

”原子変位量計算”の数式解説 (“compute_displace_atom.cpp” 拡張子)

Open DEM Japan

2025年6月30日

離散要素法 (DEM) シミュレーションにおいて, `compute_displace_atom` は各原子の初期位置と現在位置との差分から変位ベクトルを計算し, $(\Delta x_i, \Delta y_i, \Delta z_i, |\Delta \mathbf{r}_i|)$ の4つの列を出力する. 以下ではその数式的定義をまとめる.

まず, 原子 i の時刻 t における (折り畳まれていない) 実座標 $\tilde{\mathbf{r}}_i(t)$ を定義する. 原子は周囲長さ L_x, L_y, L_z の直方体周期境界 (直交格子) あるいは三斜格子セルを持つシミュレーション空間に存在し, $(n_{xi}, n_{yi}, n_{zi}) \in \mathbb{Z}^3$ を各方向の周期画像番号 (image フラグ) とする.

■直交格子セルの場合 セル長を $\mathbf{L} = (L_x, L_y, L_z)$ とすると, 現在の実座標は

$$\tilde{\mathbf{r}}_i(t) = \mathbf{r}_i(t) + \mathbf{n}_i \odot \mathbf{L}, \quad \mathbf{n}_i = (n_{xi}, n_{yi}, n_{zi}), \quad (1)$$

ただし \odot は要素ごとの積を表す.

■三斜格子セルの場合 セル行列を $\mathbf{H} = \begin{pmatrix} h_{00} & h_{05} & h_{04} \\ 0 & h_{11} & h_{13} \\ 0 & 0 & h_{22} \end{pmatrix}$ とすると,

$$\tilde{\mathbf{r}}_i(t) = \mathbf{r}_i(t) + n_{xi}\mathbf{a}_1 + n_{yi}\mathbf{a}_2 + n_{zi}\mathbf{a}_3, \quad (2)$$

ここで $\mathbf{a}_1 = (h_{00}, 0, 0)$, $\mathbf{a}_2 = (h_{05}, h_{11}, 0)$, $\mathbf{a}_3 = (h_{04}, h_{13}, h_{22})$ である.

■初期実座標 シミュレーション開始直後 (あるいは `compute_displace/atom` が呼び出された時刻) を t_0 とし, その瞬間の実座標を

$$\tilde{\mathbf{r}}_i^0 := \tilde{\mathbf{r}}_i(t_0) \quad (3)$$

として `fix store` に保持する.

■変位ベクトルの定義 現在時刻 t における変位ベクトルは

$$\Delta \mathbf{r}_i(t) = \tilde{\mathbf{r}}_i(t) - \tilde{\mathbf{r}}_i^0 = \begin{pmatrix} \Delta x_i(t) \\ \Delta y_i(t) \\ \Delta z_i(t) \end{pmatrix}, \quad (4)$$

と定義する. (??) または (??) を用いて $\tilde{\mathbf{r}}_i(t)$ を評価することに注意する.

■変位量（ノルム） ユークリッドノルム

$$|\Delta \mathbf{r}_i(t)| = \sqrt{(\Delta x_i(t))^2 + (\Delta y_i(t))^2 + (\Delta z_i(t))^2} \quad (5)$$

を計算し、第 4 列として出力する。

■メモリ消費量 ローカル原子数を N_{loc} とし、各原子につき 4 成分の倍精度実数を保持するため、必要メモリは

$$\text{bytes} = 4N_{\text{loc}} \times \text{sizeof}(\text{double}) \quad (6)$$

となる。

以上により、`compute_displace_atom` が出力する $(\Delta x_i, \Delta y_i, \Delta z_i, |\Delta \mathbf{r}_i|)$ は (??) - (??) に従って定義される量であり、周期境界条件の下でも連続的な変位を正しく評価できる。