

プロパティ計算の数式解説 (compute_property_molecule.cpp)

Open DEM Japan

2025年6月30日

本ファイルは、分子 (molecule) 単位で定義されるスカラー量 (分子 ID) あるいは集団量 (所属原子数) を計算し、MPI 並列下で全計算領域にわたって集約する。以下ではコードの処理を数式で表現する。

まず、シミュレーションに存在する分子 ID の集合を

$$\mathcal{M} = \{ m \in \mathbb{N} \mid M_{\min} \leq m \leq M_{\max} \} \quad (1)$$

とする。ここで $M_{\min} = id_{lo}$, $M_{\max} = id_{hi}$ である。

■1. mol キーワード——分子 ID の列挙 分子ごとに「その分子自身の ID」を返すだけなので、

$$P_m^{(\text{mol})} = m, \quad m \in \mathcal{M} \quad (2)$$

となる。これは各プロセスで局所的な演算のみで決定でき、全プロセス間で通信は不要である。

■2. count キーワード——分子を構成する原子数 まず、任意の原子 i がユーザ定義グループ G に属するかどうかを示す指示関数

$$\chi_G(i) = \begin{cases} 1 & (i \in G), \\ 0 & (i \notin G) \end{cases} \quad (3)$$

を導入する。原子 i が属する分子 ID を $M(i)$ と書くと、各 MPI プロセス p における局所的なカウントは

$$C_m^{(p)} = \sum_{i \in P_p} \chi_G(i) \delta_{M(i), m}, \quad m \in \mathcal{M}, p = 1, \dots, N_{\text{proc}} \quad (4)$$

で与えられる (δ はクロネッカーのデルタ)。ここで P_p はプロセス p が保持する原子集合である。

MPI Allreduce による総和を取れば、全計算領域での最終的な原子数

$$C_m = \sum_{p=1}^{N_{\text{proc}}} C_m^{(p)}, \quad m \in \mathcal{M} \quad (5)$$

が得られる。式 (5) が count キーワードに対応してバッファへ格納される量である。

■3. メモリ使用量の見積り 計算における主要なメモリ消費は「結果バッファ」と「分子 ID のマッピング配列」に起因し、そのバイト数は

$$B = N_{\text{mol}} n_{\text{val}} \text{sizeof}(\text{double}) + \Theta(\text{molmap}) (M_{\max} - M_{\min} + 1) \text{sizeof}(\text{int}) \quad (6)$$

で評価できる. ここで $N_{\text{mol}} = |\mathcal{M}|$, n_{val} はキーワード数 (1 または複数), $\Theta(\text{molmap})$ は molmap が存在するとき 1, 存在しないとき 0 を返すステップ関数である.

以上のように, 本プログラムは数式 (2), (5) で定義されるベクトルあるいは配列を構築し, 必要に応じて MPI 集約を行う構造になっている.