

”DumpDCD” の数式解説 (“dump_dcd.cpp”)

Open DEM Japan

2025 年 7 月 2 日

本ファイルは粒子座標を DCD 形式で逐次書き込むモジュールである。以下では変数名に立ち入らず、コードの処理を数式で記述する。

粒子選択とアンラップ写像

プロセス p が保持する局所粒子集合を

$$\mathcal{I}^{(p)} = \{ i \mid \text{mask}_i \wedge \text{groupbit} \neq 0 \} \quad (1)$$

と定義する。アンラップ設定が有効な場合、周期境界を跨いだ実位置は

$$\mathbf{x}_i^{\text{uw}} = \mathbf{x}_i + n_{x,i} \mathbf{a} + n_{y,i} \mathbf{b} + n_{z,i} \mathbf{c}, \quad (2)$$

ここで $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ は格子ベクトルである。直方系なら $\mathbf{a} = (L_x, 0, 0)$ など、三斜系なら

$$\mathbf{a} = (h_0, 0, 0), \quad \mathbf{b} = (h_1, h_5, 0), \quad \mathbf{c} = (h_2, h_3, h_4) \quad (3)$$

とする。

ローカル → グローバル配列

粒子 $i \in \mathcal{I}^{(p)}$ について

$$\mathbf{q}_i = \begin{bmatrix} x_i^{(*)} \\ y_i^{(*)} \\ z_i^{(*)} \end{bmatrix}, \quad (x_i^{(*)}, y_i^{(*)}, z_i^{(*)}) = \begin{cases} (x_i, y_i, z_i) & \text{unwrap off} \\ \mathbf{x}_i^{\text{uw}} & \text{unwrap on} \end{cases} \quad (4)$$

を長さ 3 の列ベクトルとしてローカルバッファに連結する。全プロセスのバッファを ID 昇順で集約し、

$$\mathbf{X} = (x_1, \dots, x_N), \quad \mathbf{Y} = (y_1, \dots, y_N), \quad \mathbf{Z} = (z_1, \dots, z_N) \quad (5)$$

の 3 配列を得る。

1 フレーム当たりの書き込み

フレーム長は

$$\beta = 3N [\text{float}] = 12N \text{ bytes} \quad (6)$$

であり、ルートプロセスは

(i) 書き出し整数 4β
(ii) $\mathbf{X}(\beta) \rightarrow \text{file}$
(iii) 書き出し整数 4β
(iv) \mathbf{Y}, \mathbf{Z} も同様

(7)

を順に実行する.

単位胞情報

直方体なら

$$(a, \gamma, b, \beta, \alpha, c) = (L_x, 0, L_y, 0, 0, L_z), \quad (8)$$

三斜体なら

$$\begin{aligned} a &= \|\mathbf{a}\|, & b &= \|\mathbf{b}\|, & c &= \|\mathbf{c}\|, \\ \alpha &= \frac{\mathbf{b} \cdot \mathbf{c}}{bc}, & \beta &= \frac{\mathbf{a} \cdot \mathbf{c}}{ac}, & \gamma &= \frac{\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}}{ab}, \end{aligned} \quad (9)$$

とし,

$$\text{dim} = [a, \gamma, b, \beta, \alpha, c] \quad (10)$$

を 6 double (48 bytes) でフレーム冒頭に書き込む.

ヘッダー更新

フレーム数 N_{FILE} と最終ステップ N_{STEP} を

$$N_{\text{FILE}} \leftarrow N_{\text{FILE}} + 1, \quad N_{\text{STEP}} \leftarrow t \quad (11)$$

と更新し, `fseek` でヘッダー中のオフセット 8B と 20B の位置を上書きする.

全体フロー

$\forall p \in \{0, \dots, P-1\}$:
1. $\mathcal{I}^{(p)}$ を抽出
2. バッファに \mathbf{q}_i を格納
3. ID 昇順で $(\mathbf{X}, \mathbf{Y}, \mathbf{Z})$ へ配置
ルート: 集約完了 \Rightarrow フレーム書込・ヘッダー更新

 (12)

以上で `dump_dcd.cpp` のアルゴリズムを定式化した.