

ComputeDihedralLocal の数式解説 (compute_dihedral_local.cpp)

Open DEM Japan

2025年6月30日

四つの粒子 1, 2, 3, 4 の座標ベクトルを $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4$ とする。本計算は、平面 (123) と (234) の成す二面角

$$\phi \quad (-\pi < \phi \leq \pi)$$

を求め、各ジヒドリの局所量として出力する。以下、周期境界条件による最短イメージを適用した後の位置を既に用いているものとする。

(1) 結合ベクトル

$$\mathbf{b}_1 = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, \quad (1)$$

$$\mathbf{b}_2 = \mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_2, \quad (2)$$

$$\mathbf{b}_3 = \mathbf{r}_4 - \mathbf{r}_3. \quad (3)$$

(2) 逆向きベクトル

$$\tilde{\mathbf{b}}_2 = -\mathbf{b}_2. \quad (4)$$

(3) 各平面の法線ベクトル

$$\mathbf{n}_1 = \mathbf{b}_1 \times \tilde{\mathbf{b}}_2, \quad (5)$$

$$\mathbf{n}_2 = \mathbf{b}_3 \times \tilde{\mathbf{b}}_2. \quad (6)$$

(4) 余弦・正弦の評価

$$\cos \phi = \frac{\mathbf{n}_1 \cdot \mathbf{n}_2}{|\mathbf{n}_1| |\mathbf{n}_2|}, \quad (7)$$

$$\sin \phi = \frac{|\tilde{\mathbf{b}}_2| (\mathbf{n}_1 \cdot \mathbf{b}_3)}{|\mathbf{n}_1| |\mathbf{n}_2|}. \quad (8)$$

数値安定化のため、式 (7) の右辺は $[-1, 1]$ に打ち切る。

(5) 二面角の決定

$$\phi = \text{atan2}(\sin \phi, \cos \phi), \quad (9)$$

$$\phi_{\text{deg}} = \frac{180}{\pi} \phi. \quad (10)$$

ここで atan2 は第 1 引数を分子、第 2 引数を分母とする arctan の拡張関数である。出力は度数法 (式 (10)) で与えられる。

(6) ジヒドリル集合の取り扱い

- 計算対象はシミュレーション・グループに属する 4 粒子すべてがひとつのプロセス上で認識可能（ローカルもしくはゴースト）であり，かつ粒子 2 が当該ジヒドリル情報を保持するに限られる．これにより各ジヒドリルは重複なく一度だけ数えられる．
- 要求される局所量が ϕ_{deg} のみであるため，各ジヒドリルにつき式 (10) を評価した 1 要素ベクトルが生成される．

以上が `compute_dihedral_local.cpp` が実装するジヒドリル角の数式的定義である．