

「分子重心 (Center of Mass) 計算」の数式解説 (compute_com_molecule.cpp)

Open DEM Japan

2025年6月30日

本ファイルは、計算対象の全原子集合 \mathcal{A} のうち、ユーザが指定したグループ $\mathcal{G} \subseteq \mathcal{A}$ に属する各分子 m について、周期境界を考慮した空間座標に基づく質量重心 (Center of Mass, COM) \mathbf{R}_m を求める。以下では時間依存性を明示せず、ある時刻 t における値として記述する。

まず、分子 m に属し、かつグループ \mathcal{G} に含まれる原子集合を

$$\mathcal{I}_m := \{i \mid i \in m, i \in \mathcal{G}\}$$

と定義する。各原子 i の (アンラップされた) 位置ベクトルを $\mathbf{r}_i \in \mathbb{R}^3$ 、質量を m_i とすると、分子 m の総質量は

$$M_m = \sum_{i \in \mathcal{I}_m} m_i. \quad (1)$$

並列計算環境では、全プロセスのローカル和

$$M_m^{(\text{loc})} = \sum_{i \in \mathcal{I}_m^{(\text{loc})}} m_i, \quad (2)$$

を MPI_Allreduce により集約し、式 (??) の M_m を得る。ここで $\mathcal{I}_m^{(\text{loc})}$ は各プロセスが保持する部分集合である。

次に、質量で重み付けされた座標和

$$\mathbf{S}_m = \sum_{i \in \mathcal{I}_m} m_i \mathbf{r}_i, \quad (3)$$

を定義する。これもローカル量 $\mathbf{S}_m^{(\text{loc})}$ を MPI_Allreduce で総和して得る。

分子 m の重心座標は

$$\mathbf{R}_m = \frac{\mathbf{S}_m}{M_m} = \frac{1}{M_m} \sum_{i \in \mathcal{I}_m} m_i \mathbf{r}_i. \quad (4)$$

以上の処理はすべての分子 $m = 1, \dots, N_{\text{mol}}$ について独立に行われる。ここで N_{mol} はシミュレーション初期化時にグループ内で検出された分子数であり、計算途中で変化するとエラーを発生させる。

メモリ使用量 B は、分子ごとの

- プロセス内質量バッファ $M_m^{(\text{loc})}$,
- 総質量 M_m ,
- 局所重心和 $\mathbf{S}_m^{(\text{loc})}$,
- 全域重心 \mathbf{R}_m

を保持するために

$$B = 2N_{\text{mol}} \text{sizeof}(\text{double}) + 2N_{\text{mol}} \times 3 \text{sizeof}(\text{double}) + \delta_{\text{map}} (N_{\text{id}} \text{sizeof}(\text{int})), \quad (5)$$

が必要である。ここで δ_{map} は `molmap` が有効な場合に 1, 無効なら 0, $N_{\text{id}} = id_{\text{hi}} - id_{\text{lo}} + 1$ である。

式 (??) によって得られた \mathbf{R}_m は, 周期境界条件下でアンラップされた絶対座標であり, 任意の後続解析 (例えば分子運動解析や距離計算) に直接利用可能である。