通信境界判定アルゴリズムの数式解説（`comm_I.h`）

Open DEM Japan

2025 年 6 月 30 日

粒子番号を i，空間次元を $\dim \in \{0,1,2\}$ とし，粒子中心座標を $\boldsymbol{x}_i = (x_{i,0}, x_{i,1}, x_{i,2})$，半径を r_i と表す．境界領域（通信バッファ）への包含判定は次の三段階で行われる．

■1. 粒界最適化スイッチ　ドメインが直交格子（非三斜格子）で，かつ粒子の半径情報が利用可能なときのみ粒界最適化を有効にする．有効・無効を表すスイッチ $g \in \{0,1\}$ を

$$g \;=\; \begin{cases} 1 & (\text{triclinic} = 0 \;\wedge\; r_i \text{ 有効}) \\ 0 & (\text{上記以外}) \end{cases} \tag{1}$$

と定義する．

■2. 直交境界に対する包含判定　MPI 通信方向を `ineed` で偶奇判定し，左向き（偶数）・右向き（奇数）の二条件を導入する．境界面位置を下限 ℓ_{lo}，上限 ℓ_{hi} とすると，左向き判定関数 $B^{\mathrm{left}}_{i,\dim}$ と右向き判定関数 $B^{\mathrm{right}}_{i,\dim}$ はヘヴィサイド関数 $\mathrm{H}(\,\cdot\,)$ を用いて

$$B^{\mathrm{left}}_{i,\dim} = \mathrm{H}\bigl(x_{i,\dim} - \ell_{\mathrm{lo}}\bigr)\ \mathrm{H}\bigl(\ell_{\mathrm{hi}} + g\,r_i - x_{i,\dim}\bigr), \tag{2}$$

$$B^{\mathrm{right}}_{i,\dim} = \mathrm{H}\bigl(x_{i,\dim} - (\ell_{\mathrm{lo}} - g\,r_i)\bigr)\ \mathrm{H}\bigl(\ell_{\mathrm{hi}} - x_{i,\dim}\bigr). \tag{3}$$

包含判定関数 $B_{i,\dim}$ は

$$B_{i,\dim} = \begin{cases} B^{\mathrm{left}}_{i,\dim} & (\texttt{ineed}\text{ 偶}) \\ B^{\mathrm{right}}_{i,\dim} & (\texttt{ineed}\text{ 奇}) \end{cases} \tag{4}$$

で与えられ，$B_{i,\dim} = 1$ のとき粒子 i は境界領域に属する．

■3. くさび（Wedge）境界に対する包含判定　円筒座標面に相当する 2 次元平面上での計算である．粒子の座標を $\boldsymbol{c}_i = (x_{i,\varphi}, x_{i,\varphi+1})$ とおき，左・右境界面をそれぞれ通過点 $\boldsymbol{p}_{\mathrm{L}}, \boldsymbol{p}_{\mathrm{R}}$ と法線 $\boldsymbol{n}_{\mathrm{L}}, \boldsymbol{n}_{\mathrm{R}}$ で表す．差分ベクトル $\boldsymbol{d}^{\mathrm{L}}_i = \boldsymbol{c}_i - \boldsymbol{p}_{\mathrm{L}}$，$\boldsymbol{d}^{\mathrm{R}}_i = \boldsymbol{c}_i - \boldsymbol{p}_{\mathrm{R}}$ を用い，内積 $\langle\cdot,\cdot\rangle$ で示す包含条件は

$$\langle \boldsymbol{d}^{\mathrm{L}}_i, \boldsymbol{n}_{\mathrm{L}} \rangle \ge -g\,r_i, \tag{5}$$

$$\langle \boldsymbol{d}^{\mathrm{R}}_i, \boldsymbol{n}_{\mathrm{R}} \rangle \ge -g\,r_i. \tag{6}$$

式 (5) は左向き（偶数 `ineed`）の場合，式 (6) は右向き（奇数 `ineed`）の場合に適用される．

■4. アルゴリズムの帰結　以上をまとめると，粒子 i は

$$\bigl(B_{i,\dim} = 1\bigr) \quad \text{または} \quad \bigl((5)\text{または}(6)\bigr)$$

を満たすときに通信境界粒子としてマークされる．粒界最適化が有効な場合（$g = 1$）には，境界幅が半径 r_i だけ拡張され，粒径の大小が通信負荷を最小化するよう考慮される．