 + c^2 \right) \mathbf{u}_1 \mathbf{u}_1 + \left(a^2 + c^2 \right) \mathbf{u}_2 \mathbf{u}_2 + \left(a^2 + b^2 \right) \mathbf{u}_3 \mathbf{u}_3 \right\}$$
 (3.11)

直線

図 3.2(e) は長さが 2l で太さのない直線である。この直線の方向の単位 ベクトルを d とすると慣性モーメントテンソルは

$$I = \frac{Ml^2}{48} \left(\delta - dd \right) \tag{3.12}$$

となる。

点

図 3.2(f) は大きさのない質量 M のみの質点である。 慣性モーメントはゼロである。

3.2.3 表面積分での評価

一般の形状の場合、体積積分ではなく表面積分で慣性モーメント等が表されていると便利である。物体の体積Vは

$$V = \int_{V} dV$$

$$= \frac{1}{3} \int_{V} \nabla \cdot \mathbf{r} dV$$

$$= \frac{1}{3} \int_{S} \mathbf{r} \cdot \mathbf{n} dS$$
(3.13)

となる。ここで最後の式は表面 S に渡っての表面積分で、n は表面 S においての法線単位ベクトルである。重心 R_G は、密度が一様として、

$$\mathbf{R}_{G} = \frac{1}{V} \int_{V} \mathbf{r} dV$$

$$= \frac{1}{2V} \int_{V} \nabla r^{2} dV$$

$$= \frac{1}{2V} \int_{S} r^{2} \mathbf{n} dS$$
(3.14)

となる。慣性モーメントIは式(3.6)から、

$$I = \frac{\rho}{5} \int_{V} \nabla \cdot (rr^{2}\delta - rrr) dV$$
$$= \frac{\rho}{5} \int_{S} (r^{2}\delta - rr) r \cdot ndS$$
(3.15)

となる。

3.3 トルク

ここでは、シミュレーションに用いるトルクをあげる。

3.3.1 重力

重力加速度を g とし物体の質量を M、回転の中心から見た物体の重心の位置を $\mathbf{R}_G = \sum_{i=1,2,3} R_{Gi} \mathbf{u}_i$ とする。重力による位置エネルギーは、

$$U = -M\mathbf{g} \cdot \mathbf{R}_G \tag{3.16}$$

となる。回転微分演算子

$$\mathcal{R} = \sum_{i=1,2,3} u_i \times \frac{\partial}{\partial u_i}$$
 (3.17)

を用いて、トルクTは

$$T = -\mathcal{R}U$$

$$= \sum_{i} \mathbf{u}_{i} \times \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}_{i}} M \mathbf{g} \cdot \sum_{j} R_{Gj} \mathbf{u}_{j}$$
(3.18)

となる。

$$\left\{ \sum_{i} \mathbf{u}_{i} \times \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}_{i}} \left(\mathbf{g} \cdot \mathbf{u}_{j} \right) \right\}_{\alpha} = \sum_{i} e_{\alpha\beta\gamma} u_{i\beta} \frac{\partial}{\partial u_{i\gamma}} g_{\delta} u_{j\delta}
= \sum_{i} e_{\alpha\beta\gamma} u_{i\beta} g_{\gamma} \delta_{ij} \delta_{\gamma\delta}
= e_{\alpha\beta\gamma} u_{j\beta} g_{\gamma}
= (\mathbf{u}_{i} \times \mathbf{g})_{\alpha}$$
(3.19)

となることから、トルクTは、

$$T = M \sum_{j} R_{Gj}(\boldsymbol{u}_{j} \times \boldsymbol{g})$$

= $M \boldsymbol{R}_{G} \times \boldsymbol{g}$ (3.20)

となる。

3.3.2 外場と磁気ダイポールによるトルク

外磁場 B のもとで、粒子が磁気ダイポール p を持つとき、ポテンシャルは

$$U = -\boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{B} \tag{3.21}$$

となる。 $m{p} = \sum_i p_i m{u}_i$ となることから、先の重力の場合と同様にして、トルク $m{T}$ は

$$T = p \times B \tag{3.22}$$

となる。

3.3.3 磁気ダイポール間のトルク

図 3.3 のように、 2 つの剛体に位置 r_a と r_b に磁気ダイポール p_a と p_b の相互作用を考える。

位置 r_a は、回転の中心のベクトル R_a と回転からの中心から磁気ダイポールまでのベクトルを r_a' とする。すなわち $r_a=R_a+r_a'$ である。また、 r_a' および p_a は、剛体 a の向き u_{a1},u_{a2},u_{a3} に依存する。

$$r_a = R_a + \sum_{i=1,2,3} r'_{ai} u_{ai}$$
 (3.23)

$$\boldsymbol{p}_a = \sum_{i=1,2,3} p_{ai} \boldsymbol{u}_{ai} \tag{3.24}$$

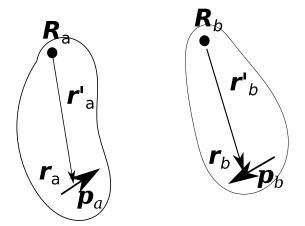


図 3.3: 磁気ダイポールの相互作用。位置 $r_a=R_a+r_a'$ と $r_b=R_b+r_b'$ に磁気ダイポール p_a および p_b がある。

と書くと便利である。また、剛体 b に関しても同様であるし、剛体に複数のダイポールがある場合に拡張は容易である。

2 つの磁気ダイポール p_a, p_b の相互作用によるポテンシャルエネルギーU は、以下のとおりである。

$$U = -\frac{\mu_0}{4\pi r_{ab}^3} \left(3 \frac{r_{ab} r_{ab}}{r_{ab}^2} - \boldsymbol{\delta} \right) : (\boldsymbol{p}_a \boldsymbol{p}_b)$$
 (3.25)

ここで μ_0 は透磁率で

$$\mathbf{r}_{ab} = \mathbf{r}_b - \mathbf{r}_a$$

$$= \mathbf{R}_b + \sum_i r'_{bi} \mathbf{u}_{bi} - \mathbf{R}_a - \sum_i r'_{ai} \mathbf{u}_{ai}$$
(3.26)

である。剛体aに働くトルク T_a は、

$$T_{a} = -\mathcal{R}_{a}U$$

$$= -(\mathcal{R}_{a}r_{ab}) \cdot \frac{\partial U}{\partial r_{ab}} - (\mathcal{R}_{a}p_{a}) \cdot \frac{\partial U}{\partial p_{a}}$$
(3.27)

で計算される。ここで

$$\mathcal{R}_a = \sum_{i=1,2,3} \mathbf{u}_{ai} \times \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}_{ai}}$$
 (3.28)

である。

$$\frac{\partial U}{\partial \boldsymbol{r}_{ab}} = -\frac{3\mu_0}{4\pi r_{ab}^5} \left(-5\frac{(\boldsymbol{r}_{ab} \cdot \boldsymbol{p}_a)(\boldsymbol{r}_{ab} \cdot \boldsymbol{p}_b)\boldsymbol{r}_{ab}}{r_{ab}^2} + (\boldsymbol{p}_b \cdot \boldsymbol{r}_{ab})\boldsymbol{p}_a + (\boldsymbol{p}_a \cdot \boldsymbol{r}_{ab})\boldsymbol{p}_b + (\boldsymbol{p}_a \cdot \boldsymbol{p}_b)\boldsymbol{r}_{ab} \right)$$
(3.29)

$$\frac{\partial U}{\partial \boldsymbol{p}_a} = -\frac{\mu_0}{4\pi r_{ab}^3} \left(3 \frac{(\boldsymbol{r}_{ab} \boldsymbol{p}_b) \boldsymbol{r}_{ab}}{r_{ab}^2} - \boldsymbol{p}_b \right)$$
(3.30)

$$\mathcal{R}_{a\alpha}r_{ab\beta} = -\sum_{i} e_{\alpha\gamma\beta}u_{ai\gamma}r'_{ai} \tag{3.31}$$

$$\mathcal{R}_{a\alpha}p_{ab\beta} = \sum_{i} e_{\alpha\gamma\beta}u_{ai\gamma}p_{ai} \tag{3.32}$$

と計算されることから、

$$T_a = -\mathcal{R}_a U = r'_a \times \frac{\partial U}{\partial r_{ab}} - p_a \times \frac{\partial U}{\partial p_a}$$
 (3.33)

となる。

第4章 シミュレーション方法

4.1 慣性モーメント

剛体の回転運動を計算する前に、剛体の慣性モーメントテンソルを見積もる必要がある。図 4.1(c) の形の剛体の慣性モーメントテンソルを (a),(b) と計算して (c) を見積もる。(a) では、慣性モーメントテンソルを式 (3.8) および式 (3.9) から見積もる。ここでは、重心のまわりでの慣性モーメントテンソルとなる。(b) で、平行移動の公式 (3.7) を用いて目的の回転中心に移動した慣性モーメントテンソルを求める。(c) で、2 つの慣性モーメントを足し合わせて目的の慣性モーメントテンソルとなる。

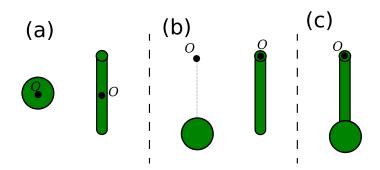


図 4.1: 慣性モーメントテンソルの評価。(a) それぞれの重心のまわりで慣性モーメントテンソルを計算。(b) 平行移動の定理で平行移動した後のテンソルを評価。(c) 平行移動したテンソルを足し合わせる。

式 (3.4) で、慣性モーメントテンソルの逆行列を計算するが必要がある。 ただし、たとえば、大きさのない質点からなる振り子などでは、固有値が ゼロになる場合があり、逆行列が計算できない。慣性モーメントテンソル をスペクトル分解して、

$$I = \sum_{i=1,2,3} \lambda_i n_i n_i \tag{4.1}$$

と出来る。ここで、 λ_i は、固有値で、 n_i そのときの単位固有ベクトルが

 n_i である。逆行列の計算は、

$$I^{-1} = \sum_{\lambda_i \neq 0} \frac{1}{\lambda_i} n_i n_i \tag{4.2}$$

と固有値がゼロの場合を除いて計算する。

4.2 時間積分

時間 t の剛体の向きから、時間 $t + \Delta t$ の剛体の向きを計算する。

4.2.1 オイラー法

式 (3.1) を差分で

$$L(t + \Delta t) = L(t) + T(t)\Delta t \tag{4.3}$$

と計算する。式 (3.4) から、角速度 $\omega(t)$ を計算する。式 (3.5) から、

$$\mathbf{u}_i(t + \Delta t) = \mathbf{u}_i(t) + \boldsymbol{\omega}(t) \times \mathbf{u}_i(t) \Delta t \tag{4.4}$$

となる。このように時間発展を計算することで、剛体の向き u_i を計算できる。

4.2.2 4次のルンゲクッタ法

先のオイラー法では、十分な計算精度を確保するために、 Δt の値を小さくする必要がある。そのため、ここでは、4 次のルンゲクッタ法で計算する方法を述べる。 $t^1=t$ として、

$$T^1 = T(t^1), \quad \boldsymbol{\omega}_1 = \boldsymbol{\omega}(t^1), \quad \boldsymbol{u}_i^1 = \boldsymbol{u}_i(t^1)$$
 (4.5)

とする。次に

$$\Delta L^{1} = T^{1} \Delta t, \quad \Delta u_{i}^{1} = (\boldsymbol{\omega}^{1} \times u_{i}^{1}) \Delta t \tag{4.6}$$

$$L^2 = L^1 + \frac{1}{2}\Delta L^1, \quad u_i^2 = u_i^1 + \frac{1}{2}\Delta u_i^1$$
 (4.7)

$$\omega^{2} = \sum_{i,j=1,2,3} (I^{-1})_{ij} \mathbf{L}^{2} \cdot \mathbf{u}_{i}^{2} \mathbf{u}_{j}^{2}$$
(4.8)

と計算する。これらから、 $t^2=t^1+\Delta t/2$ のトルク T^2 を計算する。同様に

$$\Delta L^2 = T^2 \Delta t, \quad \Delta u_i^2 = (\omega^2 \times u_i^2) \Delta t \tag{4.9}$$

$$L^{3} = L^{1} + \frac{1}{2}\Delta L^{2}, \quad u_{i}^{3} = u_{i}^{1} + \frac{1}{2}\Delta u_{i}^{2}$$
 (4.10)

$$\boldsymbol{\omega}^{3} = \sum_{i,j=1,2,3} (I^{-1})_{ij} \boldsymbol{L}^{3} \cdot \boldsymbol{u}_{i}^{3} \boldsymbol{u}_{j}^{3}$$
(4.11)

と計算する。また、 $t^3=t^1+\Delta t/2$ として、トルク ${m T}^3$ を計算する。さらに、

$$\Delta L^3 = T^3 \Delta t, \quad \Delta u_i^3 = (\omega^3 \times u_i^3) \Delta t \tag{4.12}$$

$$L^4 = L^1 + \Delta L^3, \quad u_i^4 = u_i^1 + \Delta u_i^3$$
 (4.13)

$$\omega^4 = \sum_{i,j=1,2,3} (I^{-1})_{ij} \mathbf{L}^4 \cdot \mathbf{u}_i^4 \mathbf{u}_j^4$$
 (4.14)

これから、やはリトルク T^4 を計算する。

$$\Delta L^4 = T^4 \Delta t, \quad \Delta u_i^4 = (\omega^4 \times u_i^4) \Delta t \tag{4.15}$$

これらから、

$$L(t + \Delta t) = L^{1} + \frac{1}{6}(\Delta L^{1} + 2\Delta L^{2} + 2\Delta L^{3} + \Delta L^{4})$$
(4.16)

$$u_i(t + \Delta t) = u_i^1 + \frac{1}{6}(\Delta u_i^1 + 2\Delta u_i^2 + 2\Delta u_i^3 + \Delta u_i^4)$$
(4.17)

$$\boldsymbol{\omega}(t+\Delta t) = \sum_{i,j=1,2,3} (I^{-1})_{ij} \boldsymbol{L}(t+\Delta t) \cdot \boldsymbol{u}_i(t+\Delta t) \boldsymbol{u}_j(t+\Delta t) \quad (4.18)$$

と計算する。

第5章 操作例

第6章 UDF説明

第7章 action 説明

第8章 Python説明