

磁石振り子シミュレータ PEM

牧野真人

2020 年 9 月 27 日

目次

第1章	はじめに	5
第2章	記号の説明	7
第3章	理論	11
3.1	基礎方程式	11
3.2	慣性モーメントテンソル	12
3.2.1	一般の式	12
3.2.2	解析解	13
3.2.3	表面積分での評価	14
3.3	トルク	15
3.3.1	重力	15
3.3.2	外場と磁気ダイポールによるトルク	16
3.3.3	磁気ダイポール間のトルク	16
第4章	シミュレーション方法	19
4.1	慣性モーメント	19
4.2	時間積分	20
4.2.1	オイラー法	20
4.2.2	4次のルンゲクッタ法	20
第5章	UDF 説明	23
5.1	unitParameter	23
5.2	body[]	23
5.3	simulaton	26
第6章	action 説明	27
第7章	Python 説明	29

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

$$ma = F \quad (1.1)$$

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ち、
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、粒子固定の直交座標系での基底を追っていく計算は、分かりやす
く、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

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

を用いた計算を行う。

従来の古典力学の計算と比べて、格段にわかりやすくなることはないと思
うが、異なった見方が出来るのではないだろうか。

第2章 記号の説明

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 $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{B}$ のように書く。

基底ベクトルの添字は、 i, j, k, \dots もしくは a, b, c, \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。特に、ギリシャ文字が2つ並んでいる場合は、和を取るものとする。例えば、ベクトル $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}$ の内積は $\boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{y}$ を用いて、

$$\boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{y} = x_\alpha y_\alpha \quad (2.1)$$

のように書く。外積 \times に関しては、

$$(\boldsymbol{x} \times \boldsymbol{y})_\alpha = \epsilon_{\alpha\beta\gamma} x_\beta y_\gamma \quad (2.2)$$

となる。ここで $\epsilon_{\alpha\beta\gamma}$ は循環記号、エディントンのイプシロンなどと呼ばれる記号で、 α, β, γ の組が x, y, z の順、およびこれらの偶置換であれば1この奇置換であれば -1 (たとえば y, x, z の順)、任意の置換で表されない場合は0である (たとえば x, x, z)。記号 ϵ に関しては、2階のテンソル $\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}$ の間で

$$\boldsymbol{A} : \boldsymbol{B} = A_{\alpha\beta} B_{\beta\alpha} \quad (2.3)$$

となる。ベクトル $\boldsymbol{p}, \boldsymbol{q}$ が粒子固定の基底ベクトル $\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \boldsymbol{u}_3$ で書けるとすると、

$$\boldsymbol{p} = \sum_{i=1,2,3} p_i \boldsymbol{u}_i \quad (2.4)$$

$$\boldsymbol{q} = \sum_{i=1,2,3} q_i \boldsymbol{u}_i \quad (2.5)$$

となる。粒子固定の座標系で p_i, q_i が定義しやすい、計算しやすい場合は、この表記が便利である。この内積は、

$$\begin{aligned} \boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{q} &= \sum_{i,j=1,2,3} p_i q_j \boldsymbol{u}_i \cdot \boldsymbol{u}_j \\ &= \sum_{i,j=1,2,3} p_i q_j \delta_{ij} \\ &= \sum_{i=1,2,3} p_i q_i \end{aligned} \quad (2.6)$$

である。ここで、 δ_{ij} はクロネッカーのデルタで、 i と j が同じときは 1 それ以外は、0 となる。外積に関しては、

$$\begin{aligned}\mathbf{p} \times \mathbf{q} &= \sum_{i,j=1,2,3} p_i q_j \mathbf{u}_i \times \mathbf{u}_j \\ &= \sum_{i,j,k=1,2,3} p_i q_j \epsilon_{ijk} \mathbf{u}_k\end{aligned}\quad (2.7)$$

と書ける。

実験室が基底ベクトル $\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z$ で記述される空間とする。ここで、 $\mathbf{e}_a \cdot \mathbf{e}_b = \delta_{ab}$, ($a, b = x, y, z$) である。右手系として $\mathbf{e}_a \times \mathbf{e}_b = \epsilon_{abc} \mathbf{e}_c$ 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 $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \mathbf{u}_3$ で剛体の方向を定義する。この場合も $\mathbf{u}_i \cdot \mathbf{u}_j = \delta_{ij}$, ($i, j = 1, 2, 3$) である。

ベクトル \mathbf{r} が

$$\mathbf{r} = \sum_{a=x,y,z} r_a \mathbf{e}_a = \sum_{i=1,2,3} r_i \mathbf{u}_i \quad (2.8)$$

と基底を変えて書けることは重要である。 r_x, r_y, r_z の値は、GOURMET 上で描画する際には、便利であり、 r_1, r_2, r_3 の値は、粒子固定で物理量を考えるときは有効である。テンソル I は、

$$I = \sum_{a,b=x,y,z} I_{ab} \mathbf{e}_a \mathbf{e}_b = \sum_{i,j=1,2,3} I_{ij} \mathbf{u}_i \mathbf{u}_j \quad (2.9)$$

となる。

微分演算子 ∇ を用いて、ポテンシャル $U(\mathbf{r})$ の微分から力 \mathbf{F} を

$$\mathbf{F} = -\nabla U(\mathbf{r}) \quad (2.10)$$

と計算できるように、回転微分演算子 \mathcal{R} を定義して、ポテンシャルの微分からトルクが算出されると便利である。剛体の方向を表す $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \mathbf{u}_3$ でポテンシャル $U(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \mathbf{u}_3)$ が表されるとすると

$$\mathbf{T} = -\mathcal{R}U(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \mathbf{u}_3) \quad (2.11)$$

とする \mathcal{R} を考えたい。微小の回転 $\delta\psi$ を考えて、この微小の変化で行われるトルク \mathbf{T} による仕事と微小の回転の前後のエネルギー差から計算すれば良い。

$$\begin{aligned}-\mathbf{T} \cdot \delta\psi &= U(\mathbf{u}_1 + \delta\psi \times \mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2 + \delta\psi \times \mathbf{u}_2, \mathbf{u}_3 + \delta\psi \times \mathbf{u}_3) - U(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \mathbf{u}_3) \\ &= (\delta\psi \times \mathbf{u}_1) \cdot \frac{\partial U}{\partial \mathbf{u}_1} + (\delta\psi \times \mathbf{u}_2) \cdot \frac{\partial U}{\partial \mathbf{u}_2} + (\delta\psi \times \mathbf{u}_3) \cdot \frac{\partial U}{\partial \mathbf{u}_3} \\ &= \left(\sum_{i=1,2,3} \mathbf{u}_i \times \frac{\partial U}{\partial \mathbf{u}_i} \right) \cdot \delta\psi\end{aligned}\quad (2.12)$$

となることから、

$$\mathcal{R} = \sum_{i=1,2,3} \boldsymbol{u}_i \times \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{u}_i} \quad (2.13)$$

となる。

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 で表す。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。

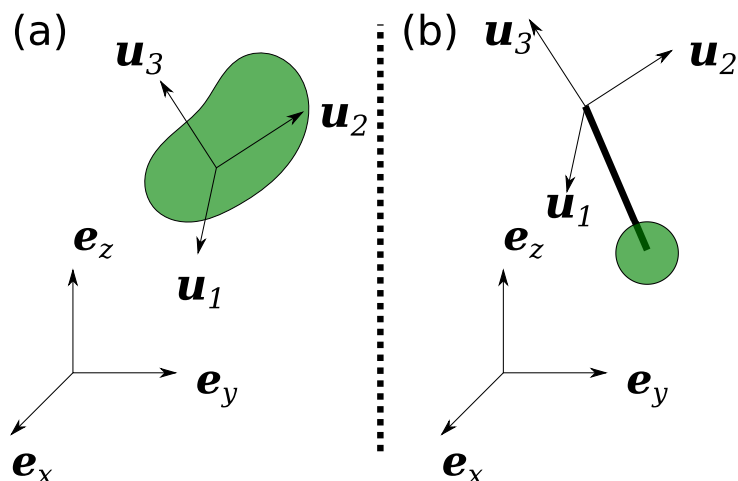


図 3.1: 実験室の基底ベクトル e_x, e_y, e_z と剛体固定基底ベクトル u_x, u_y, u_z 。(a) 剛体の場合。(b) 振り子の場合も剛体として扱う。

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。

$$\frac{dL}{dt} = T \quad (3.1)$$

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

$$I \cdot \omega = L \quad (3.2)$$

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。

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

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

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

となる。これから、

$$\frac{d\mathbf{u}_i}{dt} = \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{u}_i \quad (3.5)$$

となる。

トルク \mathbf{T} が与えられると式 (3.1) より角運動量 \mathbf{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 \mathbf{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

$$\mathbf{I} = \rho \int_V (r^2 \boldsymbol{\delta} - \mathbf{r} \mathbf{r}) dV \quad (3.6)$$

と表される。 \mathbf{r} は、回転中心からの位置ベクトルで、 r は \mathbf{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 \mathbf{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 \mathbf{I} 、質量を M 、原点から \mathbf{r}' の位置に平行移動すると、平行移動後のテンソル \mathbf{I}' は

$$\mathbf{I}' = \mathbf{I} + M (\mathbf{r}'^2 \boldsymbol{\delta} - \mathbf{r}' \mathbf{r}') \quad (3.7)$$

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、形状が重なっている場合は、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。

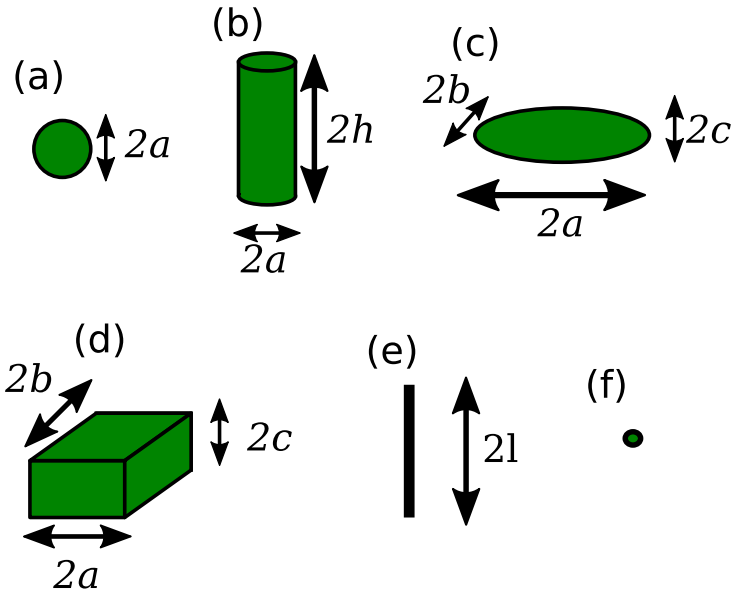


図 3.2: さまざまな形状。(a) 半径 a の球。(b) 底面の半径 a 、高さ h の円筒。(c) 系の長さ a, b, c の楕円体。(d) 辺の長さが $2a, 2b, 2c$ の直方体。(e) 太さのない長さ $2l$ の直線。(f) 大きさのない質点

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

$$I = \frac{2}{5} M a^2 \delta \quad (3.8)$$

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

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

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

$$I = \frac{M}{5} \{ (b^2 + c^2) u_1 u_1 + (a^2 + c^2) u_2 u_2 + (a^2 + b^2) u_3 u_3 \} \quad (3.10)$$

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

$$I = \frac{M}{3} \{ (b^2 + c^2) u_1 u_1 + (a^2 + c^2) u_2 u_2 + (a^2 + b^2) u_3 u_3 \} \quad (3.11)$$

となる。

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

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

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

$$\begin{aligned} V &= \int_V dV \\ &= \frac{1}{3} \int_V \nabla \cdot \mathbf{r} dV \\ &= \frac{1}{3} \int_S \mathbf{r} \cdot \mathbf{n} dS \end{aligned} \quad (3.13)$$

となる。ここで最後の式は表面 S に渡っての表面積分で、 \mathbf{n} は表面 S における法線単位ベクトルである。重心 \mathbf{R}_G は、密度が一様として、

$$\begin{aligned}\mathbf{R}_G &= \frac{1}{V} \int_V \mathbf{r} dV \\ &= \frac{1}{2V} \int_V \nabla r^2 dV \\ &= \frac{1}{2V} \int_S r^2 \mathbf{n} dS\end{aligned}\quad (3.14)$$

となる。慣性モーメント I は式 (3.6) から、

$$\begin{aligned}\mathbf{I} &= \frac{\rho}{5} \int_V \nabla \cdot (\mathbf{r} r^2 \boldsymbol{\delta} - \mathbf{r} \mathbf{r} \mathbf{r}) dV \\ &= \frac{\rho}{5} \int_S (r^2 \boldsymbol{\delta} - \mathbf{r} \mathbf{r}) \mathbf{r} \cdot \mathbf{n} dS\end{aligned}\quad (3.15)$$

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 \mathbf{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、

$$U = -M \mathbf{g} \cdot \mathbf{R}_G \quad (3.16)$$

となる。回転微分演算子

$$\mathcal{R} = \sum_{i=1,2,3} \mathbf{u}_i \times \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}_i} \quad (3.17)$$

を用いて、トルク \mathbf{T} は

$$\begin{aligned}\mathbf{T} &= -\mathcal{R}U \\ &= \sum_i \mathbf{u}_i \times \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}_i} M \mathbf{g} \cdot \sum_j R_{Gj} \mathbf{u}_j\end{aligned}\quad (3.18)$$

となる。

$$\begin{aligned}
\left\{ \sum_i \mathbf{u}_i \times \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}_i} (\mathbf{g} \cdot \mathbf{u}_j) \right\}_\alpha &= \sum_i e_{\alpha\beta\gamma} u_{i\beta} \frac{\partial}{\partial u_{i\gamma}} g_\delta u_{j\delta} \\
&= \sum_i e_{\alpha\beta\gamma} u_{i\beta} g_\gamma \delta_{ij} \delta_{\gamma\delta} \\
&= e_{\alpha\beta\gamma} u_{j\beta} g_\gamma \\
&= (\mathbf{u}_j \times \mathbf{g})_\alpha
\end{aligned} \tag{3.19}$$

となることから、トルク \mathbf{T} は、

$$\begin{aligned}
\mathbf{T} &= M \sum_j R_{Gj} (\mathbf{u}_j \times \mathbf{g}) \\
&= M \mathbf{R}_G \times \mathbf{g}
\end{aligned} \tag{3.20}$$

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 \mathbf{B} のもとで、粒子が磁気ダイポール \mathbf{p} を持つとき、ポテンシャルは

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

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

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

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 \mathbf{r}_a と \mathbf{r}_b に磁気ダイポール \mathbf{p}_a と \mathbf{p}_b の相互作用を考える。

位置 \mathbf{r}_a は、回転の中心のベクトル \mathbf{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 \mathbf{r}'_a とする。すなわち $\mathbf{r}_a = \mathbf{R}_a + \mathbf{r}'_a$ である。また、 \mathbf{r}'_a および \mathbf{p}_a は、剛体 a の向き $\mathbf{u}_{a1}, \mathbf{u}_{a2}, \mathbf{u}_{a3}$ に依存する。

$$\mathbf{r}_a = \mathbf{R}_a + \sum_{i=1,2,3} r'_{ai} \mathbf{u}_{ai} \tag{3.23}$$

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

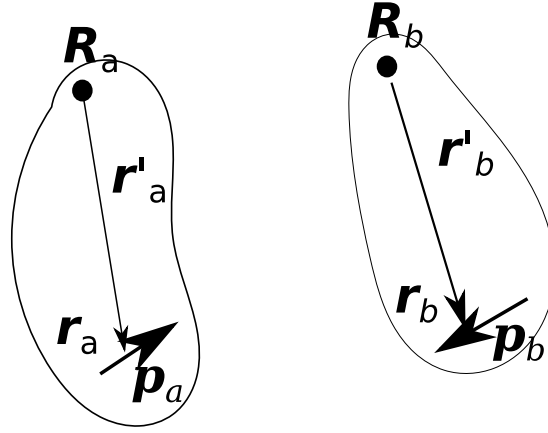


図 3.3: 磁気ダイポールの相互作用。位置 $\mathbf{r}_a = \mathbf{R}_a + \mathbf{r}'_a$ と $\mathbf{r}_b = \mathbf{R}_b + \mathbf{r}'_b$ に磁気ダイポール \mathbf{p}_a および \mathbf{p}_b がある。

と書くこと便利である。また、剛体 b に関して同様であるし、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 $\mathbf{p}_a, \mathbf{p}_b$ 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。

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

ここで μ_0 は透磁率で

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_{ab} &= \mathbf{r}_b - \mathbf{r}_a \\ &= \mathbf{R}_b + \sum_i \mathbf{r}'_{bi} \mathbf{u}_{bi} - \mathbf{R}_a - \sum_i \mathbf{r}'_{ai} \mathbf{u}_{ai} \end{aligned} \quad (3.26)$$

である。剛体 a に働くトルク \mathbf{T}_a は、

$$\begin{aligned} \mathbf{T}_a &= -\mathcal{R}_a U \\ &= -(\mathcal{R}_a \mathbf{r}_{ab}) \cdot \frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}_{ab}} - (\mathcal{R}_a \mathbf{p}_a) \cdot \frac{\partial U}{\partial \mathbf{p}_a} \end{aligned} \quad (3.27)$$

で計算される。ここで

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

である。

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

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

$$\mathcal{R}_{a\alpha} r_{ab\beta} = - \sum_i e_{\alpha\gamma\beta} u_{ai\gamma} r'_{ai} \quad (3.31)$$

$$\mathcal{R}_{a\alpha} p_{ab\beta} = \sum_i e_{\alpha\gamma\beta} u_{ai\gamma} p_{ai} \quad (3.32)$$

と計算されることから、

$$\mathbf{T}_a = -\mathcal{R}_a U = \mathbf{r}'_a \times \frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}_{ab}} - \mathbf{p}_a \times \frac{\partial U}{\partial \mathbf{p}_a} \quad (3.33)$$

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。

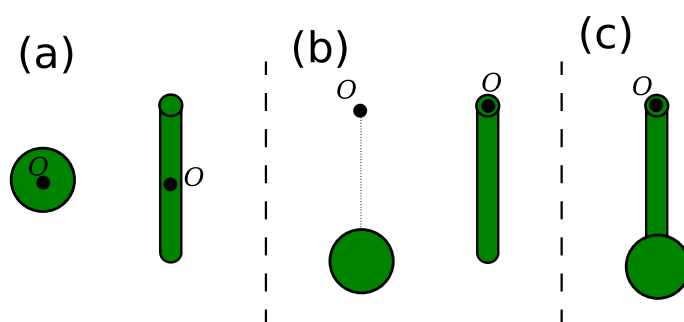


図 4.1: 慣性モーメントテンソルの評価。(a) それぞれの重心のまわりで慣性モーメントテンソルを計算。(b) 平行移動の定理で平行移動した後のテンソルを評価。(c) 平行移動したテンソルを足し合わせる。

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、

$$I = \sum_{i=1,2,3} \lambda_i \mathbf{n}_i \mathbf{n}_i \quad (4.1)$$

と出来る。ここで、 λ_i は、固有値で、 \mathbf{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、

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

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

$$L(t + \Delta t) = L(t) + T(t)\Delta t \quad (4.3)$$

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、

$$u_i(t + \Delta t) = u_i(t) + \omega(t) \times u_i(t)\Delta t \quad (4.4)$$

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、

$$T^1 = T(t^1), \quad \omega_1 = \omega(t^1), \quad u_i^1 = u_i(t^1) \quad (4.5)$$

とする。次に

$$\Delta L^1 = T^1 \Delta t, \quad \Delta u_i^1 = (\omega^1 \times u_i^1) \Delta t \quad (4.6)$$

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

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

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

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

$$\mathbf{L}^3 = \mathbf{L}^1 + \frac{1}{2}\Delta\mathbf{L}^2, \quad \mathbf{u}_i^3 = \mathbf{u}_i^1 + \frac{1}{2}\Delta\mathbf{u}_i^2 \quad (4.10)$$

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

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

$$\Delta\mathbf{L}^3 = \mathbf{T}^3\Delta t, \quad \Delta\mathbf{u}_i^3 = (\boldsymbol{\omega}^3 \times \mathbf{u}_i^3)\Delta t \quad (4.12)$$

$$\mathbf{L}^4 = \mathbf{L}^1 + \Delta\mathbf{L}^3, \quad \mathbf{u}_i^4 = \mathbf{u}_i^1 + \Delta\mathbf{u}_i^3 \quad (4.13)$$

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

これから、やはりトルク T^4 を計算する。

$$\Delta\mathbf{L}^4 = \mathbf{T}^4\Delta t, \quad \Delta\mathbf{u}_i^4 = (\boldsymbol{\omega}^4 \times \mathbf{u}_i^4)\Delta t \quad (4.15)$$

これから、

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

$$\mathbf{u}_i(t + \Delta t) = \mathbf{u}_i^1 + \frac{1}{6}(\Delta\mathbf{u}_i^1 + 2\Delta\mathbf{u}_i^2 + 2\Delta\mathbf{u}_i^3 + \Delta\mathbf{u}_i^4) \quad (4.17)$$

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

と計算する。

図 4.2 で、オイラー法と 4 次のルンゲクッタ法の比較である。楕円体の重心のまわりでの自由回転である。エネルギー保存と角運動量保存から、剛体から見た角運動量の軌跡は閉じたものになる。特に不安定な軌跡を選んで比較した。図の左はオイラー法の軌跡で、最初の軌跡から計算の誤差から別の閉じた軌跡に移動している。図の右は、ルンゲクッタ法の結果で閉じた軌跡になっている。この結果の通り、精度によっては、間違った結果となるのを気をつける必要がある。

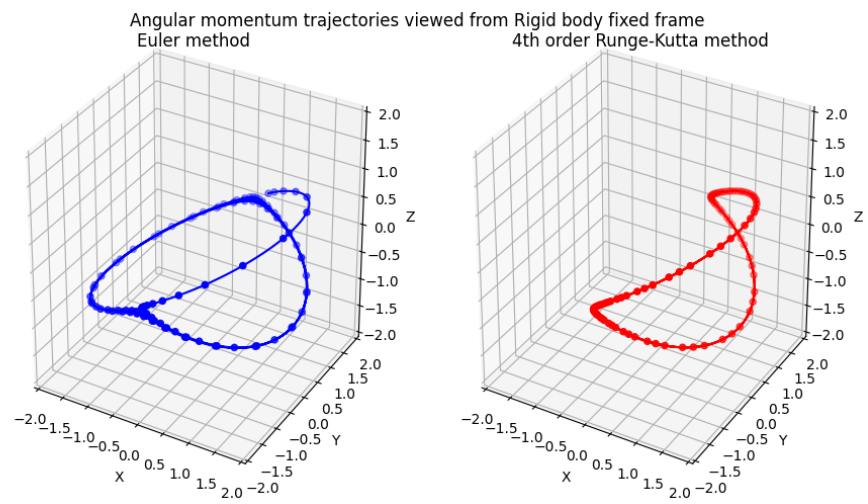


図 4.2: オイラー法と 4 次のルンゲクッタ法との比較。左がオイラー法、右が 4 次のルンゲクッタ法。

第5章 UDF 説明

5.1 unitParameter

単位を MKSA 単位系で指定する。

```
unitParameter.length  
unitParameter.mass  
unitParameter.time  
unitParameter.ampere
```

上から順番に、単位長さを m(メートル)、重さを kg(キログラム)、時間を s(秒)、電流を A(アンペア) で指定する。特に、この値を指定しなくても、シミュレーションは可能である。

5.2 body[]

剛体を定義する。ここで作った剛体が simulation で、振り子 (pendulum) や固定の物体 (body) として利用される。

```
body[].id
```

id は剛体 (body) の id で、simulation で利用する際に使う。値の重複は出来ない。

```
body[0].shape[]
```

shape[] は、剛体の形を指定する。質量や回転の中心も指定する。解析解の分かっているいくつかの形状か、メッシュを読み込むことが出来る。ここでの座標系は、粒子固定の座標系、すなわち u_1, u_2, u_3 を基底ベクトルとする座標系を用いて記述する。

```
body[].shape[].center
```

は回転の中心を入れる。

```
body[].shape[].mass
```

は、この形状の質量を入力する。

```
body[].shape[].shape
```

は形状を sphere,cylinder,ellipsoid,cuboid,mesh,line,point から
選択する。sphere を選択した場合、

```
body[].shape[].sphere.radius
```

で球の半径を入力する。

cylinder を選択した場合、

```
body[].shape[].cylinder.radius
```

に円筒の底面の半径、

```
body[].shape[].cylinder.length
```

に円筒の半分の長さ、

```
body[].shape[].cylinder.d
```

に円筒の軸方向の単位ベクトルを入れる。

ellipsoid を選択した場合、

```
body[].shape[].ellipsoid.a
```

```
body[].shape[].ellipsoid.b
```

```
body[].shape[].ellipsoid.c
```

には、楕円体の径を入れる。

```
body[].shape[].ellipsoid.da
```

```
body[].shape[].ellipsoid.db
```

には、径 a,b の方向の単位ベクトルを入れる。c の方向は、a,b の方向に
垂直なため、入力が必要としていない。

cuboid を選択した場合、

```
body[].shape[].cuboid.a
```

```
body[].shape[].cuboid.b
```

```
body[].shape[].cuboid.c
```

には、直方体の辺の長さの半分長さを入れる。

```
body[].shape[].cuboid.da
```

```
body[].shape[].cuboid.db
```


には、長さ a, b に対応した方向の単位ベクトルを入れる。 c の方向は、 a, b の方向に垂直なため、入力を必要としていない。

`mesh` を選択した場合、三角形の連結により、表面を記述した立体を指定できる。

```
body[].shape[].mesh.vertex[]
```

には、頂点の情報を入れる。

```
body[].shape[].mesh.vertex[].id
```

には、頂点の `id` を重複しないように入れる。

```
body[].shape[].mesh.vertex[].position
```

には、頂点の座標を入れる。

```
body[].shape[].mesh.face[]
```

には、三角形の 3 つの頂点を入れて三角形の表面を指定する。

```
body[].shape[].mesh.face[].id
```

には、表面の `id` を重複しないように入れる。

```
body[].shape[].mesh.face[].vertex[]
```

には、頂点の `id` を配列 3 つ分を使って入れる。

`line` を選択した場合、

```
body[].shape[].line.l
```

直線の半分の長さを入れる。

```
body[].shape[].line.d
```

には、直線の方向の単位ベクトルを入力する。 `point` を選択した場合は、特に何も指定しない。大きさのない質点である。

```
magnet[]
```

は、磁気ダイポールを指定する。

```
body[].magnet[].position
```

には磁気ダイポールの位置を指定する。

```
body[].magnet[].dipole
```

には、ダイポールベクトルを入れる。

`color[]`

は、色を指定する。この配列の要素数と `body[].shape[]` の配列数が同じ場合は、それぞれの `shape` にそれぞれの `color` を指定する。この配列数が一つの場合は、全てこの `body[]` は、この色で描画する。

`body[].analysis`

には、`action` の `analyzer` また `analyzer_all` で解析できる。

`body[].analysis.mass`

`body[].analysis.massCenter`

`body[].analysis.inertiaMoment`

には、`body[]` の全質量、質量中心、慣性モーメントテンソルが入る。

5.3 simulaton

`simulation.time.simulationSteps`

`simulation.time.reportSteps`

`simulation.time.dt`

には、シミュレーションの全ステップ数、出力ステップ数、微小時間の大きさを指定する。

`simulation.systemSize.min`

`simulation.systemSize.max`

では、シミュレーションシステムを直方体で表す。システムの最小値を示す頂点と最大値を示す頂点を指定する。この値は周期境界条件をかけて、磁気ダイポールの相互作用をする場合のみ意味がある。

`simulation.integrator`

では、時間発展の数値積分方法として、4 次のルンゲクッタ法 `4thOrderRungeKutta` かオイラー法 `Euler` を選ぶ。

`simulation.periodicBoundaryCondition`

では、周期境界条件を行う場合、`true` とする。

`simulation.pendulum[]`

`simulation.body[]`

では、それぞれ、回転する剛体および固定あるいは、等速直線、回転運動する剛体を

第6章 action 説明

第7章 Python説明