

ComputeTempProfile の数式解説 (compute_temp_profile.cpp)

Open DEM Japan

2025年7月2日

粒子集合 $G = \{1, \dots, N\}$ (質量 m_i , 位置 $\mathbf{x}_i = (x_i, y_i, z_i)$, 速度 $\mathbf{v}_i = (v_{ix}, v_{iy}, v_{iz})$) に対し, 空間を $n_x \times n_y \times n_z$ の直方体ビン ($n_x, n_y, n_z \geq 1$) へ分割し, 各ビン内の流れ速度を取り除いた **熱速度** から温度を評価する。

■(1) **ビン割り当て** 系サイズを $\mathbf{L} = (L_x, L_y, L_z)$ とし, ビン幅を $\Delta = (\Delta_x, \Delta_y, \Delta_z)$,

$$\Delta_x = \frac{L_x}{n_x}, \quad \Delta_y = \frac{L_y}{n_y}, \quad \Delta_z = \frac{L_z}{n_z}. \quad (1)$$

粒子 i のビン番号 (p, q, r) は

$$p = \left\lfloor \frac{x_i - x_{\min}}{\Delta_x} \right\rfloor, \quad q = \left\lfloor \frac{y_i - y_{\min}}{\Delta_y} \right\rfloor, \quad r = \left\lfloor \frac{z_i - z_{\min}}{\Delta_z} \right\rfloor, \quad (2)$$

各軸の周期境界を考慮し $0 \leq p < n_x$ などへ折り込む。1次元インデックス $b = rn_x n_y + qn_x + p$ とする (総ビン数 $n_b = n_x n_y n_z$)。

■(2) **ビン質量と速度平均** ビン b の総質量と粒子数

$$M_b = \sum_{i \in b} m_i, \quad N_b = \sum_{i \in b} 1 \quad (3)$$

を用いて, 座標軸 $\alpha \in \{x, y, z\}$ について “流れ” 速度 (質量重み付き平均)

$$\bar{v}_{b\alpha} = \begin{cases} \frac{1}{M_b} \sum_{i \in b} m_i v_{i\alpha}, & \text{if 軸 } \alpha \text{ を補正 (flag=1)} \\ 0, & \text{if flag=0} \end{cases} \quad (4)$$

を定義する (コード中 `xflag, yflag, zflag`)。

■(3) **熱速度** 粒子 i が属するビン $b(i)$ で

$$w_{i\alpha} = v_{i\alpha} - \bar{v}_{b(i)\alpha}. \quad (5)$$

■(4) **スカラー温度 (全系)** 並進自由度 $d = DN - d_{\text{fix}} - d_{\text{extra}}^{*1}$ が正のとき,

$$T = \frac{2}{dk_B} \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} m_i \mathbf{w}_i^2 = \frac{1}{dk_B} \sum_{i=1}^N m_i \mathbf{w}_i^2, \quad (6)$$

ここで $\mathbf{w}_i^2 = w_{ix}^2 + w_{iy}^2 + w_{iz}^2$ 。コードでは単位系変換係数 `mvv2e` を掛けた後, MPI で全並列領域を総和する。

*1 D は次元 (2 又は 3), d_{fix} は外部 `fix` により束縛された自由度, d_{extra} はユーザ指定自由度である。

■(5) 応力テンソル形式 (out = tensor)

$$\mathbf{K} = \sum_{i=1}^N m_i \mathbf{w}_i \otimes \mathbf{w}_i = \begin{pmatrix} K_{xx} & K_{xy} & K_{xz} \\ K_{yx} & K_{yy} & K_{yz} \\ K_{zx} & K_{zy} & K_{zz} \end{pmatrix}, \quad (7)$$

$$K_{\alpha\beta} = \sum_{i=1}^N m_i w_{i\alpha} w_{i\beta}. \quad (8)$$

6 成分 ($K_{xx}, K_{yy}, K_{zz}, K_{xy}, K_{xz}, K_{yz}$) がベクトル出力として報告される。

■(6) ビン温度分布 (out = bin) ビン b ごとに

$$d_b = DN_b - d_{\text{extra}}, \quad (9)$$

$$T_b = \begin{cases} \frac{1}{d_b k_B} \sum_{i \in b} m_i w_i^2, & N_b > 0, \\ 0, & N_b = 0. \end{cases} \quad (10)$$

結果 (N_b, T_b) が二列配列として出力される。

■(7) まとめ 本手法は流動場を質量重み付き平均速度で補正し、残差速度に基づく実効温度をスカラー、全テンソル、空間分解プロファイルの三形式で評価する。ビン幅 Δ を系長に比例させることで、伸縮境界条件や箱サイズ変化にも自動追従する実装となっている。