

”ComputeAngleLocal” の数式解説 (“compute_angle_local.cpp” 拡張子)

Open DEM Japan

2025年6月30日

C++ ファイル `compute_angle_local.cpp` は、LAMMPS/LIGGGHTS において三体角度ポテンシャルに関するローカル量（角度 θ とポテンシャルエネルギー E ）を各 MPI プロセスの保持する粒子集合上で評価する。以下ではコードの背後にある数式を教科書的に叙述する。

まず、角度三体 (i, j, k) （中央粒子を j とする）に対して位置ベクトルを

$$\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \mathbf{r}_k \in \mathbb{R}^3$$

とおく。周期境界条件下では *minimum - image convention* を適用し、

$$\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j - \mathbf{n}_{ij}L, \quad \mathbf{r}_{kj} = \mathbf{r}_k - \mathbf{r}_j - \mathbf{n}_{kj}L, \quad (1)$$

を用いて最近接像を得る（ L はシミュレーションボックス長、 $\mathbf{n}_{\alpha\beta} \in \mathbb{Z}^3$ は整数トランスレーションベクトル）。

それぞれのノルム

$$r_{ij} = \|\mathbf{r}_{ij}\|, \quad r_{kj} = \|\mathbf{r}_{kj}\| \quad (2)$$

を求め、内積より余弦値

$$c = \frac{\mathbf{r}_{ij} \cdot \mathbf{r}_{kj}}{r_{ij} r_{kj}} \quad (3)$$

を計算する。数値丸め誤差により $|c| > 1$ となる可能性があるため、

$$c \leftarrow \begin{cases} 1 & (c > 1) \\ c & (-1 \leq c \leq 1) \\ -1 & (c < -1) \end{cases}$$

のように制限する。

角度 θ は

$$\theta = \arccos(c) \quad [\text{rad}], \quad \theta^\circ = \frac{180}{\pi} \arccos(c) \quad [\text{deg}] \quad (4)$$

として得られる。コードでは度数法 θ° が格納される。

次に角度ポテンシャルエネルギーを角度型 t ごとに

$$E = U_t(\theta) \quad (5)$$

と一般形で定義する。たとえば調和型なら

$$U_t(\theta) = \frac{1}{2} K_t (\theta - \theta_{0,t})^2, \quad (6)$$

森川型なら

$$U_t(\theta) = K_t[1 - \cos(\theta - \theta_{0,t})], \quad (7)$$

などが選択される。実装では関数 `angle->single()` が型 t に応じて (??) を返す。削除済み角度 ($t = 0$) は計算対象外とし、無効化角度 ($t < 0$) では $E = 0$ とするのがコード上の規約である。

プロセスは自領域に属する中央粒子 j について (i) 三体全粒子がグループに含まれるか、(ii) 端粒子 i, k が自身のアドレス空間で解決可能かを判定する。条件を満たす角度の総計を

$$N_{\text{local}} = \sum_{j \in \mathcal{L}} \sum_{a \in \mathcal{A}(j)} \chi_a, \quad (8)$$

としてメモリを確保し、 θ と E を

$$\{(\theta_a, E_a)\}_{a=1}^{N_{\text{local}}}$$

の形でローカルバッファへ書き込む。ここで χ_a は上記判定を満たすかどうかの指示関数である。

最後に、本 `Compute` インスタンスのメモリ使用量は

$$M = N_{\text{max}} n_{\text{values}} \times \text{sizeof}(\text{double}) \quad (9)$$

となる。 N_{max} は DELTA 単位で丸められた上限値であり、再割当て回数を抑える設計である。

以上により、`compute angle/local` は各ステップで粒子三体角度 θ およびそのポテンシャルエネルギー E を効率的に抽出し、後続の統計処理や出力命令へ提供する。