

# ハイブリッド・アトムベクトルの数式解説 (atom\_vec\_hybrid.cpp)

Open DEM Japan

2025年6月30日

ハイブリッド・アトムベクトル (`AtomVecHybrid`) は、複数のサブスタイル (粒子属性管理クラス)  $\{\mathcal{A}_k\}_{k=1}^{N_s}$  を束ねて単一の粒子データ構造として機能させる枠組みである。以下、サブスタイル  $k$  に属する量を  $(\cdot)^{(k)}$ 、ハイブリッド全体の量を  $(\cdot)^{\text{hyb}}$  と表す。

## 1. 基本フラグの統合

“機能の有無”を示す論理フラグ (`molecular`, `bonds_allow`, `angles_allow`, `dihedrals_allow`, `impropers_allow`, `mass_type`, `dipole_type` など) は

$$(\text{flag})^{\text{hyb}} = \max_{1 \leq k \leq N_s} (\text{flag})^{(k)} \quad (1)$$

で決定される。逆に `comm_x_only`, `comm_f_only` のように“制限の厳しさ”を示すフラグは

$$(\text{flag})^{\text{hyb}} = \min_{1 \leq k \leq N_s} (\text{flag})^{(k)} \quad (2)$$

として決まる。

## 2. 通信バッファ長の合成

サブスタイルごとの通信要素数を

$$S_{\text{fwd}}, S_{\text{rev}}, S_{\text{bdr}}, S_{\text{datA}}, S_{\text{datV}}$$

で表し、それぞれ `size_forward`, `size_reverse`, `size_border`, `size_data_atom`, `size_data_vel` に対応させる。ハイブリッドでは、全スタイルに共通する必須要素数 (3, 3, 6, 5, 4) を基準にサブスタイルの「余剰分」を加算する：

$$S_{\text{fwd}}^{\text{hyb}} = 3 + \sum_{k=1}^{N_s} (S_{\text{fwd}}^{(k)} - 3), \quad (3)$$

$$S_{\text{rev}}^{\text{hyb}} = 3 + \sum_{k=1}^{N_s} (S_{\text{rev}}^{(k)} - 3), \quad (4)$$

$$S_{\text{bdr}}^{\text{hyb}} = 6 + \sum_{k=1}^{N_s} (S_{\text{bdr}}^{(k)} - 6), \quad (5)$$

$$S_{\text{datA}}^{\text{hyb}} = 5 + \sum_{k=1}^{N_s} (S_{\text{datA}}^{(k)} - 5), \quad (6)$$

$$S_{\text{datV}}^{\text{hyb}} = 4 + \sum_{k=1}^{N_s} (S_{\text{datV}}^{(k)} - 4). \quad (7)$$

### 3. 位置・速度の周期境界補正

粒子  $j$  の位置  $\mathbf{x}_j$  を他プロセスへ送信するときは、周期境界条件 (PBC) の画像シフト  $\delta(\mathbf{p})$  を加える：

$$\mathbf{x}'_j = \mathbf{x}_j + \delta(\mathbf{p}), \quad (8)$$

$$\delta(\mathbf{p}) = \begin{cases} (p_x L_x, p_y L_y, p_z L_z), & \text{直方体セル,} \\ (p_x L_x + p_5 L_{xy} + p_4 L_{xz}, p_y L_y + p_3 L_{yz}, p_z L_z), & \text{三斜晶セル,} \end{cases} \quad (9)$$

ただし  $\mathbf{p} = (p_x, p_y, p_z, p_3, p_4, p_5) \in \mathbb{Z}^6$  は画像番号,  $L_x, L_y, L_z$  はセル寸法,  $L_{xy}, L_{xz}, L_{yz}$  は斜交成分である。

セル変形がある場合 (deform\_vremap) の速度補正は

$$\mathbf{v}'_j = \mathbf{v}_j + \mathbf{H}_{\text{rate}} \mathbf{p}, \quad (10)$$

で与えられる。

### 4. メモリ使用量

サブスタイル  $k$  が確保したバイト数を  $M^{(k)}$  とすると,

$$M^{\text{hyb}} = \sum_{k=1}^{N_s} M^{(k)} \quad (11)$$

がハイブリッドスタイル全体のメモリフットプリントとなる。

### 5. バッファへのパック／アンパック

通信・境界交換・リスタート用のバッファは

$$[\text{共通成分}] \parallel [\text{サブスタイル } 1] \parallel \dots \parallel [\text{サブスタイル } N_s] \quad (12)$$

という連結構造を取り、受信側では同じ順序でアンパックして粒子属性を復元する。

### 6. 成長 (grow) とコピー

粒子数が配列容量  $n_{\text{max}}$  を上回るとき,

$$n_{\text{max}} \leftarrow \begin{cases} n_{\text{max}} + \Delta N, & (n = 0), \\ n, & (n > 0), \end{cases} \quad \Delta N = 10000, \quad (13)$$

と容量を拡張し、式 (3)–(7) で決まる各サブスタイル固有配列を同時に再確保する。粒子データのコピーは

$$\text{copy}(i \rightarrow j) = [\mathcal{A}_1(i \rightarrow j), \dots, \mathcal{A}_{N_s}(i \rightarrow j)] \quad (14)$$

と並列に行われる。

以上のように、ハイブリッド・アトムベクトルは**異種粒子データ構造**を統合するために

- 論理フラグは max / min で統合 (式 (1), (2)),
- 通信要素数は「必須要素+余剰分」の和 (式 (3)–(7)),
- PBC・セル変形補正を座標・速度に一貫適用 (式 (8)–(10)),
- メモリ・通信量は単純加算で評価 (式 (11), (12))

という明快な数理規則に基づき粒子属性を管理・転送する。