

「粒子数・質量統計」の数式解説 (compute_nparticles_tracer_region.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 `compute_nparticles_tracer_region.cpp` が実装するアルゴリズムを数式で説明する。

前提：

- 系に存在する粒子総数を N とする。
- 粒子 i の位置を $\mathbf{r}_i = (x_i, y_i, z_i)$, 質量を m_i とする。
- 粒子 i がユーザ定義グループに属するかどうかを示すブール値を $g_i \in \{0, 1\}$ とする。
- トレーサーマーカー (`fix property/atom/tracer` が付与するスカラ値) を $\chi_i \in \{0, 1\}$ とする。
- 対象領域 $\mathcal{R} \subset \mathbb{R}^3$ に対し, 指示関数を

$$H_{\mathcal{R}}(\mathbf{r}) = \begin{cases} 1 & (\mathbf{r} \in \mathcal{R}) \\ 0 & (\text{それ以外}) \end{cases}$$

と定める。

- 周期境界の“イメージ”番号フィルタが有効な場合, 対象次元 $\alpha \in \{x, y, z\}$ に対して粒子 i のイメージ番号を $I_{i\alpha} \in \mathbb{Z}$ と置き, 指示関数

$$\delta_{\text{img}}(I_{i\alpha}) = \begin{cases} 1 & (I_{i\alpha} = I^* \text{ または } I^* = -1) \\ 0 & (\text{それ以外}) \end{cases}$$

を導入する (I^* はユーザ指定値, -1 は「すべて」を意味する). フィルタを使用しない場合は $\delta_{\text{img}} \equiv 1$ とする。

計数量の定義：

領域 \mathcal{R} に存在する全粒子数 N_{tot} , マーク粒子数 N_{mark} , 全質量 M_{tot} , マーク質量 M_{mark} を次式で定義

する：

$$N_{\text{tot}} = \sum_{i=1}^N g_i H_{\mathcal{R}}(\mathbf{r}_i) \delta_{\text{img}}(I_{i\alpha}), \quad (1)$$

$$N_{\text{mark}} = \sum_{i=1}^N g_i H_{\mathcal{R}}(\mathbf{r}_i) \delta_{\text{img}}(I_{i\alpha}) \chi_i, \quad (2)$$

$$M_{\text{tot}} = \sum_{i=1}^N g_i H_{\mathcal{R}}(\mathbf{r}_i) \delta_{\text{img}}(I_{i\alpha}) m_i, \quad (3)$$

$$M_{\text{mark}} = \sum_{i=1}^N g_i H_{\mathcal{R}}(\mathbf{r}_i) \delta_{\text{img}}(I_{i\alpha}) \chi_i m_i. \quad (4)$$

並列計算と MPI 還元：

実装は粒子を各 MPI プロセスに分散させており、式 (??)–(??) の部分和を各プロセスで評価したのち、MPI ALLREDUCE (コード中では MPI_Sum_Scalar) により全球和を得ている。これにより時間積分ステップ t における

$$\mathbf{v}(t) = (N_{\text{tot}}, N_{\text{mark}}, M_{\text{tot}}, M_{\text{mark}}) \quad (5)$$

が `compute` の返却ベクトルとして出力される。

マーカーリセット規則：

マスクカウント (式 (??), (??)) を評価した直後、ユーザ設定 `reset_marker = yes` のときは

$$\chi_i \leftarrow 0 \quad \text{if} \quad g_i H_{\mathcal{R}}(\mathbf{r}_i) \delta_{\text{img}}(I_{i\alpha}) \chi_i = 1 \quad (6)$$

を各粒子に適用し、次回呼び出しからマーカーが再び立つまでマーク粒子数・質量への寄与を停止させる。

まとめ：

`compute nparticles/tracer/region` は領域 \mathcal{R} に関する粒子統計ベクトル (??) をステップ毎に提供し、オプションでイメージ番号フィルタ (??)–(??) とマーカーリセット (??) を組み合わせることで、滞留時間解析や流動追跡に必要な局所粒子数・質量情報を取得可能にしている。