

Temp/Region モデルの数式解説 (compute_temp_region.cpp)

Open DEM Japan

2025 年 7 月 2 日

対象領域 $\mathcal{R} \subset \mathbb{R}^3$ を指示関数

$$\chi_{\mathcal{R}}(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1, & \mathbf{x} \in \mathcal{R}, \\ 0, & \mathbf{x} \notin \mathcal{R} \end{cases} \quad (1)$$

で表す. 原子 i の位置を \mathbf{x}_i , 速度を \mathbf{v}_i , 質量を m_i とすると, 領域内原子集合

$$S = \{i \mid \chi_{\mathcal{R}}(\mathbf{x}_i) = 1\} \quad (2)$$

に対し運動エネルギーは

$$K = \frac{1}{2} \sum_{i \in S} m_i \|\mathbf{v}_i\|^2. \quad (3)$$

領域内原子数を $N_S = |S|$ とし, 自由度を

$$d_{\text{of}} = D N_S - \text{extra_dof}, \quad (D = 2 \text{ または } 3) \quad (4)$$

と定義する. ここで `extra_dof` は固定壁や拘束による減算分である. 自由度が正のとき温度は

$$T = \frac{2K}{d_{\text{of}} k_{\text{B}}}, \quad (5)$$

で与えられる. 実装では質量速度換算係数 `mvv2e` を用い

$$T = \frac{\text{mvv2e}}{d_{\text{of}} k_{\text{B}}} \sum_{i \in S} m_i \|\mathbf{v}_i\|^2, \quad (6)$$

を計算する.

運動モーメント (温度テンソル) は

$$\Theta = \sum_{i \in S} m_i \mathbf{v}_i \otimes \mathbf{v}_i = \begin{bmatrix} \Theta_{xx} & \Theta_{xy} & \Theta_{xz} \\ \Theta_{yx} & \Theta_{yy} & \Theta_{yz} \\ \Theta_{zx} & \Theta_{zy} & \Theta_{zz} \end{bmatrix}, \quad (7)$$

$$\Theta_{\alpha\beta} = \sum_{i \in S} m_i v_{i,\alpha} v_{i,\beta}, \quad \alpha, \beta \in \{x, y, z\}, \quad (8)$$

であり, コードでは六成分 $\{\Theta_{xx}, \Theta_{yy}, \Theta_{zz}, \Theta_{xy}, \Theta_{xz}, \Theta_{yz}\}$ に `mvv2e` を掛けた値を返す.

速度バイアス処理 温度計算に寄与しない原子 ($\chi_{\mathcal{R}} = 0$) は瞬時に $\mathbf{v}_i \leftarrow \mathbf{0}$ と置き換えられ, 計算後に元の速度が復元される. ゆえに式 (3) – (8) では領域外原子が自動的に無視される. MPI により並列ノード間で $\sum_{i \in S}$ の集約を行う点も合わせて留意されたい.

以上が `compute_temp_region.cpp` の数式的定式化である.