

# ”ComputeAtomMolecule” の数式解説 (“compute\_atom\_molecule.cpp”. 拡張子)

Open DEM Japan

2025年6月30日

本コンピュータは、分子番号が定義された粒子系を対象に、任意の粒子スカラー（あるいはスカラー列）を粒子単位に集約する。入力となる粒子スカラーは、他の compute, fix, あるいは atom - style variable のいずれかで与えられる。以下では計算対象グループを

$$\mathcal{G} \subseteq \{1, \dots, N\},$$

粒子  $i$  の分子番号を  $m(i) \in \{1, \dots, M\}$  とし、入力スカラーを  $p_i^{(k)}$  ( $k = 1, \dots, K$ ) と記す。  $K = 1$  のときはベクトル計算、  $K \geq 2$  のときは行列（列ごとに異なる入力）計算である。

■グループ選択と分子マッピング 並列環境下では分子番号が連番でない場合があるので、プロセス内で観測される分子番号  $m(i)$  を

$$\tilde{m}(i) = m(i) - \text{id}_{\min} + 1$$

と正規化し、  $1 \leq \tilde{m}(i) \leq M$  の連番へ写像してから演算する。

■粒子→分子の縮約 単一スカラーの場合（ベクトル演算）において、分子  $\mu$  の集約量  $A_\mu$  は

$$A_\mu = \sum_{i \in \mathcal{G}} \delta_{\tilde{m}(i), \mu} p_i^{(1)}, \quad \mu = 1, \dots, M, \quad (1)$$

ここで  $\delta$  はクロネッカーのデルタである。複数スカラーの場合（行列演算）、列  $k$  に対する分子  $\mu$  の集約量  $A_{\mu k}$  は

$$A_{\mu k} = \sum_{i \in \mathcal{G}} \delta_{\tilde{m}(i), \mu} p_i^{(k)}, \quad \mu = 1, \dots, M, k = 1, \dots, K. \quad (2)$$

■MPI オールリダクション 式 (1), (2) は各 MPI ランクで部分和を形成したのち、

$$\{A_\mu\}_{\mu=1}^M \text{ または } \{A_{\mu k}\}_{\mu, k}$$

について

$$A_{\mu k}^{(\text{glob})} = \sum_{\text{ranks}} A_{\mu k}^{(\text{local})}, \quad (3)$$

を MPI\_Allreduce で演算し、全プロセスで一致した分子スカラー（行列）を得る。  $K = 1$  の場合は  $k$  インデックスを省略する。

■メモリ消費量 ローカルプロセスが確保する主要領域のバイト数は

$$B \simeq 2MK \cdot 8 + (\text{id}_{\max} - \text{id}_{\min} + 1) \cdot 4 + N_{\text{local}}^{\max} \cdot 8, \quad (4)$$

と近似できる。第1項は結果格納領域（入出力）、第2項は分子番号写像テーブル、第3項は一時バッファ（粒子スカラー保存）に対応する。

■演算の可換性・結合法則 式 (1), (2) の和演算は可換かつ結合的であるため、式 (3) のオールリダクションにより並列縮約が厳密に成立する。入力スカラーが時間発展の同期点（粒子が同時刻にある状態）で計算されている限り、演算結果はプロセス分割に依存しない。

■まとめ 本コンピュートは

- 粒子群  $\mathcal{G}$  を選別し、
- 任意の粒子スカラー列  $p_i^{(k)}$  を受け取り、
- 式 (1), (2) により分子単位で加算し、
- 式 (3) で並列縮約して

分子スカラー（あるいはスカラー行列）を得る機能を数式的に実装する。この操作は DEM 計算において、分子ごとの質量、運動量、エネルギーなど粒子起源の量を分子単位で後段解析へ橋渡しする際に不可欠である。