**atoms：**原子信息结构体数组

**MAXCELLNUM：**常数，元胞中原子数量最大值

**cellnum：**本进程中的总元胞数量

**cellatom：**各元胞中原子数量的数组

**myKe：**本进程中原子总动能

**globalKe：**整个体系原子总动能

**T：**温度

**N：**整个体系原子总数量

**kb：**波尔兹曼常数

**m：**原子的质量

1:double myKe=0.0, globalKe=0.0, temp, T=0.0;

2:

3:for(int i=0 ; i < cellnum; i++ )

4:for(int j= MAXCELLNUM\*i ; j < cellatom[i] + MAXCELLNUM\*i ; j++)

5:{

6: **temp = 0.5 \* m \* atoms[j].vel \* atoms[j].vel;**

7: **myKe = myKe + temp;**

8:}

9:

10: **MPI\_Allreduce(&myKe, &globalKe, 1,**

**MPI\_DOUBLE, MPI\_SUM, MPI\_COMM\_...);**

11:

12: **T = 2 \* globalKe / ( 3 \* N \* kb);**