

# 平均二乗変位 (MSD) の数式解説 (compute\_msd.cpp)

Open DEM Japan

2025年6月30日

離散要素法 (DEM) において粒子群の拡散挙動を評価する指標として平均二乗変位 (MSD) が広く用いられる。compute\_msd.cpp は、任意の粒子グループに対し初期 (計算開始) 時刻で記録した非折り畳み位置  $\mathbf{r}_i^0$  からの変位を計算し、その二乗平均を  $\text{MSD}_x, \text{MSD}_y, \text{MSD}_z$  および  $\text{MSD}_{\text{tot}}$  として出力する。以下ではその数学的定式化を示す。

■1. 非折り畳み座標の定義 粒子  $i$  の時刻  $t$  におけるシミュレーションボックス内座標を  $\mathbf{x}_i(t) = (x_i, y_i, z_i)$ , 画像フラグを  $(n_{x,i}, n_{y,i}, n_{z,i}) \in \mathbb{Z}^3$ , ボックス長を  $(L_x, L_y, L_z)$  とすると、直交系ボックスでは

$$\mathbf{r}_i(t) = \mathbf{x}_i(t) + n_{x,i}L_x \hat{\mathbf{e}}_x + n_{y,i}L_y \hat{\mathbf{e}}_y + n_{z,i}L_z \hat{\mathbf{e}}_z, \quad (1)$$

与えられる。三斜格子系の場合は  $3 \times 3$  行列  $\mathbf{H}$  により

$$\mathbf{r}_i(t) = \mathbf{x}_i(t) + n_{x,i}\mathbf{H}_1 + n_{y,i}\mathbf{H}_2 + n_{z,i}\mathbf{H}_3, \quad (???)$$

と置き換わる ( $\mathbf{H}_1, \mathbf{H}_2, \mathbf{H}_3$  は列ベクトル)。

■2. 重心位置補正 (オプション) com オプションが yes の場合、質量重心

$$\mathbf{R}_{\text{COM}}(t) = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^N m_i \mathbf{r}_i(t), \quad M = \sum_{i=1}^N m_i, \quad (2)$$

を計算し、各粒子の変位を重心系に対して測る。no の場合は  $\mathbf{R}_{\text{COM}}(t) = \mathbf{0}$  とみなす。

■3. 変位ベクトル 初期時刻  $t_0$  に保存した非折り畳み座標  $\mathbf{r}_i^0$  を用い、時刻  $t$  での粒子  $i$  の変位を

$$\Delta \mathbf{r}_i(t) = \mathbf{r}_i(t) - \mathbf{R}_{\text{COM}}(t) - \mathbf{r}_i^0. \quad (3)$$

■4. 平均二乗変位  $x, y, z$  各軸成分と全空間成分の MSD は

$$\text{MSD}_x(t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\Delta r_{i,x}(t))^2, \quad (4)$$

$$\text{MSD}_y(t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\Delta r_{i,y}(t))^2, \quad (5)$$

$$\text{MSD}_z(t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\Delta r_{i,z}(t))^2, \quad (6)$$

$$\text{MSD}_{\text{tot}}(t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \|\Delta \mathbf{r}_i(t)\|^2 = \text{MSD}_x + \text{MSD}_y + \text{MSD}_z. \quad (7)$$

ここで  $N$  はグループ内粒子数である。並列計算では、各プロセスで部分和を求めた後 MPI Allreduce により式 (??)-(??) の分子を集約し、最終的に  $N$  で割って平均を得る。

■5. 物理的意味 拡散係数  $D$  は

$$D = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\text{MSD}_{\text{tot}}(t)}{6t}, \quad (8)$$

で評価できる。したがって、`compute_msd` は固体粒子系の拡散・攪拌度合いを時系列で解析する基盤を提供する。

■6. まとめ `compute_msd.cpp` は

- 初期非折り畳み座標の保存 (`FixStore`)
- 必要に応じた重心補正 (??)
- 変位 (??) の計算と二乗平均 (??)-(??)

を通じて平均二乗変位を出力する。これにより、粒子系の時間発展に伴う拡散現象を定量的に評価できる。