

# Common Neighbor Analysis の数式解説 (compute\_cna\_atom.cpp)

Open DEM Japan

2025年6月30日

本アルゴリズムは、離散要素系の各粒子に対して *Common Neighbor Analysis* (CNA) を実施し、局所構造を FCC, HCP, BCC, ICOS, その他に分類する。以下では変数名の説明を省き、数学的な定式化のみを記述する。

まず、粒子  $i$  の位置を  $\mathbf{r}_i \in \mathbb{R}^3$  とし、カットオフ距離  $r_c$  を用いて近接判定を行う。粒子  $i$  に対する最近接集合 (最大 MAXNEAR= 16 個) は

$$\mathcal{N}_i = \{j \neq i \mid \|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j\| < r_c\}, \quad n_i = |\mathcal{N}_i|. \quad (1)$$

■共通近接集合 各最近接粒子  $j \in \mathcal{N}_i$  について、粒子  $i$  と  $j$  が共有する近接粒子の集合を

$$\mathcal{C}_{ij} = \mathcal{N}_i \cap \mathcal{N}_j, \quad c_{ij} = |\mathcal{C}_{ij}|, \quad (2)$$

と定義する。ここで  $c_{ij} \leq \text{MAXCOMMON} = 8$  に制限される。

■共通近接粒子間結合数  $\mathcal{C}_{ij}$  内の粒子対  $(p, q)$  に対し

$$b_{ij} = \sum_{\substack{p, q \in \mathcal{C}_{ij} \\ p < q}} \Theta(r_c - \|\mathbf{r}_p - \mathbf{r}_q\|), \quad (3)$$

を共通近接集合内の結合 (*bond*) 総数とする。ただし  $\Theta$  は Heaviside 関数。さらに

$$B_{ij}^{\max} = \max_{p \in \mathcal{C}_{ij}} \deg_{\mathcal{C}_{ij}}(p), \quad B_{ij}^{\min} = \min_{p \in \mathcal{C}_{ij}} \deg_{\mathcal{C}_{ij}}(p), \quad (4)$$

で各共通粒子の次数 (*valence*) の最大・最小を求める。

■分類用タプル 粒子  $j \in \mathcal{N}_i$  ごとに

$$\mathbf{t}_{ij} = (c_{ij}, b_{ij}, B_{ij}^{\max}, B_{ij}^{\min}) \in \mathbb{N}^4 \quad (5)$$

を定義し、粒子  $i$  の全最近接粒子について集合  $\mathcal{T}_i = \{\mathbf{t}_{ij}\}_{j \in \mathcal{N}_i}$  を得る。

■構造判定規則  $n_i$  が 12 または 14 の場合のみ判定を行う。以下、 $\#\{\cdot\}$  は条件を満たす  $\mathbf{t}_{ij}$  の個数。

1.  $n_i = 12$  のとき

$$\text{FCC: } \#\{\mathbf{t}_{ij} = (4, 2, 1, 1)\} = 12, \quad (6)$$

$$\text{HCP: } \#\{\mathbf{t}_{ij} = (4, 2, 1, 1)\} = 6, \quad \#\{\mathbf{t}_{ij} = (4, 2, 2, 0)\} = 6, \quad (7)$$

$$\text{ICOS: } \#\{\mathbf{t}_{ij} = (5, 5, 2, 2)\} = 12. \quad (8)$$

2.  $n_i = 14$  のとき

$$\text{BCC: } \#\{t_{ij} = (4, 4, 2, 2)\} = 6, \#\{t_{ij} = (6, 6, 2, 2)\} = 8. \quad (9)$$

いずれの条件も満たさない場合は OTHER, 判定不能時は UNKNOWN とする.

#### ■アルゴリズムの流れ

1. 式 (1) で  $\mathcal{N}_i$  を生成し,  $n_i$  が 12 または 14 以外なら即座に OTHER とする.
2. 各  $j \in \mathcal{N}_i$  について式 (2)–(5) を評価し,  $\mathcal{T}_i$  を構築する.
3. 式 (6)–(9) の集合条件を判定し, 対応する結晶構造を分類する.

■計算コスト 隣接粒子対探索は  $O(n_i^2)$ , 共通近接計算は  $O(n_i c_{ij})$  である.  $n_i$  は 14 以下に制限され, MAXNEAR を超える場合は警告を発する仕様である.

■メモリ使用量 格納配列は

$$n_{\max} \times (\text{sizeof(int)} + \text{MAXNEAR} \times \text{sizeof(int)} + \text{sizeof(double)}) \quad (10)$$

で見積もられる (コード内関数 `memory_usage` 参照).

以上により, `compute_cna_atom.cpp` に実装された CNA アルゴリズムの数式的定義を示した.