

# ”ComputeTempPartial” の数式解説 (compute\_temp\_partial.cpp)

Open DEM Japan

2025年7月2日

本ファイルは系の温度を**速度成分の一部のみ**に基づいて算出するアルゴリズムを実装している。  $x \cdot y \cdot z$  の各方向に対して選択フラグ

$$s_\alpha \in \{0, 1\} \quad (\alpha = x, y, z)$$

を与え、  $s_\alpha = 1$  の成分だけを統計量に含める。二次元系 ( $D = 2$ ) で  $s_z = 1$  とすることは許されない。以下では粒子数を  $N$ 、考慮する成分の数を

$$n_{\text{per}} = s_x + s_y + s_z \quad (1)$$

とする。

■(1) **自由度** 等温運動に寄与する**自由度**は拘束  $S$  (例: SHAKE) の影響を受け

$$\text{DOF} = n_{\text{per}} N - \frac{n_{\text{per}}}{D} S - \Delta, \quad (2)$$

となる。ここで  $\Delta$  はユーザ指定の追加自由度である。

■(2) **部分運動エネルギー** 粒子  $i$  の質量を  $m_i$ 、速度を  $\mathbf{v}_i = (v_{ix}, v_{iy}, v_{iz})$  とすると、選択成分のみから構成される**運動エネルギー和**は

$$K = c \sum_{i=1}^N m_i (s_x v_{ix}^2 + s_y v_{iy}^2 + s_z v_{iz}^2), \quad (3)$$

で定義される。係数  $c = \text{mvv}2e$  は単位変換及び  $\frac{1}{2}$  を含む定数である。

■(3) **部分温度** 温度はエネルギー等分配則に基づき

$$T = \frac{K}{k_B \text{DOF}} = \frac{c}{k_B \text{DOF}} \sum_{i=1}^N m_i (s_x v_{ix}^2 + s_y v_{iy}^2 + s_z v_{iz}^2). \quad (4)$$

実装では係数

$$f_T = \frac{c}{k_B \text{DOF}} \quad (5)$$

を事前に計算し、(3) を MPI で全並列和してから  $T = f_T K$  とする。

■(4) **拡張ベクトル量** 併せて六成分

$$(K_{xx}, K_{yy}, K_{zz}, K_{xy}, K_{xz}, K_{yz}) \quad (6)$$

を生成し、それぞれ

$$K_{\alpha\beta} = c \sum_{i=1}^N m_i s_{\alpha} s_{\beta} v_{i\alpha} v_{i\beta}, \quad (\alpha, \beta \in \{x, y, z\}, \alpha \leq \beta) \quad (7)$$

で与える。  $s_{\alpha} s_{\beta}$  により不要な項は自動的に消滅する。

■(5) バイアス除去と復元 非対象成分 ( $s_{\alpha} = 0$ ) を温度計算から除く際には

$$v_{i\alpha} \leftarrow 0$$

と一旦置き換えて (3) を評価し、その後シミュレーション本来の運動を保つために元の速度を復元する。この操作は粒子毎あるいは全粒子同時に行えるよう 2 種類の関数で実装されている。

■(6) メモリ使用量 バイアス速度保存用の配列は

$$3 N_{\max} \text{ doubles} \quad (7)$$

を要し、本体では変数 `maxbias` により動的に確保・解放される。

以上より、本クラスは特定方向成分のみに基づく**部分温度**

$$T = \frac{c}{k_B \text{DOF}} \sum_i m_i (s_x v_{ix}^2 + s_y v_{iy}^2 + s_z v_{iz}^2) \quad (7)$$

および対応する運動エネルギーテンソル (7) を並列計算することで、剪断流や異方的駆動系の統計力学解析に供している。