

”RESPA 分割力モデル” の数式解説 (“force_respa.f”)

Open DEM Japan

2025 年 10 月 12 日

本プログラムは RESPA 法のために力を多重時間スケールに分割する。力は高速成分 \mathbf{F}^{fast} と低速成分 \mathbf{F}^{slow} に分けられ

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^{\text{fast}} + \mathbf{F}^{\text{slow}} \quad (1)$$

と表される。高速成分は小さな時間刻み δt で積分され、低速成分は大きな刻み $\Delta t = m\delta t$ で更新される。全体の更新は

$$\mathbf{p}(t + \Delta t) = \mathbf{p}(t) + \sum_{k=0}^{m-1} \mathbf{F}^{\text{fast}}(t_k)\delta t + \mathbf{F}^{\text{slow}}(t + \frac{1}{2}\Delta t)\Delta t \quad (2)$$

として実装され、高周波ノイズを抑えながら精度を確保する。