

分子系アトムベクトルの数式解説 (atom_vec_molecular.cpp)

Open DEM Japan

2025年6月30日

本ファイルで実装される `AtomVecMolecular` クラスは、分子を構成する粒子（原子）に対し

$$\mathbf{q}_i := (\mathbf{x}_i, \mathbf{v}_i, \mathbf{f}_i, T_i, M_i, \mathbf{I}_i), \quad i = 1, \dots, N_{\text{local}} \quad (1)$$

という状態ベクトルを割り当てる。ここで

$$\mathbf{x}_i = (x_i, y_i, z_i)^\top : \text{位置ベクトル}, \quad (2)$$

$$\mathbf{v}_i = (v_{xi}, v_{yi}, v_{zi})^\top : \text{速度ベクトル}, \quad (3)$$

$$\mathbf{f}_i = (f_{xi}, f_{yi}, f_{zi})^\top : \text{外力の総和}, \quad (4)$$

$$T_i \in \{1, \dots, N_{\text{types}}\} : \text{原子型}, \quad (5)$$

$$M_i \in \mathbb{N} : \text{所属分子 ID}, \quad (6)$$

$$\mathbf{I}_i = (I_x, I_y, I_z)^\top \in \{-I_{\text{max}}, \dots, I_{\text{max}}\}^3 : \text{周期境界でのイメージフラグ} \quad (7)$$

である。加えて、各原子は分子トポロジーを保持する。たとえば結合 (bond) は

$$\mathcal{B}_i = \{(b_{i,k}, j_{i,k}) \mid k = 1, \dots, N_b(i)\}, \quad (8)$$

ここで $N_b(i)$ は原子 i に結び付く結合数、 $b_{i,k}$ は結合型、 $j_{i,k}$ は相手原子インデックスである。同様に

$$\mathcal{A}_i = \{(a_{i,k}, j_{i,k}^1, j_{i,k}^2) \mid k = 1, \dots, N_a(i)\}, \quad (9)$$

$$\mathcal{D}_i = \{(d_{i,k}, j_{i,k}^1, j_{i,k}^2, j_{i,k}^3) \mid k = 1, \dots, N_d(i)\}, \quad (10)$$

$$\mathcal{I}_i = \{(p_{i,k}, j_{i,k}^1, j_{i,k}^2, j_{i,k}^3) \mid k = 1, \dots, N_p(i)\}, \quad (11)$$

が角 (angle), 二面角 (dihedral), 反転角 (improper) の型・隣接原子集合を表す。

1. 通信パッキング MPI 通信の際、指定リスト $\mathcal{L} = \{i_1, \dots, i_n\}$ の原子を

$$\mathcal{P}_{\text{comm}} : (\mathbf{q}_{i_1}, \dots, \mathbf{q}_{i_n}) \mapsto \mathbf{B} \in \mathbb{R}^{3n} \quad (12)$$

へ写像する。周期境界補正は

$$\boldsymbol{\delta}(\mathbf{p}) = p_x \mathbf{a}_1 + p_y \mathbf{a}_2 + p_z \mathbf{a}_3, \quad \mathbf{a}_{1,2,3} : \text{周期ベクトル} \quad (13)$$

により $\mathbf{x}_i \mapsto \mathbf{x}_i + \boldsymbol{\delta}(\mathbf{p})$ として行われる。

速度付きパッキングでは

$$\mathbf{B} = (\mathbf{x}_{i_1}, \mathbf{v}_{i_1}, \dots, \mathbf{x}_{i_n}, \mathbf{v}_{i_n}) \quad (14)$$

(全長 $6n$) となる.

2. 境界 (border) パッキング隣接ペア交換ではタグや型などの不連続整数を $UBuffer$ で倍精度実数へ変換し

$$\mathbf{B} = (\mathbf{x}_i, U(\text{tag}), U(T_i), U(\text{mask}), U(M_i)) \quad (15)$$

を構築する (長さ 7). 速度を含むと式 (15) の末尾に \mathbf{v}_i が連結され長さ 10 となる.

3. 交換 (exchange) パッキング粒子が他プロセスへ移動するときは

$$\mathbf{B} = (\mathbf{x}_i, \mathbf{v}_i, U(\text{tag}), U(T_i), U(\text{mask}), U(\mathbf{I}_i), U(M_i), U(N_b(i)), \dots, U(N_p(i)), \dots, \mathbf{S}_i), \quad (16)$$

とし, 連続する整数フィールドを可変長で伸長してバッファ長 $|\mathbf{B}|$ を先頭に書き込む (可搬性を確保). \mathbf{S}_i は “special list” で

$$\mathbf{S}_i = (s_{i,1}, \dots, s_{i,N_S(i)}), \quad N_S(i) = 3 \text{ 次近接までの隣接原子数} \quad (17)$$

である.

4. 再スタート (restart) パッキング再スタートファイルでは分子型が負でも正に変換し

$$t \mapsto |t|, \quad t \in \{b_{i,k}, a_{i,k}, d_{i,k}, p_{i,k}\} \quad (18)$$

として可逆性を確保する.

5. メモリ使用量粒子配列サイズ n_{\max} とパラメータ $\ell_b, \ell_a, \ell_d, \ell_p$ (各原子あたりの最大結合数など) を用い

$$\begin{aligned} \mathcal{M} = n_{\max} & \left[3(8 + 8 + 8) + 3 \cdot 8 + 8 + 8 \right] \\ & + n_{\max} \left[\ell_b(2 \cdot 8) + \ell_a(4 \cdot 8) + \ell_d(5 \cdot 8) + \ell_p(5 \cdot 8) \right] + \dots \quad [\text{byte}] \end{aligned} \quad (19)$$

で概算される (8 byte は倍精度). “...” には special 配列やスレッドごとの力配列等が加算される.

6. 粒子生成およびデータ読み込み新規粒子は

$$\mathbf{q}_{N_{\text{local}}+1} := (\mathbf{x}_0, \mathbf{0}, \mathbf{0}, T_0, 0, (I_{\max}, I_{\max}, I_{\max})) \quad (20)$$

で初期化され, データファイル “Atoms” 節読み込み時には

$$\mathbf{x}_i \leftarrow \mathbf{x}_{\text{file}}, \quad T_i \leftarrow T_{\text{file}}, \quad M_i \leftarrow M_{\text{file}}, \quad \mathbf{I}_i \leftarrow \mathbf{I}_{\text{file}} \quad (21)$$

として取り込まれる. 読み込み後, 各トポロジー数は 0 クリアされ再度入力ファイル “Bonds”, “Angles” などで設定される.

7. まとめ AtomVecMolecular は式 (1)–(11) で定義した分子系状態ベクトルを通信式 (12)–(17) を介して MPI 並列間で整合させ, 再スタート式 (18) で永続化し, メモリ式 (19) に従う管理コストで大規模分子シミュレーションを実現する.