"Domain" クラスの数式解説（"domain_I.h"）

Open DEM Japan

2025 年 7 月 2 日

本ヘッダは，計算領域（`Domain` クラス）が**直方体ボックス** Ω とその**サブボックス** ω に対して行う種々の幾何判定をインライン実装している．ここでは**変数名の説明を省き**，判定ロジックを純粋な数式として記述する．二次元 (dimension = 2) やくさび領域（`wedge`）の特殊処理はコードと同様に割愛し，三次元直方体の場合を標準とする．

1. ドメイン内判定

全体ボックス

$$\Omega = [x_{\min}, x_{\max}] \times [y_{\min}, y_{\max}] \times [z_{\min}, z_{\max}]$$

に対し，座標 $\boldsymbol{r} = (x, y, z)$ が

$$\chi_\Omega(\boldsymbol{r}) = \begin{cases} 1 & x_{\min} \le x \le x_{\max} \ \wedge \ y_{\min} \le y \le y_{\max} \ \wedge \ z_{\min} \le z \le z_{\max}, \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \tag{1}$$

となるかを返すのが `is_in_domain` である．コードは (**??**) の論理積を高速に評価するだけである．

2. サブドメイン内判定

並列計算の各プロセスは

$$\omega = [x_{\mathrm{lo}}, x_{\mathrm{hi}}) \times [y_{\mathrm{lo}}, y_{\mathrm{hi}}) \times [z_{\mathrm{lo}}, z_{\mathrm{hi}})$$

を所有する．ただしボックス境界と一致する面では丸め誤差を避けるため $\varepsilon =$ `SMALL_DMBRDR` を加減し

$$\begin{aligned} x'_{\mathrm{lo}} &= x_{\mathrm{lo}} - \varepsilon && \text{if } x_{\mathrm{lo}} = x_{\min}, \\ x'_{\mathrm{hi}} &= x_{\mathrm{hi}} + \varepsilon && \text{if } x_{\mathrm{hi}} = x_{\max}, \end{aligned} \tag{2}$$

(y, z 方向も同様) と置く．よって `is_in_subdomain` は

$$\chi_\omega(\boldsymbol{r}) = \begin{cases} 1 & x'_{\mathrm{lo}} \le x < x'_{\mathrm{hi}} \ \wedge \ y'_{\mathrm{lo}} \le y < y'_{\mathrm{hi}} \ \wedge \ z'_{\mathrm{lo}} \le z < z'_{\mathrm{hi}}, \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \tag{3}$$

を返す．開区間を採用することで隣接プロセスとの重複を排除している．

3. 拡張サブドメイン判定

粒子挿入時には「拡張サブドメイン」$\tilde{\omega}$ への包含が必要である．通信位相格子を $\boldsymbol{p} = (p_x, p_y, p_z)$，自身の格子座標を $\boldsymbol{m} = (m_x, m_y, m_z)$ とし，各成分について

$$\tilde{\mathcal{C}}_i(\boldsymbol{r}) = \begin{cases} x_i \ge x_{\mathrm{lo},i} & m_i = p_i - 1, \\ x_i \le x_{\mathrm{hi},i} & m_i = 0, \\ x_{\mathrm{lo},i} \le x_i < x_{\mathrm{hi},i} & \text{otherwise} \end{cases} \tag{4}$$

$(i=x,y,z)$ を満たすとき

$$\chi_{\tilde{\omega}}(\boldsymbol{r}) = \prod_{i=x,y,z} \tilde{\mathcal{C}}_i(\boldsymbol{r}) \tag{5}$$

と定義し，is_in_extended_subdomain は $\chi_{\tilde{\omega}}(\boldsymbol{r})$ を返す．

4. サブボックス境界距離チェック

許容距離ベクトル $\boldsymbol{d} = (d_x, d_y, d_z)$ に対して

$$\delta_i^{\mathrm{lo}} = |x_i - x_{\mathrm{lo},i}|, \quad \delta_i^{\mathrm{hi}} = |x_i - x_{\mathrm{hi},i}|, \quad i = x, y, z, \tag{6}$$

すべて $\delta_i^{\mathrm{lo}} \geq d_i \land \delta_i^{\mathrm{hi}} \geq d_i$ であれば真 (true) を返すのが check_dist_subbox_borders である．これは粒子が境界から安全距離 $\boldsymbol{d}$ 以上離れていることを確認する判定である．

5. 最小サブボックス幅

$$\boldsymbol{\Delta} = (\Delta_x, \Delta_y, \Delta_z) = (x_{\mathrm{hi}} - x_{\mathrm{lo}}, y_{\mathrm{hi}} - y_{\mathrm{lo}}, z_{\mathrm{hi}} - z_{\mathrm{lo}}), \tag{7}$$

$$\min\_i\big(\Delta_i\big) = \min\{\Delta_x, \Delta_y, \Delta_z\} \tag{8}$$

を求め，その値と対応する次元インデックス i を返すのが min_subbox_extent である．

6. 周期境界ゴースト判定

隣接探索カットオフを $r_c =$ cutneighmax とするとき，粒子位置 $\boldsymbol{x}$ が

$$\Big(x_i < x_{\min} + r_c \ \lor \ x_i > x_{\max} - r_c\Big) \ \land \ (\text{軸 } i \text{ が周期的}) \tag{9}$$

のいずれかを満たし，かつローカル粒子でないとき is_periodic_ghost は 1 を返す．式 (**??**) は周期境界近傍に存在しうる**ゴースト粒子** の幾何条件である．

7. 所有・代表粒子判定

粒子タグによる全域一意マップ $\mathrm{map} : \mathrm{tag} \mapsto \mathrm{index}$ を仮定する．粒子 i が

$$i = \mathrm{map}\big(\mathrm{tag}(i)\big) \tag{10}$$

を満たせば is_owned_or_first_ghost は true を返す．すなわち (**??**) は「所有粒子または最初のゴースト表現」であることを意味する．

8. まとめ

本ヘッダに実装された各インライン関数は，集合指示関数 χ の形で書き下せる簡潔な論理判定 (**??**)–(**??**) を高速に評価している．これらは離散要素法シミュレーションにおける粒子分配・同期の根幹であり，数式として眺めれば「領域分割アルゴリズムの特性関数」であると解釈できる．