

磁石振り子シミュレータ PEM

牧野真人

2020 年 9 月 20 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	21
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

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

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、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

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

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。

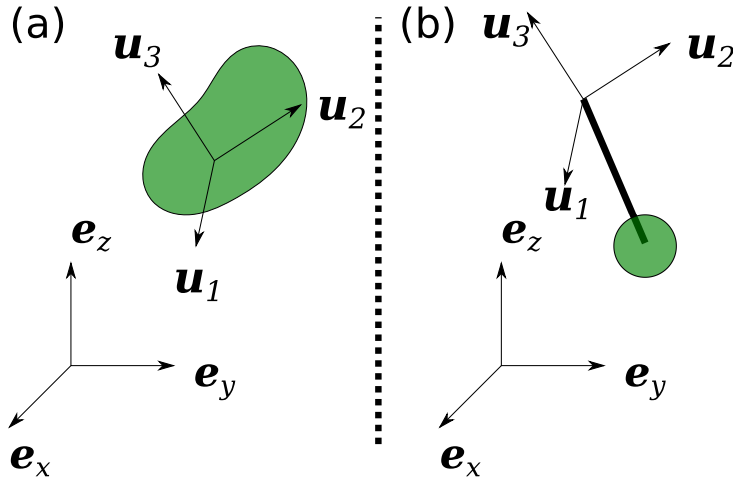


図 3.1: 実験室の基底ベクトル e_x, e_y, e_z と剛体固定基底ベクトル u_x, u_y, u_z 。(a) 剛体の場合。(b) 振り子の場合も剛体として扱う。

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。

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

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。

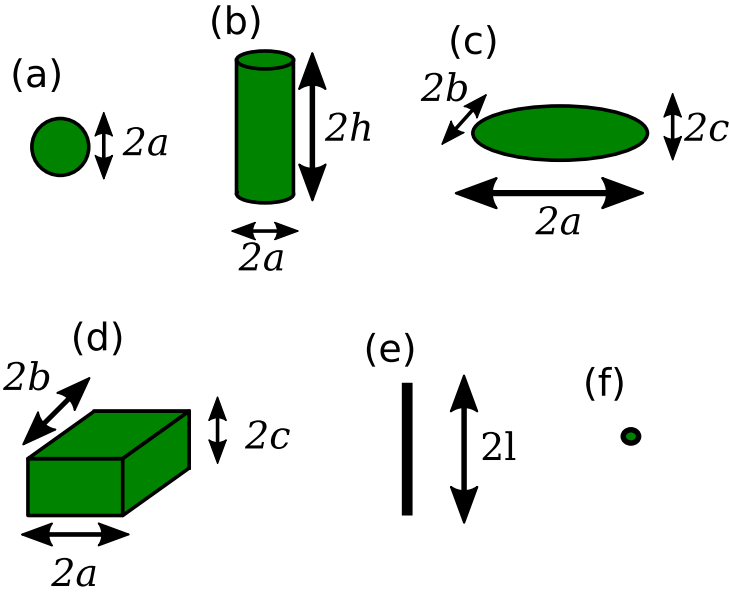


図 3.2: さまざまな形状。(a) 半径 a の球。(b) 底面の半径 a 、高さ h の円筒。(c) 系の長さ a, b, c の楕円体。(d) 辺の長さが $2a, 2b, 2c$ の直方体。(e) 太さのない長さ $2l$ の直線。(f) 大きさのない質点

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。

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

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

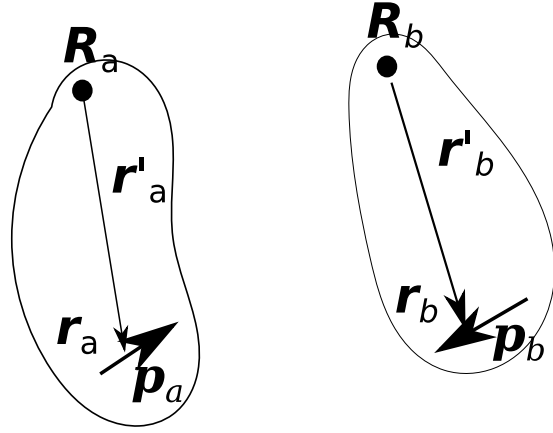


図 3.3: 磁気ダイポールの相互作用。位置 $r_a = R_a + r'_a$ と $r_b = R_b + r'_b$ に磁気ダイポール p_a および p_b がある。

と書くとも便利である。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。

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

ここで μ_0 は透磁率で

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

である。剛体 a に働くトルク T_a は、

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

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。

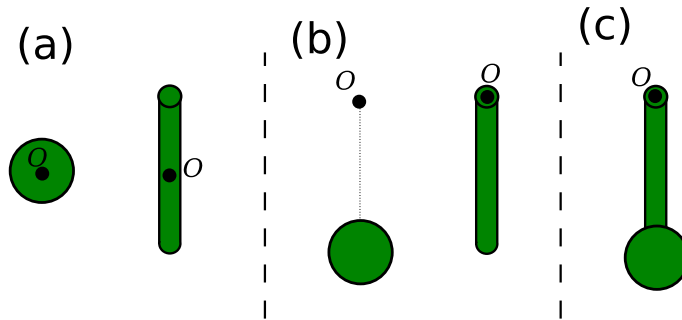


図 4.1: 慣性モーメントテンソルの評価。(a) それぞれの重心のまわりで慣性モーメントテンソルを計算。(b) 平行移動の定理で平行移動した後のテンソルを評価。(c) 平行移動したテンソルを足し合わせる。

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。

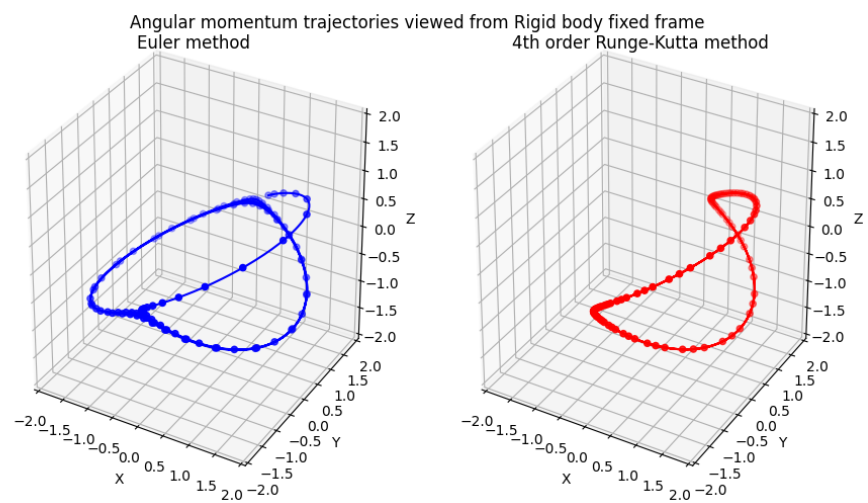


図 4.2: オイラー法と 4 次のルンゲクッタ法との比較。左がオイラー法、右が 4 次のルンゲクッタ法。

第5章 操作例

第6章 UDF説明

第7章 action 説明

第8章 Python説明