”Radial Distribution Function” の数式解説 (“compute_rdf.cpp”)

Open DEM Japan

2025 年 6 月 30 日

粒子系の構造を特徴づける指標として**ラジアル分布関数**（Radial Distribution Function; RDF）$g_{IJ}(r)$ を導出する。ここで I 型粒子を基準粒子，J 型粒子を観測粒子と呼ぶ。計算は離散ビン法で実装されているため，以下ではシェル幅

$$\Delta r = \frac{r_{\mathrm{cut}}}{n_{\mathrm{bin}}} \tag{1}$$

を用いて半径方向を等間隔に区分する。r_{cut} は相互作用カットオフ距離（コードでは `cutforce`），n_{bin} はビン数である。

1. ヒストグラムの定義

粒子間距離 $r_{ij} = |\boldsymbol{r}_j - \boldsymbol{r}_i|$ が $r_b^{\mathrm{low}} = b\Delta r$ と $r_b^{\mathrm{up}} = (b+1)\Delta r$ の間にあるときに 1 を加算して得るヒストグラム

$$H_{IJ}(b) = \sum_{i\in I}\sum_{\substack{j\in J\\ j\neq i}} \Theta\big(r_{ij} - r_b^{\mathrm{low}}\big)\,\Theta\big(r_b^{\mathrm{up}} - r_{ij}\big), \tag{2}$$

を導入する。ここで Θ はヘヴィサイド関数，$b = 0, 1, \ldots, n_{\mathrm{bin}} - 1$ である。コードでは隣接リストにより $\{j\}$ が探索され，粒子対が二重に数えられないよう Newton 近接オプションに応じて制御しているが，数学的には式 (2) が本質である。

2. シェル体積（面積）

空間次元 d に応じてシェルの体積（面積）は

$$V_b^{(3\mathrm{D})} = \frac{4\pi}{3}\big((r_b^{\mathrm{up}})^3 - (r_b^{\mathrm{low}})^3\big), \tag{3a}$$

$$A_b^{(2\mathrm{D})} = \pi\big((r_b^{\mathrm{up}})^2 - (r_b^{\mathrm{low}})^2\big), \tag{3b}$$

で与えられる。コードでは定数 $C^{(3\mathrm{D})} = 4\pi/(3V)$，$C^{(2\mathrm{D})} = \pi/A$ を用い，$V = L_xL_yL_z$, $A = L_xL_y$ は計算セル体積（面積）である。

3. 数密度と理想個数

J 型粒子の総数を N_J，I 型粒子の総数を N_I とすると，一様系における J 型粒子の数密度は

$$\rho_J = \begin{cases} N_J/V & (d=3),\\ N_J/A & (d=2). \end{cases} \tag{4}$$

よってビン b に理想的に存在する J 型粒子数は

$$N_J^{\mathrm{ideal}}(b) = \rho_J \begin{cases} V_b^{(3\mathrm{D})} & (d=3), \\ A_b^{(2\mathrm{D})} & (d=2). \end{cases} \tag{5}$$

4. 離散ラジアル分布関数

定義より

$$g_{IJ}(r_b) = \frac{H_{IJ}(b)}{N_I \, N_J^{\mathrm{ideal}}(b)}, \quad r_b = \left(b + \tfrac{1}{2}\right)\Delta r. \tag{6}$$

コードでは $H_{IJ}(b)$ を全並列プロセスで総和した後に式 (6) で正規化している。さらにビンごとの**配位数**（I 粒子から半径 r_b 以内の J 粒子累積個数）は

$$C_{IJ}(r_b) = \sum_{k=0}^{b} g_{IJ}(r_k) \, N_J^{\mathrm{ideal}}(k). \tag{7}$$

プログラムでは $C_{IJ}(r_b)$ を $ncoord$ に逐次加算することで求め，出力配列の偶数列に g_{IJ}，奇数列に C_{IJ} を格納している。

5. まとめ

以上により，離散シェル幅 Δr で区分した RDF は (I) 粒子数正規化（分母 N_I）と (II) 理想気体近似による密度補正（分母 N_J^{ideal}）によって得られる。$g_{IJ}(r) = 1$ は一様乱数配置を示し，$g_{IJ}(r) > 1$ は r におけるクラスタリング，$g_{IJ}(r) < 1$ は回避相関を意味する。コード `compute_rdf.cpp` はこの理論式を MPI 並列ヒストグラム計数で実装したものであり，三次元・二次元いずれの系にも適用可能である。