

剛体プロパティ計算の数式解説 (“compute_rigid.cpp”)

Open DEM Japan

2025年6月30日

剛体マルチスフィア法 (Fixmultisphere) では、各剛体 (剛体番号を $b = 1, \dots, N_B$ とする) に対して質量や重心座標など任意次元のプロパティ

$$\mathbf{q}_b = (q_{b,1}, q_{b,2}, \dots, q_{b,m})^T \in \mathbb{R}^m \quad (1)$$

を定義している。ここで m はプロパティの成分数 (lenVec に対応) であり、 $m = 1$ のときはスカラー量となる。計算は MPI 並列環境で行われ、各ランク k が保持する剛体集合を \mathcal{B}_k とする。

(a) single モード

ユーザが特定 ID b^* を指定した場合、対象剛体が

$$b^* = \arg \max_b [\text{body-id} = b^*] \quad (2)$$

である。その値をすべてのランクで縮約し、プロパティの成分ごとに

$$\mathbf{q}^* = \sum_{k=1}^{N_{\text{proc}}} \sum_{b \in \mathcal{B}_k} \delta_{b,b^*} \mathbf{q}_b, \quad \delta_{b,b^*} = \begin{cases} 1 & (b = b^*), \\ 0 & (b \neq b^*) \end{cases} \quad (3)$$

を得る。 $m = 1$ なら \mathbf{q}^* の唯一の成分がスカラー出力、 $m > 1$ なら \mathbf{q}^* 全体がベクトル出力となる。

(b) local モード

剛体を特定しない場合、ランク k は

$$\mathcal{Q}_k = \{\mathbf{q}_b\}_{b \in \mathcal{B}_k} \quad (4)$$

をそのままローカル配列 ($m = 1$ ならベクトル、 $m > 1$ なら行列) として返す。縮約操作は行わず、各ランクが保持する剛体数 $|\mathcal{B}_k|$ に比例したデータ長を持つ。

(c) メモリ使用量

ローカルデータの総要素数は

$$M_k = \begin{cases} |\mathcal{B}_k| & (m = 1), \\ |\mathcal{B}_k| \times m & (m > 1) \end{cases} \quad (5)$$

であり、式 (5) が memory_usage() で報告される値に対応する。

(d) アルゴリズムの要点

- 剛体 ID とプロパティベクトルの対応写像 q_b を `Fixmultisphere` からポインタとして取得し, MPI ランク内で直接参照する.
- `single` モードでは式 (3) の縮約を `MPI_Sum_Scalar` / `MPI_Sum_Vector` で実装し, 全並列領域で一意な値を生成する.
- `local` モードでは式 (4) をそのまま格納し, 他ランクとの通信を伴わない.

以上により, `compute_rigid.cpp` は剛体群の任意プロパティを, **スカラー／ベクトル (単一剛体)** あるいは **ローカルリスト (全剛体)** として出力する汎用の縮約演算を実装している.