

CL

Minicell クラスでやってる = ④.

① subbox クラスから座標の配列をもつ。 ₂

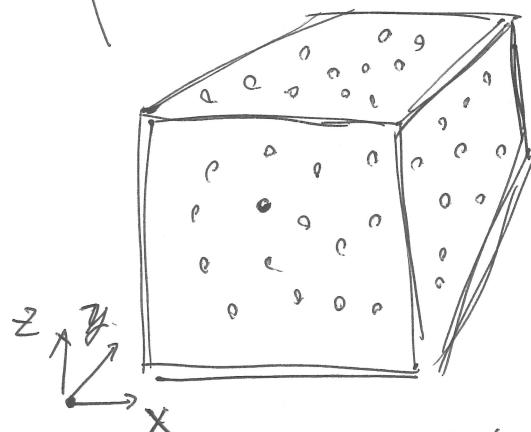
minicell::set-cards-to-homebox().

この時点では、card 配列はテキトーな順番。

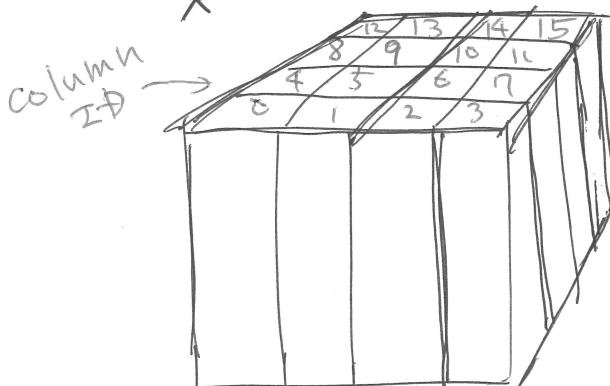
$\left\{ \begin{array}{l} \text{card} = [x_0, y_0, z_0, x_1, y_1, z_1, \dots, x_n, y_n, z_n] \\ \downarrow \text{各原子の } x, y, z \text{ 座標が順番に並んでいます。} \end{array} \right.$

atomids_buf[] は

各原子の 原子ID が記録される
(card の長さ)
ユーザーアクセス。



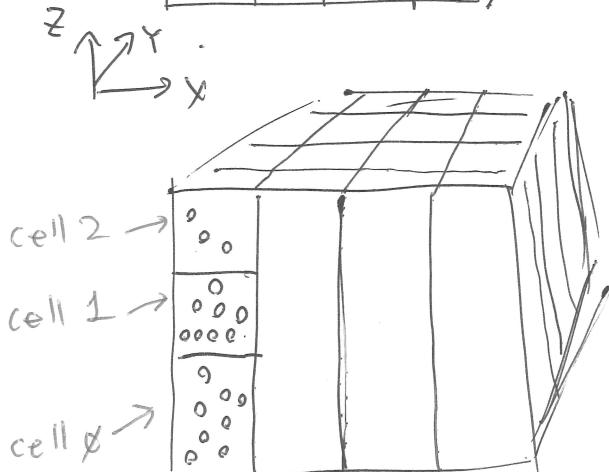
11コの中の原子座標が順番に並んで入っている。
これが並べ替え
(11コ全体をboxとします)



ます X 方向 Y 方向に均等である。

各長さ領域を

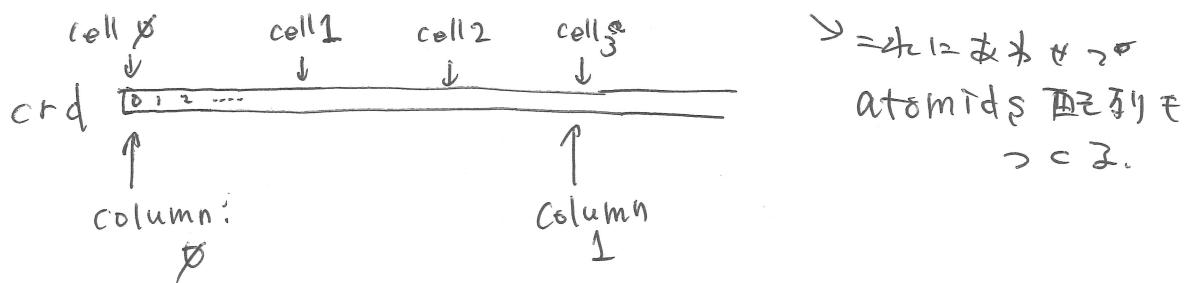
column とする。



そして、各 column は cell 12 分割する。

各 cell 12 は 8つの原子が入る。

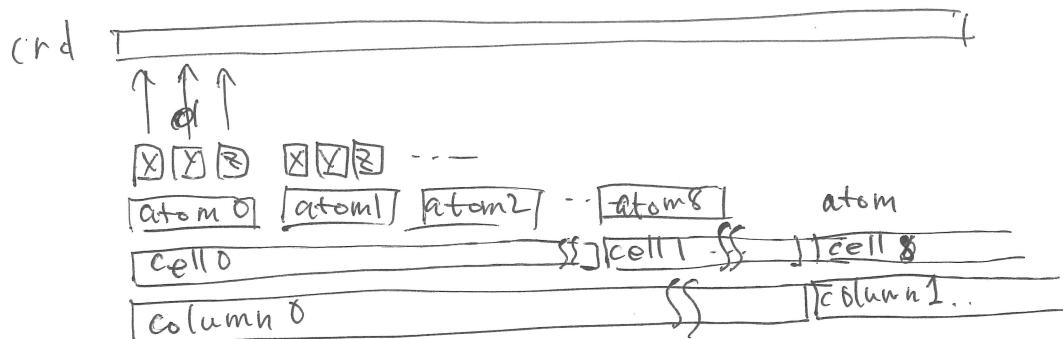
最終的に、次のように crd 配列が得られる



\Rightarrow cell には atomids が 2 つ
atomids 配列も
 \rightarrow column 0

- ① column ID の順に、その属する原子と座標が収められる。
- ② 各 column 中では cell ID の順に配列され、
各座標が重ねて並んでいく。
- ③ cell ID $\times 8 \times 3$ 番目要素が、
各 cell ID の最初の原子と X 座標を示す。
- ④ column 中の原子数が 8 の倍数ではないときは、
ターミニ原子を追加する。
 \hookrightarrow atomids 配列にない時、ターミニ原子は
-1 の値が設定される。

= 3 層階層がある。



(1-1) 最初の、どの原子がどの column に属するかします。 [3]

set-atoms-into-grid-xy()

配列上に
最初の
atom

番号

idx-atom-cell-xy [原子番号] = column ID.

最初の crd 配列上
の番号

n-atoms-col [column ID]
= the number of atoms
in the column.

X, Y 軸
従って左の
ようにイカ
が決まる。

(1-2) crd 配列上における index を取得す。

set-idx-
xy-head()
関数

c idx-xy-head-atom [column ID].
そのうち最初の原子番号.
column ID = 0 または
= 1 または, column 0 に含まれる原子の
数

c idx-xy-head-cell [column ID].
そのうち最初のセル番号.

o n-cells-z [column ID].
そのうち属するセルの数.

o idx-crd-cell [X][Y][Z] = cell ID
cell-crd [cell ID][2] = {X, Y, Z}.
各セルの座標.

①-3 ord, atom_ids 配列を並べる。

↑

reorder_atom_info_for_columns()

↓ カラム内は大きい順、2つずつカラム毎に分けた。

reorder_atominfo_in_columns()

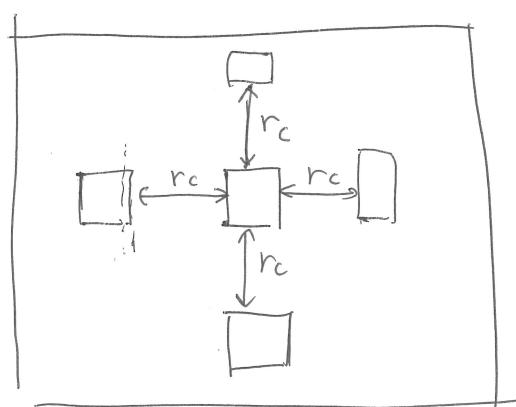
カラム毎にトライ内に並べ替えて行った。

(quick-sort).

ミニセルの cell への分割がなされた。

② 近接セルの cell のペアを引出す。

CPU 版は MiniCell::enumerate_cell_pairs()
GPU 版は cuda-setup.cu +
cuda_enumerate_cell_pairs()



r_c ... フットオフ距離。

ペア一組の情報を。

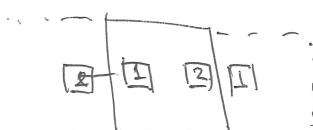
CellPair 構造体を格納。

{
• cell_id 1 → セル ID.
• cell_id 2 →
• image → 周期境界の
処理用 → グリッド

pair-mask [2].

~~8*8~~ 8 原子 × 8 原子 のペア
を計算するかどうかハテナ。
2 交代方向に境界を = 2 の

1 bit が 1 なら X 軸で
2 交代方向に境界を = 2 の



32bit × 2 の配列 = 64 ペア

ハテナが 1 なら 計算しない。

※ 共有結合 4, 以降は

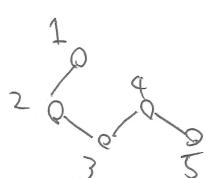
計算しない。

$$1-2 \Rightarrow 1$$

$$1-3 \Rightarrow 1$$

$$1-4 \Rightarrow 1$$

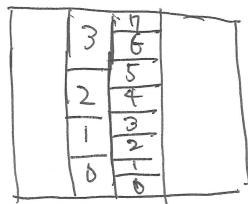
$$1-5 \Rightarrow 0$$



※ uniform grid.

cell はカラム毎に 2 方向の番号がバラバラ。

真横にいるセルをさがすのが大変。

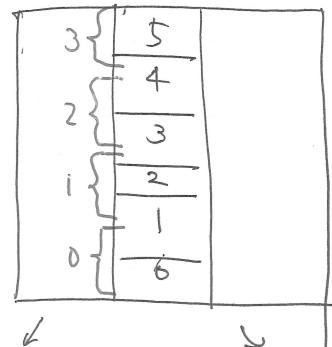


2 方向が 5 だつています。

2 方向にも 等間隔に切ってます。

多対多の対応関係 \Rightarrow

(例 列挙 つかう)



uni2cell

cell2uni

0: 0~1
1: 1~3
2: 3~4
3: 4~5

0: 0~6
1: 0~1
2: 1~1
3: 1~2
4: 2~3
5: 3~3