”property/atom” の数式解説（“compute_property_atom.cpp”）

Open DEM Japan

2025 年 6 月 30 日

本ソースは `compute property/atom` コマンドが要求された各 “原子-プロパティ”（位置，速度，質量など）を，シミュレーション空間を MPI で分割した各プロセス内の**ローカル原子** $i = 1, \dots, N_{\mathrm{local}}$ について配列 buf_{ip}（p は要求プロパティ番号）へ順に格納する実装である．以下ではコードの主要 37 種類のプロパティを数式で定義する．計算対象原子を判定する **ゲート関数**

$$g_i \;=\; \begin{cases} 1 & (\texttt{mask}_i \,\&\, \texttt{groupbit} \neq 0) \\ 0 & (\text{それ以外}) \end{cases} \tag{1}$$

を導入すると，最終的に格納される値は

$$\mathrm{buf}_{ip} = g_i\, \mathcal{P}_p(i), \quad p = 1, \dots, n_{\mathrm{values}} \tag{2}$$

である．以下 $\mathcal{P}_p(i)$ の具体形を列挙する．

識別・属性

$$\mathcal{P}_{\mathrm{id}}(i) = \texttt{tag}_i \tag{3}$$
$$\mathcal{P}_{\mathrm{mol}}(i) = \texttt{molecule}_i \tag{4}$$
$$\mathcal{P}_{\mathrm{type}}(i) = \texttt{type}_i \tag{5}$$

質量関連

$$\mathcal{P}_{\mathrm{mass}}(i) = \begin{cases} \texttt{rmass}_i & (\texttt{rmass} \neq \texttt{NULL}) \\ m_{\texttt{type}_i} & (\text{それ以外}) \end{cases} \tag{6}$$

体積と等価半径

$$V_i = \begin{cases} \texttt{vol}_i & (\text{SUPERQUADRIC モード}) \\ \frac{4}{3}\pi r_i^3 & (\text{球形}) \end{cases} \tag{7}$$

$$r_{\mathrm{eq},i} = \left(\frac{3V_i}{4\pi}\right)^{1/3} \tag{8}$$

位置座標

$$\mathcal{P}_x(i) = x_i, \quad \mathcal{P}_y(i) = y_i, \quad \mathcal{P}_z(i) = z_i \tag{9}$$

■スケール座標（直方体格子）

$$x_i^{(s)} = \frac{x_i - x_{\mathrm{lo}}}{L_x}, \quad y_i^{(s)} = \frac{y_i - y_{\mathrm{lo}}}{L_y}, \quad z_i^{(s)} = \frac{z_i - z_{\mathrm{lo}}}{L_z} \tag{10}$$

■スケール座標（斜格子） 箱ベクトル $\boldsymbol{h}$ の逆行列 H^{-1} を用いて

$$\boldsymbol{s}_i = H^{-1}\left(\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_{\mathrm{lo}}\right), \quad \boldsymbol{s}_i = (s_{ix}, s_{iy}, s_{iz}) \tag{11}$$

■アンラップ座標 イメージ指数 $n_x, n_y, n_z \in \mathbb{Z}$ を `image` ビット列から $n_x = (\texttt{image}_i \ \& \ \texttt{IMGMASK}) - \texttt{IMGMAX}, \ldots$ で抽出し,

$$\boldsymbol{x}_i^{(u)} = \boldsymbol{x}_i + n_x L_x\,\hat{\boldsymbol{e}}_x + n_y L_y\,\hat{\boldsymbol{e}}_y + n_z L_z\,\hat{\boldsymbol{e}}_z \tag{12}$$

斜格子では $\boldsymbol{x}_i^{(u)} = \boldsymbol{x}_i + n_x\boldsymbol{h}_1 + n_y\boldsymbol{h}_2 + n_z\boldsymbol{h}_3$.

■イメージ指数の直接出力

$$\mathcal{P}_{ix}(i) = n_x, \quad \mathcal{P}_{iy}(i) = n_y, \quad \mathcal{P}_{iz}(i) = n_z \tag{13}$$

運動量関連

$$\mathcal{P}_{v_x}(i) = v_{ix}, \qquad \mathcal{P}_{v_y}(i) = v_{iy}, \qquad \mathcal{P}_{v_z}(i) = v_{iz} \tag{14}$$

$$\mathcal{P}_{f_x}(i) = f_{ix}, \qquad \mathcal{P}_{f_y}(i) = f_{iy}, \qquad \mathcal{P}_{f_z}(i) = f_{iz} \tag{15}$$

電荷・双極子モーメント

$$\mathcal{P}_q(i) = q_i \tag{16}$$

$$\boldsymbol{\mu}_i = (\mu_{ix}, \mu_{iy}, \mu_{iz}, \mu_i) \tag{17}$$

回転に関する量

$$\boldsymbol{\omega}_i = (\omega_{ix}, \omega_{iy}, \omega_{iz}) \tag{18}$$

$$\boldsymbol{L}_i = (L_{ix}, L_{iy}, L_{iz}) \quad (\text{角運動量}) \tag{19}$$

$$\boldsymbol{\tau}_i = (\tau_{ix}, \tau_{iy}, \tau_{iz}) \quad (\text{トルク}) \tag{20}$$

半径・直径

$$\mathcal{P}_r(i) = r_i, \qquad \mathcal{P}_d(i) = 2r_i \tag{21}$$

非球形粒子（楕円体・剛体）

楕円体形状 $\boldsymbol{a}_i = (a_{ix}, a_{iy}, a_{iz})$，クォータニオン $\boldsymbol{q}_i = (q_{0i}, q_{1i}, q_{2i}, q_{3i})$.

$$\mathcal{P}_{\mathrm{shape}x}(i) = a_{ix},\ \mathcal{P}_{\mathrm{shape}y}(i) = a_{iy},\ \mathcal{P}_{\mathrm{shape}z}(i) = a_{iz} \tag{22}$$

$$\mathcal{P}_{\mathrm{quat}w}(i) = q_{0i},\ \mathcal{P}_{\mathrm{quat}i}(i) = q_{1i},\ \mathcal{P}_{\mathrm{quat}j}(i) = q_{2i},\ \mathcal{P}_{\mathrm{quat}k}(i) = q_{3i} \tag{23}$$

線分粒子の端点位置

粒子中心 $\boldsymbol{x}_i$，長さ L_i，傾斜角 θ_i とすると

$$\boldsymbol{x}_i^{(1)} = \boldsymbol{x}_i - \tfrac{1}{2} L_i (\cos\theta_i\, \hat{\boldsymbol{e}}_x + \sin\theta_i\, \hat{\boldsymbol{e}}_y) \tag{24}$$

$$\boldsymbol{x}_i^{(2)} = \boldsymbol{x}_i + \tfrac{1}{2} L_i (\cos\theta_i\, \hat{\boldsymbol{e}}_x + \sin\theta_i\, \hat{\boldsymbol{e}}_y) \tag{25}$$

z 成分は中心と等しい.

ユーザ定義ベクトル

Fortran 名 `i_name`, `d_name` に対応する整数・倍精度ベクトルも同様に $\mathcal{P}_{i\_}(i) = I_{(i)}$, $\mathcal{P}_{d\_}(i) = D_{(i)}$ としてバッファへ搬送される.

以上により，本クラスは必要最小限の論理演算と配列アクセスだけで離散要素法シミュレーションのあらゆる原子情報をオンザフライで出力できる仕組みを数式的に整理した.