

# “ComputeReduce” の数式解説 (“compute\_reduce.cpp”)

Open DEM Japan

2025年6月30日

本稿では、離散要素法 (DEM) コード LIGGGHTS® における ComputeReduce クラス (ファイル名 compute\_reduce.cpp) のアルゴリズムを数学的に定式化する。実装詳細や変数名の説明を省き、教科書風に数式のみで示す。

■前提 計算は MPI 並列環境で行われ、各プロセス  $p$  が保持する局所粒子集合を

$$\mathcal{A}_p = \{i \mid i \text{ はプロセス } p \text{ が保持する原子}\}$$

とする。粒子  $i$  がユーザ定義グループ  $\mathcal{G}$  に属するかどうかを

$$g_i = \begin{cases} 1, & i \in \mathcal{G}, \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases} \quad (1)$$

で表す。ComputeReduce は  $m = 1, \dots, M$  で表される複数の入力系列  $\{a_i^{(m)}\}$  を受け取り、指定されたモードに応じて縮約量  $R^{(m)}$  を返す。

■ローカル縮約 各プロセス  $p$  におけるローカル縮約値  $\hat{R}_p^{(m)}$  は

$$\text{SUM: } \hat{R}_p^{(m)} = \sum_{i \in \mathcal{A}_p} g_i a_i^{(m)}, \quad (2)$$

$$\text{MIN: } \hat{R}_p^{(m)} = \min_{i \in \mathcal{A}_p, g_i=1} a_i^{(m)}, \quad (3)$$

$$\text{MAX: } \hat{R}_p^{(m)} = \max_{i \in \mathcal{A}_p, g_i=1} a_i^{(m)}, \quad (4)$$

$$\text{AVE: } \hat{R}_p^{(m)} = \sum_{i \in \mathcal{A}_p} g_i a_i^{(m)}, \quad \hat{N}_p = \sum_{i \in \mathcal{A}_p} g_i. \quad (5)$$

■並列縮約 (MPI 集約) 全プロセスを通じた最終値  $R^{(m)}$  は MPI 集約演算により

$$\text{SUM: } R^{(m)} = \sum_p \hat{R}_p^{(m)}, \quad (6)$$

$$\text{MIN: } R^{(m)} = \min_p \hat{R}_p^{(m)}, \quad (7)$$

$$\text{MAX: } R^{(m)} = \max_p \hat{R}_p^{(m)}, \quad (8)$$

$$\text{AVE: } R^{(m)} = \frac{\sum_p \hat{R}_p^{(m)}}{\sum_p \hat{N}_p}. \quad (9)$$

ここで MPI\_SUM, MPI\_MIN, MPI\_MAX が用いられる。

■置換 (replace) オプション MIN あるいは MAX モードで replace  $k\ell$  を指定した場合、まず列  $k$  に対して

$$(i^*, p^*) = \arg \min_{\substack{p \\ i \in \mathcal{A}_p}} a_i^{(k)} \quad \text{または} \quad (i^*, p^*) = \arg \max_{\substack{p \\ i \in \mathcal{A}_p}} a_i^{(k)} \quad (10)$$

を決定し、同一粒子  $i^*$  の列  $\ell$  の値

$$R^{(\ell)} = a_{i^*}^{(\ell)}. \quad (11)$$

■平均モードの計数関数 平均計算に必要な全数  $N_{\text{tot}}^{(m)}$  は

$$N_{\text{tot}}^{(m)} = \begin{cases} \sum_p \hat{N}_p, & \text{per-atom 量の場合,} \\ \sum_p n_{\text{loc},p}, & \text{local 量の場合,} \end{cases} \quad (12)$$

で与えられる。ここで  $n_{\text{loc},p}$  はプロセス  $p$  が保持する local 行（接触対など）の総数である。

■出力形態

- $M = 1$  のとき scalar (スカラー) を返す。
- $M > 1$  のとき vector (長さ  $M$  の列ベクトル) を返す。

SUM モードでは単位整合性を保つため、外部スケールフラグ `extscalar/extvector` を 1 に設定する。

■組み込み演算 combine 局所ループ内で用いられる基礎演算は

$$\text{SUM, AVE: } x \leftarrow x + y, \quad \text{MIN: } x \leftarrow \min(x, y), \quad \text{MAX: } x \leftarrow \max(x, y) \quad (13)$$

である ( $x$  は累積値,  $y$  は新規候補値)。

■メモリ使用量 原子スタイル変数評価に伴い確保される作業配列のメモリ量は

$$\text{bytes} = N_{\text{max}} \times \text{sizeof}(\text{double}), \quad (14)$$

ここで  $N_{\text{max}}$  はプロセスが確保した最大粒子数を表す。

以上により、ComputeReduce の全数式処理は式 (2)~(14) で完全に表現できる。