

DumpAtom の数式解説 (dump_atom.cpp)

Open DEM Japan

2025 年 7 月 2 日

本ファイルは、シミュレーション時刻 t における N 個の粒子情報を**ダンプファイル**へ書き出す手続きを実装している。粒子の位置ベクトルを $\mathbf{x} = (x, y, z)^\top$ とし、直方体境界の下限点を $\mathbf{x}_{lo} = (x_{lo}, y_{lo}, z_{lo})^\top$ 、上限点を $\mathbf{x}_{hi} = (x_{hi}, y_{hi}, z_{hi})^\top$ とする。直方体箱長は

$$\mathbf{L} = \mathbf{x}_{hi} - \mathbf{x}_{lo} = (L_x, L_y, L_z)^\top. \quad (1)$$

■1. スケール座標 (orthogonal) 「スケール出力」が選択されると、粒子位置は次式で $[0, 1]$ 区間へ正規化される：

$$(x_s, y_s, z_s)^\top = \left(\frac{x - x_{lo}}{L_x}, \frac{y - y_{lo}}{L_y}, \frac{z - z_{lo}}{L_z} \right)^\top. \quad (2)$$

■2. 画像インデックス 周期境界条件の下では、粒子が箱を横切った回数を整数三成分

$$\mathbf{I} = (I_x, I_y, I_z)^\top \in \mathbb{Z}^3 \quad (3)$$

で保持する。未ラップ (連続) 座標は

$$\mathbf{x}_{unw} = \mathbf{x} + \mathbf{I} \odot \mathbf{L}, \quad (4)$$

ただし \odot は要素ごとの積。

■3. 斜方 (triclinic) セル 斜方格子では箱形状が

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} L_x & 0 & 0 \\ L_{xy} & L_y & 0 \\ L_{xz} & L_{yz} & L_z \end{pmatrix} \quad (5)$$

で表される。ここで L_{xy}, L_{xz}, L_{yz} は傾斜長である。位置ベクトルは

$$\boldsymbol{\lambda} = \mathbf{H}^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{lo}), \quad (6)$$

により基底 \mathbf{H} 上の無次元座標 $\boldsymbol{\lambda}$ へ写像され、ダンプ時には

$$(x_s, y_s, z_s) = \boldsymbol{\lambda} \quad (7)$$

として格納される。

■4. ヘッダ情報 各タイムステップでは、

$$(a) \text{ 時刻 } t, \quad (b) \text{ 粒子数 } N, \quad (1)$$

$$(c) \text{ 箱境界 } (\mathbf{x}_{lo}, \mathbf{x}_{hi}) \text{ または } \mathbf{H}, \quad (2)$$

$$(d) \text{ 境界条件フラグ} \quad (8)$$

を順番に書き出す。これに続き、粒子ごとの

$$[\text{ID}, \text{Type}, \mathbf{c}, \mathbf{I}]$$

が出力される。ここで \mathbf{c} は

$$\mathbf{c} = \begin{cases} \mathbf{x} & (\text{スケールなし} \cdot \text{orthogonal}), \\ \mathbf{x}_s & (\text{スケールあり} \cdot \text{orthogonal}), \\ \mathbf{x} & (\text{スケールなし} \cdot \text{triclinic}), \\ \boldsymbol{\lambda} & (\text{スケールあり} \cdot \text{triclinic}) \end{cases} \quad (9)$$

から選択される。

■5. バイナリ／テキスト出力 粒子あたりのデータ長を

$$s = \begin{cases} 5 & (\mathbf{I} \text{ を含まない}) \\ 8 & (\mathbf{I} \text{ を含む}) \end{cases} \quad (10)$$

とすると、総ダンプ長は sN 倍の倍精度浮動小数点列である。バイナリ形式の場合は

$$\text{write}(sN, \{\text{double}\}_{sN}), \quad (11)$$

テキスト形式の場合は

$$\text{for } i = 1, \dots, N : \quad \text{printf}(f(\text{ID}_i, \text{Type}_i, \mathbf{c}_i, \mathbf{I}_i)), \quad (12)$$

となる。書式 f はフラグの組合せで固定長書式

$$\{\%d, \%d, \%g, \%g, \%g, [\%d, \%d, \%d]\} \quad (13)$$

の部分集合である。

■6. メモリバッファ 粒子情報は内部バッファ

$$\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{sN} \quad (14)$$

へ順次格納される。バッファ長が不足するときは

$$\mathbf{B} \leftarrow \text{realloc}(\mathbf{B}, |\mathbf{B}| + \Delta), \quad \Delta = 2^{20} (= 1 \text{ MiB}) \quad (15)$$

により拡張し、整数あふれを

$$|\mathbf{B}| + \Delta < 2^{31} - 1 \quad (16)$$

で監視する。

■7. 並列分布 並列実行環境下では、各計算ノードが N_p 粒子を保持し、

$$\sum_{p=1}^P N_p = N \quad (17)$$

を満たす。粒子パッキングは各ノードで独立に行われ、

$$\text{MPI_Allgather}(\mathbf{B}_p) \quad (p = 1, \dots, P) \quad (18)$$

により結合される。

以上により、本ソースは粒子データを「スケール・画像・セル形状・出力形式」の $2 \times 2 \times 2 \times 2$ 通りに柔軟にフォーマットし、高速にダンプする機構を実現している。