

”ComputePairLocal” の数式解説 (“compute_pair_local.cpp”)

Open DEM Japan

2025年6月30日

粒子系に対して `compute pair/local` は、ユーザが指定した値を各相互作用対ごとに返す。本実装では半近接リストを用いて隣接原子対 (i, j) を列挙し、距離がペアポテンシャルのカットオフ長 r_{cut} 未満で、かつ両粒子が計算対象グループに属する場合のみ計算を行う。以下では数学的定義を示す。

粒子位置を $\mathbf{r}_i = (x_i, y_i, z_i)$ とし、相対位置ベクトルと距離を

$$\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j, \quad r_{ij} = |\mathbf{r}_{ij}| = \sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2}. \quad (1)$$

タイプ α_i, α_j 間の相互作用は

$$r_{ij}^2 < r_{\text{cut}}^2(\alpha_i, \alpha_j) \quad (2)$$

を満たすときのみ評価される。

■ペアスタイルからの物理量取得 要求に `eng, force, fx, fy, fz` などが含まれる場合、基礎ペアスタイルは

$$(U_{ij}, f_{ij}) = \text{pair_style.single}(i, j, \alpha_i, \alpha_j, r_{ij}^2, \phi_{\text{coul}}, \phi_{\text{LJ}}), \quad (3)$$

を返す。ここで U_{ij} はポテンシャルエネルギー、 f_{ij} は距離で割った放射方向力（すなわち $f_{ij} = |\mathbf{F}_{ij}|/r_{ij}$ ）、 ϕ_{coul} と ϕ_{LJ} は特殊近接スケール係数である。

■力の再構成

$$F_{ij,x} = f_{ij}(x_i - x_j), \quad (4)$$

$$F_{ij,y} = f_{ij}(y_i - y_j), \quad (5)$$

$$F_{ij,z} = f_{ij}(z_i - z_j), \quad (6)$$

$$\mathbf{F}_{ij} = r_{ij} f_{ij}. \quad (7)$$

■出力ベクトル 対 m に対する出力成分 $Q_{m,k}$ は要求キーワードにより

$$Q_{m,k} = \begin{cases} r_{ij}, & \text{dist,} \\ U_{ij}, & \text{eng,} \\ F_{ij}, & \text{force,} \\ F_{ij,x}, & \text{fx,} \\ F_{ij,y}, & \text{fy,} \\ F_{ij,z}, & \text{fz,} \\ s_{ij}^{(n)}, & \text{pn,} \end{cases} \quad (8)$$

ただし $s_{ij}^{(n)}$ はペアスタイルが提供する追加スカラーである。

■配列構造とメモリ 要求数 V 件に対し、ローカルプロセス上で得られる対の総数を M とすると、

$$\mathbf{Q} = [Q_{m,k}]_{m=0,\dots,M-1; k=0,\dots,V-1} \quad (9)$$

が返される。メモリ使用量は

$$\mathcal{M} = M V \text{ sizeof(double)} \quad (10)$$

であり、実装では $\Delta = 10000$ エントリ単位で再確保される。

本手続きはまず式 (??) を満たすペア数 M をカウントし ($flag=0$)、必要メモリを確保した後、各式 (??) を評価して配列 (??) を充填する ($flag=1$)。相互作用の重複除去は `newton_pair` の設定により制御される。