

”COM 温度モデル” の数式解説 (compute_temp_com.cpp)

Open DEM Japan

2025 年 7 月 2 日

離散要素法 (DEM) シミュレーションにおいて粒子群 G (LAMMPS の `group`) の速度分布から中心 - 質量運動を差し引いた「熱速度」を用いて温度および運動量テンソル (いわゆる運動学的応力) を算出する実装が `compute_temp_com.cpp` である。以下ではプログラムの各計算を連続した数式としてまとめる。なお LAMMPS 内部単位系からエネルギー単位への換算係数を

$$\lambda = \text{mvv}2\text{e}$$

と置く。

まず粒子 $i \in G$ の質量を m_i , 速度を \mathbf{v}_i とすると, 全質量 M と中心 - 質量速度 \mathbf{v}_{cm} は

$$M = \sum_{i \in G} m_i, \quad (1)$$

$$\mathbf{v}_{\text{cm}} = \frac{1}{M} \sum_{i \in G} m_i \mathbf{v}_i. \quad (2)$$

各粒子の熱速度 (バイアス除去後速度) は

$$\mathbf{c}_i = \mathbf{v}_i - \mathbf{v}_{\text{cm}}. \quad (3)$$

熱運動エネルギー K は

$$K = \frac{1}{2} \sum_{i \in G} m_i \mathbf{c}_i \cdot \mathbf{c}_i. \quad (4)$$

自由度は

$$\text{DOF} = dN - n_{\text{extra}} - n_{\text{fix}}, \quad (5)$$

ただし d は空間次元 (2 または 3), $N = |G|$, n_{extra} は系外拘束 (例えば回転拘束など) による自由度削減, n_{fix} は LAMMPS の `fix` コマンドが課す拘束に伴う削減量である。DOF ≤ 0 の場合は温度を 0 とみなす。

ボルツマン定数 k_B を用い, 群 G の瞬時温度 T は

$$T = \frac{2\lambda K}{\text{DOF} k_B} = \frac{\lambda}{\text{DOF} k_B} \sum_{i \in G} m_i \mathbf{c}_i \cdot \mathbf{c}_i. \quad (6)$$

同時に `compute_vector` が返す 6 成分ベクトルは, 熱速度二次モーメント

$$\mathcal{K}_{\alpha\beta} = \lambda \sum_{i \in G} m_i c_{i\alpha} c_{i\beta}, \quad (\alpha, \beta) \in \{x, y, z\}, \quad (7)$$

の対称テンソル ($\alpha \leq \beta$) のうち

$$(\mathcal{K}_{xx}, \mathcal{K}_{yy}, \mathcal{K}_{zz}, \mathcal{K}_{xy}, \mathcal{K}_{xz}, \mathcal{K}_{yz})$$

を並べたものである。対角成分は系の温度と直接対応し, 非対角成分はせん断運動に由来する。

■バイアスの除去と復元 式 (??) は実装上

$$\mathbf{v}_i \mapsto \mathbf{v}_i - \mathbf{v}_{\text{cm}}$$

として `remove_bias()` や `remove_bias_all()` で行われる。計算後に

$$\mathbf{v}_i \mapsto \mathbf{v}_i + \mathbf{v}_{\text{cm}}$$

と戻すのが `restore_bias()` および `restore_bias_all()` である。温度や応力テンソルの評価自体はバイアス除去後の熱速度 c_i のみを用い、粒子群の並列分散計算結果を `MPI_Allreduce` で集約して式 (??), (??) を完成させる。

以上が `compute_temp_com.cpp` で実装されている中心-質量系温度および運動量テンソル評価の数式的要約である。