シミュレーション領域管理の数式解説（domain.cpp）

Open DEM Japan

2025 年 7 月 2 日

本ファイルは粒子系シミュレーションにおける「箱（Simulation Box）」のサイズ・形状・周期境界処理を司る．座標系として

$$\boldsymbol{r} = (x, y, z)^\mathsf{T}, \qquad \boldsymbol{r}_0 = (x_0, y_0, z_0)^\mathsf{T} \tag{1}$$

を用い，$\boldsymbol{r}_0$ は箱の “lo”（原点）である．

■箱行列　直方体箱では

$$H_{\text{orth}} = \begin{bmatrix} L_x & 0 & 0 \\ 0 & L_y & 0 \\ 0 & 0 & L_z \end{bmatrix}, \tag{2}$$

で長さ $L_\alpha = \texttt{boxhi}_\alpha - \texttt{boxlo}_\alpha$ が定義される．斜方（triclinic）箱では

$$H_{\text{tri}} = \begin{bmatrix} L_x & xy & xz \\ 0 & L_y & yz \\ 0 & 0 & L_z \end{bmatrix}, \tag{3}$$

とする．$\{xy, xz, yz\}$ は傾斜量で，いずれも $|xy|, |xz|, |yz| < \frac{1}{2}L_\alpha$ が推奨される（数値安定性）．

■ラメダ座標　箱内部の点を無次元座標 $\boldsymbol{\lambda} = (\lambda_x, \lambda_y, \lambda_z)^\mathsf{T} \in [0,1]^3$ で表す．変換は

$$\boldsymbol{r} = H\boldsymbol{\lambda} + \boldsymbol{r}_0, \tag{4}$$

$$\boldsymbol{\lambda} = H^{-1}(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_0), \tag{5}$$

で双方向一意となる．式 (**??**) は `lamda2x()`，式 (**??**) は `x2lamda()` に対応する．行列逆数は

$$H^{-1} = \begin{bmatrix} 1/L_x & -xy/(L_xL_y) & (xy\,yz - L_y\,xz)/(L_xL_yL_z) \\ 0 & 1/L_y & -yz/(L_yL_z) \\ 0 & 0 & 1/L_z \end{bmatrix}. \tag{6}$$

■周期境界条件（PBC）　周期方向 α について，任意の点 $\boldsymbol{r}$ を

$$r_\alpha \;\leftarrow\; r_\alpha - n_\alpha L_\alpha, \quad n_\alpha = \left\lfloor \frac{r_\alpha - x_{0\alpha}}{L_\alpha} \right\rfloor, \tag{7}$$

へ折り返す．$n_\alpha \in \mathbb{Z}$ は「何度箱を跨いだか」を示し，`image` 変数に符号化される．斜方箱では x 成分が L_x, xy, xz に絡むため

$$\boldsymbol{r} \;\leftarrow\; \boldsymbol{r} - n_x \begin{bmatrix} L_x \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} - n_y \begin{bmatrix} xy \\ L_y \\ 0 \end{bmatrix} - n_z \begin{bmatrix} xz \\ yz \\ L_z \end{bmatrix}, \tag{8}$$

となる（`remap()` の本質）．

■最小画像法　2 点 $\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}_j$ の相対ベクトル $\boldsymbol{\delta} = \boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j$ を

$$|\delta_\alpha| > \tfrac{1}{2}L_\alpha \quad \Rightarrow \quad \delta_\alpha -= \operatorname{sgn}(\delta_\alpha)L_\alpha \tag{9}$$

で補正すれば，箱中心像が得られる（`minimum_image()`）．斜方箱では他成分にも傾斜 (xy, xz, yz) を加減する．

■画像最近接写像　点 $\boldsymbol{r}_j$ の周期像のうち，基準 $\boldsymbol{r}_i$ に最も近い $\boldsymbol{r}_j^{(\mathrm{img})}$ は

$$\boldsymbol{r}_j^{(\mathrm{img})} = \boldsymbol{r}_i + \underset{\boldsymbol{n}\in\mathbb{Z}^3}{\arg\min} \big\| \boldsymbol{r}_j - \boldsymbol{r}_i - H\boldsymbol{n} \big\|_2, \tag{10}$$

で定まる（`closest_image()`）．

■縮退（シュリンクラップ）境界　非周期方向では粒子群の包絡を測り，箱を

$$x_{0\alpha} = \min_i r_{i\alpha} - \varepsilon L_\alpha, \qquad x_{1\alpha} = \max_i r_{i\alpha} + \varepsilon L_\alpha, \tag{11}$$

へ更新する．$\varepsilon = \mathtt{SMALL} = 10^{-4}$ がデフォルトである．

■半長さと判定量

$$L_\alpha^{(1/2)} = \tfrac{1}{2}L_\alpha, \qquad \boldsymbol{L}^{(1/2)} = (L_x^{(1/2)}, L_y^{(1/2)}, L_z^{(1/2)}), \tag{12}$$

は頻繁に参照される（例：(**??**)）．ビット演算による画像管理は数式表現を割愛する．

■サブドメイン分割　並列計算では

$$\mathrm{sublo}_\alpha = x_{0\alpha} + L_\alpha\, s_\alpha^{(p)}, \qquad \mathrm{subhi}_\alpha = x_{0\alpha} + L_\alpha\, s_\alpha^{(p+1)}, \tag{13}$$

で MPI ランク p の部分箱を割り当てる．$s_\alpha^{(\cdot)}$ は `comm->xyz_split` が与える分割点で，式 (**??**) と同形式の $\boldsymbol{\lambda}$ - 空間にも同様に適用される（`set_lamda_box()`）．

■ビリアルと画像チェック　最長結合距離

$$\Delta_{\max} = B_{\max}\, c, \quad c \approx 1.1, \tag{14}$$

が箱半長より大きい場合，結合ペアが誤画像を参照する可能性があり，警告が発される（`box_too_small_check()`）．

■まとめ　以上の数式は `Domain` クラス諸関数 `set_global_box()`, `pbc()`, `remap_near()`, `image_flip()` などの核心であり，箱幾何・周期境界・並列分割を一貫して扱うための座標変換体系を与える．