

”速度自己相関関数モデル”の数式解説 (compute_vacf.cpp)

Open DEM Japan

2025年7月2日

分子・粒子システムにおける速度自己相関関数

$$C_{vv}(t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathbf{v}_i(t) \cdot \mathbf{v}_i(0)$$

は、運動量輸送や拡散係数の評価に不可欠である。compute_vacf.cpp はシミュレーション開始時刻（厳密には compute コマンドが発行されたタイムステップ）を $t = 0$ とし、当該時刻の速度

$$\mathbf{v}_i^{(0)} = (v_{ix}^{(0)}, v_{iy}^{(0)}, v_{iz}^{(0)}) \quad (1)$$

を FixStore に保存する。任意の時刻 t における粒子速度 $\mathbf{v}_i(t) = (v_{ix}(t), v_{iy}(t), v_{iz}(t))$ との内積を取り、 x, y, z 成分別および全成分和の 4 量

$$C_x(t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N v_{ix}(t) v_{ix}^{(0)}, \quad (2)$$

$$C_y(t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N v_{iy}(t) v_{iy}^{(0)}, \quad (3)$$

$$C_z(t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N v_{iz}(t) v_{iz}^{(0)}, \quad (4)$$

$$C_{vv}(t) = C_x(t) + C_y(t) + C_z(t) \quad (5)$$

として時系列データを出力する。ここで N は計算対象グループ G の粒子数である (`nvacf = |G|`)。

プログラムの流れを数式で要約すると次の通りである。まず $t = 0$ に式 (??) を保存。以降のステップで $\mathbf{v}_i(t) \cdot \mathbf{v}_i^{(0)}$ を粒子ごとに計算し、

$$S_\alpha(t) = \sum_{i \in G} v_{i\alpha}(t) v_{i\alpha}^{(0)}, \quad \alpha \in \{x, y, z\} \quad (6)$$

をプロセス内で加算。並列計算では MPI_Allreduce により $S_\alpha(t)$ を全プロセスで総和したのち、

$$C_\alpha(t) = \frac{S_\alpha(t)}{N}, \quad C_{vv}(t) = \sum_{\alpha=x,y,z} C_\alpha(t) \quad (7)$$

を得て、

$$(C_x(t), C_y(t), C_z(t), C_{vv}(t))$$

の 4 成分ベクトルとして出力する。質量やエネルギー単位換算は介在せず、純粋に速度の内積を平均した量であるため、拡散係数 D のグリーン=クボ公式

$$D = \int_0^{\infty} C_{vv}(t) dt \quad (8)$$

に直接用いることができる。

以上が `compute_vacf.cpp` に実装された速度自己相関関数計算の数学的構造である。