

”熱力学解析モデル”の数式解説 (“thermo.f”)

Open DEM Japan

2025年10月12日

本プログラムは熱力学量を計算し、エネルギー収支を解析する。温度は運動エネルギーから

$$T = \frac{2}{3Nk_B} \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} m_i \|\mathbf{v}_i\|^2 \quad (1)$$

と求められ、圧力はビリアル定理

$$p = \frac{Nk_B T}{V} + \frac{1}{3V} \sum_{i<j} \mathbf{r}_{ij} \cdot \mathbf{F}_{ij} \quad (2)$$

から評価される。これらの量は時間平均され、熱力学的一貫性が検証される。