

” 周期境界モデル ” の数式解説 (” pbc.f ”)

Open DEM Japan

2025 年 10 月 12 日

本プログラムは周期境界条件を実装し、有限計算領域で無限系を模擬する。位置ベクトルは格子ベクトル \mathbf{a}_α を用いて

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r} - \sum_{\alpha=1}^3 n_\alpha \mathbf{a}_\alpha \quad (1)$$

と折り返される。画像粒子との距離は最小距離条件

$$r_{ij} = \min_{n_\alpha \in \mathbb{Z}} \|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j + \sum_{\alpha} n_\alpha \mathbf{a}_\alpha\| \quad (2)$$

で決定され、境界を跨る力計算が滑らかに行われる。