

# ComputeTemp の数式解説 (compute\_temp.cpp)

Open DEM Japan

2025年7月2日

粒子群  $G = \{1, \dots, N\}$  (粒子  $i$  の質量  $m_i$ , 速度  $\mathbf{v}_i = (v_{ix}, v_{iy}, v_{iz})$ ) について, 速度バイアスを一切除かずに運動エネルギーから実効温度を評価する。

以下, 系次元を  $D \in \{2, 3\}$  とする。

$$\text{自由度: } d = DN - d_{\text{extra}} - d_{\text{fix}} \quad (1)$$

ここで  $d_{\text{extra}}$  はユーザ指定自由度,  $d_{\text{fix}}$  は fix によって除外される自由度である。

## ■運動エネルギーの総和

$$E_k = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N m_i \mathbf{v}_i^2 = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N m_i (v_{ix}^2 + v_{iy}^2 + v_{iz}^2). \quad (2)$$

コードでは  $\mathbf{v}_i^2$  に質量を掛けた量をプロセスごとに加算し, MPI で全並列領域を総和している。

## ■温度

$$T = \frac{2E_k}{dk_B} = \frac{1}{dk_B} \sum_{i=1}^N m_i \mathbf{v}_i^2. \quad (3)$$

数値実装では

$$\text{tfactor} = \frac{m v v 2e}{d k_B},$$
$$T = \text{tfactor} \times \sum_{i=1}^N m_i \mathbf{v}_i^2,$$

と計算される ( $m v v 2e$  は単位換算係数)。

## ■速度テンソル出力

$$\mathbf{K} = \sum_{i=1}^N m_i \mathbf{v}_i \otimes \mathbf{v}_i = \begin{pmatrix} K_{xx} & K_{xy} & K_{xz} \\ K_{yx} & K_{yy} & K_{yz} \\ K_{zx} & K_{zy} & K_{zz} \end{pmatrix}, \quad (4)$$

$$K_{xx} = \sum_{i=1}^N m_i v_{ix}^2, \quad K_{yy} = \sum_{i=1}^N m_i v_{iy}^2, \quad K_{zz} = \sum_{i=1}^N m_i v_{iz}^2, \quad (5)$$

$$K_{xy} = \sum_{i=1}^N m_i v_{ix} v_{iy}, \quad K_{xz} = \sum_{i=1}^N m_i v_{ix} v_{iz}, \quad K_{yz} = \sum_{i=1}^N m_i v_{iy} v_{iz}. \quad (6)$$

6成分 ( $K_{xx}, K_{yy}, K_{zz}, K_{xy}, K_{xz}, K_{yz}$ ) を `vector` として返し, `mvv2e` を掛けたエネルギー密度単位で報告する。

■特徴 式 (??) は古典統計力学の等方系理想気体温度定義に対応し, 質量重み付き速度分散のみで決定されるため, `compute temp/profile` のような流れ速度補正は行わない。そのため回転系やせん断流れではマクロ運動が温度に上乘せされる点に注意が必要である。