"Radius-of-Gyration テンソル" の数式解説 ("compute_gyration.cpp")

Open DEM Japan

2025 年 6 月 30 日

質点系（粒子集合）の **半径テンソル**（radius-of-gyration tensor）は，系の質量分布が重心（中心‐ of ‐ mass, COM）を中心としてどの程度広がっているかを計量する二階テンソルである．ここでは N 個の質点から成る系を考え，各質点の質量を m_i，位置ベクトルを $\boldsymbol{r}_i$ とする．ただし，ベクトルの添字はデカルト座標の成分 x, y, z を意味するギリシャ文字 $\alpha, \beta \in \{x, y, z\}$ で表す．

まず系全体の総質量 M と重心位置 $\boldsymbol{r}_{\mathrm{cm}}$ を

$$M = \sum_{i=1}^{N} m_i, \tag{1}$$

$$\boldsymbol{r}_{\mathrm{cm}} = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^{N} m_i \, \boldsymbol{r}_i \tag{2}$$

と定義する．

半径テンソルの定義

重心を基準とした半径テンソル $S_{\alpha\beta}$ は

$$S_{\alpha\beta} = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^{N} m_i \left(r_{i,\alpha} - r_{\mathrm{cm},\alpha} \right) \left(r_{i,\beta} - r_{\mathrm{cm},\beta} \right), \tag{3}$$

で与えられる．$S_{\alpha\beta}$ は対称テンソル $(S_{\alpha\beta} = S_{\beta\alpha})$ であり，慣性モーメントテンソルと類似の構造を持つ．

半径平方和（半径 of gyration）の定義

半径テンソルのトレースを取ることで，スカラー量としての半径平方和 R_g^2 が得られる：

$$R_g^2 = \mathrm{Tr}\, S = S_{xx} + S_{yy} + S_{zz}. \tag{4}$$

これは

$$R_g^2 = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^{N} m_i \left\| \boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_{\mathrm{cm}} \right\|^2, \tag{5}$$

すなわち各粒子の重心からの距離の二乗を質量で重み付けし，総質量で正規化した量に等しい．

テンソル成分の具体形

式 (3) を展開すると

$$S_{xx} = \frac{1}{M}\sum_i m_i\,(x_i - x_{\mathrm{cm}})^2, \qquad S_{yy} = \frac{1}{M}\sum_i m_i\,(y_i - y_{\mathrm{cm}})^2, \tag{6}$$

$$S_{zz} = \frac{1}{M}\sum_i m_i\,(z_i - z_{\mathrm{cm}})^2, \qquad S_{xy} = \frac{1}{M}\sum_i m_i\,(x_i - x_{\mathrm{cm}})(y_i - y_{\mathrm{cm}}), \tag{7}$$

$$S_{xz} = \frac{1}{M}\sum_i m_i\,(x_i - x_{\mathrm{cm}})(z_i - z_{\mathrm{cm}}), \qquad S_{yz} = \frac{1}{M}\sum_i m_i\,(y_i - y_{\mathrm{cm}})(z_i - z_{\mathrm{cm}}). \tag{8}$$

S_{xx}, S_{yy}, S_{zz} は対角成分で系の各座標軸方向への広がりを表し，S_{xy}, S_{xz}, S_{yz} は非対角成分で分布の相関を示す．

数値実装との対応

- まず粒子のラップ座標を周期境界条件に従って *unwrap* し，真の位置 $\boldsymbol{r}_i$ を得る．
- 各プロセス（MPI ランク）はローカル粒子について式 (6) – (8) の分子（質量で重み付けされた二次形式）を蓄積する．
- `MPI_Allreduce` により全プロセスでの総和を取り，全体のテンソル $MS_{\alpha\beta}$ を得る．
- 最後に総質量 M で割り，(3) の正規化を施す．R_g^2 は (4) のトレースで計算される．
- 総質量が 0 の場合（グループに粒子が存在しない場合）は割り算を避けるため計算を打ち切る．

固有値解析と形状情報

$S_{\alpha\beta}$ を対称テンソルとして固有値分解すると

$$S_{\alpha\beta}\boldsymbol{v}^{(k)} = \lambda_k \boldsymbol{v}^{(k)}, \quad k = 1, 2, 3, \tag{9}$$

となる．固有値 $\lambda_1 \le \lambda_2 \le \lambda_3$ は主慣性軸に沿った質量分布の広がりを示し，$\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3 = R_g^2$ を満たす．形状異方性の指標としては

$$\kappa^2 = 1 - 3\frac{\lambda_1\lambda_2 + \lambda_2\lambda_3 + \lambda_3\lambda_1}{(\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3)^2}, \tag{10}$$

などが利用される（ここでは導出のみ示し，実装は省略）．

おわりに

半径テンソルは分子や粒子集合の構造を特徴付ける基本量であり，特にポリマー鎖や凝集体のコンパクトさ・異方性を評価する指標として広く用いられている．本コード `compute_gyration.cpp` は並列計算環境下でそのテンソルと半径平方和を効率的に算出する実装であり，(1) – (10) に示した理論式を忠実に離散化している．