

”アンサンブル制御モデル”の数式解説 (“ensemble.f”)

Open DEM Japan

2025年10月12日

本プログラムは熱力学アンサンブルを指定し、系の統計的振る舞いを制御する。例えば一定温度アンサンブルでは分配関数

$$Z = \int \exp\left(-\frac{H(\mathbf{p}, \mathbf{q})}{k_B T}\right) d\mathbf{p} d\mathbf{q} \quad (1)$$

に基づき揺らぎの大きさが決定される。目標温度 T_0 と実測温度 T の偏差は緩和式

$$\frac{dT}{dt} = -\frac{1}{\tau_T}(T - T_0) \quad (2)$$

で減衰させ、統計的平衡に近づける。アンサンブル種別に応じて圧力制御や体積変動も同様の緩和則で処理される。