

DumpDecompositionVTK の数式解説 (dump_decomposition_vtk.cpp)

Open DEM Japan

2025 年 7 月 2 日

本ファイルは、並列 DEM 計算における **空間分割領域** を可視化する VTK/VTU ファイルを書き出す機能を実装している。以下では、領域分割の数学的構造とダンプ手順を式で整理する。

粒子計算領域を直方体

$$\Omega = [x_{\min}, x_{\max}] \times [y_{\min}, y_{\max}] \times [z_{\min}, z_{\max}] \quad (1)$$

とし、 P 並列プロセスによって

$$\Omega = \bigcup_{p=0}^{P-1} \Omega_p, \quad \Omega_p \cap \Omega_q = \emptyset \ (p \neq q) \quad (2)$$

と分割されているとする。各サブ領域 Ω_p は **軸平行直方体** であり、

$$\mathbf{x}_{\text{lo}}^{(p)} = (x_{\min}^{(p)}, y_{\min}^{(p)}, z_{\min}^{(p)})^T, \quad (3a)$$

$$\mathbf{x}_{\text{hi}}^{(p)} = (x_{\max}^{(p)}, y_{\max}^{(p)}, z_{\max}^{(p)})^T, \quad (3b)$$

で表現される。

■1. 領域境界の収集 各プロセス p は二つのベクトル

$$\mathbf{s}^{(p)} = (x_{\min}^{(p)}, x_{\max}^{(p)}), \quad \mathbf{t}^{(p)} = (y_{\min}^{(p)}, y_{\max}^{(p)}), \quad \mathbf{u}^{(p)} = (z_{\min}^{(p)}, z_{\max}^{(p)}) \quad (4)$$

を MPI_Gather でルート（ここでは $p = 0$ ）に送信する。ルートは

$$\mathbf{s} = (\mathbf{s}^{(0)}, \dots, \mathbf{s}^{(P-1)}), \quad \mathbf{t}, \quad \mathbf{u}$$

を受け取り、それぞれ $2P$ 要素の配列

$$x_data, y_data, z_data$$

に格納する。

■2. セル頂点座標 ルートはプロセス p に対して

$$\mathcal{C}^{(p)} = \{ (x_i, y_j, z_k) \mid i, j, k \in \{0, 1\} \} \quad (5)$$

なる 8 個の頂点を生成する。ここで

$$(x_0, x_1) = (x_{\min}^{(p)}, x_{\max}^{(p)}), \quad (y_0, y_1) = (y_{\min}^{(p)}, y_{\max}^{(p)}), \quad (z_0, z_1) = (z_{\min}^{(p)}, z_{\max}^{(p)}).$$

頂点インデックスは

$$\text{idx}(i, j, k) = 8p + 4i + 2j + k \quad (i, j, k \in \{0, 1\}) \quad (6)$$

とし, VTK Voxel 要素の接続情報

$$E^{(p)} = [\text{idx}(0, 0, 0), \text{idx}(0, 0, 1), \dots, \text{idx}(1, 1, 1)] \quad (7)$$

を構築する。

■3. 属性データ 各サブ領域には

$$n_{\text{local}}^{(p)} = \text{プロセス } p \text{ が保持する粒子数}, \quad (8a)$$

$$\text{proc}^{(p)} = p \quad (8b)$$

をセル属性として付与する。すなわち

$$\text{nlocal}[p] = n_{\text{local}}^{(p)}, \quad \text{procID}[p] = p. \quad (9)$$

■4. VTK / VTU 出力 頂点集合 $\mathcal{V} = \bigcup_{p=0}^{P-1} \mathcal{C}^{(p)}$ とセル集合 $\mathcal{E} = \{E^{(0)}, \dots, E^{(P-1)}\}$ より **非構造格子**

$$G = (\mathcal{V}, \mathcal{E}) \quad (10)$$

を生成する。ファイル形式に応じて

$$\text{output} = \begin{cases} \text{write_vtu}(G, \text{file}) & (\text{拡張子 } .\text{vtu}) \\ \text{write_vtk_unstructured_grid}(G, \text{file}) & (\text{拡張子 } .\text{vtk}) \end{cases} \quad (11)$$

を呼び出す。

■5. 時間ステップ重複防止 時刻 t_n での書き出しが完了すると, ルートは `lasttimestep` を t_n に更新する。次の呼び出し時に

$$t_{\text{current}} = \text{lasttimestep} \quad (12)$$

ならば処理をスキップし, 重複出力を防ぐ。

■6. 制約条件

$$\text{triclinic} = 0, \quad \text{binary} = \text{false} \quad (13)$$

でなければエラー終了する。前者は **斜方格子** に未対応, 後者は VTK が ASCII / XML テキスト出力を前提とするためである。

以上の手順により, 並列 DEM シミュレーションの **空間分割構造** と **粒子分布密度** $n_{\text{local}}^{(p)}$ を一目で把握できる可視化ファイルが生成される。