

“ComputeReduceRegion” の数式解説 (compute_reduce_region.cpp)

Open DEM Japan

2025年6月30日

本ファイルは、指定した領域 Ω_R 内に存在し、かつグループ G に属する粒子（あるいはローカル量）の集合に対して縮約（リダクション）演算を行い、SUM・MIN・MAX・AVE の各モードで単一のスカラー値を返す。以下ではコード変数の呼称を避け、純粋に数式でアルゴリズムを記述する。

■対象集合 粒子番号 i に対し、位置 $\mathbf{x}_i = (x_{i1}, x_{i2}, x_{i3})$ が領域 Ω_R に含まれ、かつグループ条件を満たすとき

$$i \in \mathcal{S} \iff (i \in G) \wedge (\mathbf{x}_i \in \Omega_R) \quad (1)$$

と定義し、 $N_{GR} = |\mathcal{S}|$ を粒子数とする。

■評価される物理量 縮約対象スカラー $q_i^{(m)}$ （添字 m はユーザ指定の列挙番号）は

$$q_i^{(m)} = \begin{cases} x_{ij} & (\text{座標 } j \text{ 成分}) \\ v_{ij} & (\text{速度 } j \text{ 成分}) \\ f_{ij} & (\text{力 } j \text{ 成分}) \\ c_i^{(m)} & (\text{他 Compute/Fix/Variable 由来}) \end{cases}$$

のいずれかである。ローカル量（LOCAL flavor）の場合は粒子添字 i をローカル行添字 l に読み替える。

■縮約演算 モード $\mathcal{M} \in \{\text{SUM}, \text{MIN}, \text{MAX}, \text{AVE}\}$ に対して縮約値 $\Phi^{(m)}$ を

$$\Phi_{\text{SUM}}^{(m)} = \sum_{i \in \mathcal{S}} q_i^{(m)} \quad (2)$$

$$\Phi_{\text{MIN}}^{(m)} = \min_{i \in \mathcal{S}} q_i^{(m)} \quad (3)$$

$$\Phi_{\text{MAX}}^{(m)} = \max_{i \in \mathcal{S}} q_i^{(m)} \quad (4)$$

$$\Phi_{\text{AVE}}^{(m)} = \frac{1}{N_{GR}} \sum_{i \in \mathcal{S}} q_i^{(m)} \quad (5)$$

と定義する。 $\Phi_{\text{MIN}}^{(m)}$ および $\Phi_{\text{MAX}}^{(m)}$ では、最小/最大値を取る粒子インデックス

$$I_{\text{ext}}^{(m)} = \arg \operatorname{ext}_{i \in \mathcal{S}} q_i^{(m)} \quad (\text{ext} = \text{min}, \text{max}) \quad (6)$$

も同時に記録される。

■combine 演算の抽象化 コード内部で用いられる補助関数 $\text{combine}(a, b)$ は、現在の累積値 a と候補値 b を受け取り

$$\text{combine}(a, b) = \begin{cases} a + b & \mathcal{M} = \text{SUM} \\ \min(a, b) & \mathcal{M} = \text{MIN} \\ \max(a, b) & \mathcal{M} = \text{MAX} \\ a + b & \mathcal{M} = \text{AVE} \end{cases} \quad (7)$$

を返す。AVE モードでは最終的に式 (5) の分母 N_{GR} で割る処理が外部（親クラス）で行われる。

■ローカル量の扱い LOCAL flavor では、プロセス p が保有する行数 n_p について

$$\Phi^{(m)} = \text{Reduce}_p \left[\sum_{\ell=1}^{n_p} q_{\ell}^{(m)} \right] \quad (8)$$

のようにまず各プロセスで部分和（または最小／最大）を計算し、MPI の Allreduce により全プロセスでグローバル縮約を行う。

■要素数の算出 メソッド $\text{count}()$ が返す対象要素数 $C^{(m)}$ は

$$C^{(m)} = \begin{cases} N_{GR} & \text{PERATOM flavor} \\ \sum_{p=1}^P n_p & \text{LOCAL flavor} \end{cases} \quad (9)$$

である (P : MPI プロセス数)。

■ $\text{flag} \geq 0$ の特例 引数 flag が非負の場合、式 (2)–(5) による縮約は行わず、単純に

$$\Phi^{(m)} = q_{\text{flag}}^{(m)} \quad (10)$$

を返す。これはデバッグや構造確認の用途に便利である。

以上により、ComputeReduceRegion クラスの振る舞いを解析的に定式化した。