

”ComputeTempSphere” の数式解説 (compute_temp_sphere.cpp)

Open DEM Japan

2025 年 7 月 2 日

粒子が有限半径 r_i をもつ剛体球として扱われる場合、並進運動と回転運動の両方が統計温度に寄与する。
本クラスはユーザ指定モード

$$\text{mode} = \begin{cases} \text{ALL} & : \text{並進+回転} \\ \text{ROTATE} & : \text{回転のみ} \end{cases}$$

に応じ、球の等方慣性モーメント

$$I_i = \frac{2}{5} m_i r_i^2 \quad (1)$$

を用いて温度を算出する (コード定数 INERTIA=0.4 は $\frac{2}{5}$ を表す)。

■自由度 粒子 i が点 ($r_i = 0$) か剛体 ($r_i > 0$) かで、一粒子当たりの熱自由度 d_i は

$$d_i = \begin{cases} 3 & (r_i = 0, \text{ mode} = \text{ALL}, D = 3) \\ 6 & (r_i > 0, \text{ mode} = \text{ALL}, D = 3) \\ 3 & (r_i > 0, \text{ mode} = \text{ROTATE}, D = 3) \\ 2 & (r_i = 0, \text{ mode} = \text{ALL}, D = 2) \\ 3 & (r_i > 0, \text{ mode} = \text{ALL}, D = 2) \\ 1 & (r_i > 0, \text{ mode} = \text{ROTATE}, D = 2) \\ 0 & \text{その他} \end{cases} \quad (2)$$

となる。全粒子について求めた総自由度

$$\text{DOF} = \sum_{i \in \text{group}} d_i - S - \Delta \quad (3)$$

から、拘束数 S (fix_shake 等) とユーザ指定 Δ を差し引く。

■運動エネルギー モード ALL では

$$K = \frac{1}{2} \sum_i m_i \mathbf{v}_i^2 + \frac{1}{2} \sum_i I_i \boldsymbol{\omega}_i^2, \quad (4)$$

ROTATE では

$$K = \frac{1}{2} \sum_i I_i \boldsymbol{\omega}_i^2. \quad (5)$$

ここで \mathbf{v}_i は並進速度、 $\boldsymbol{\omega}_i$ は角速度である。

■温度 エネルギー等分配則より

$$T = \frac{2K}{\text{DOF } k_B} = \frac{\text{mvv}2e}{\text{DOF } k_B} \sum_i (m_i v_i^2 + I_i \omega_i^2)_{\text{mode}}, \quad (6)$$

を採用する. 変換係数 $\text{mvv}2e$ は $\frac{1}{2}mv^2$ をエネルギー単位へ写す定数を含む.

■テンソル量 あわせて六成分のテンソル

$$K_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \sum_i \left[m_i v_{i\alpha} v_{i\beta} + I_i \omega_{i\alpha} \omega_{i\beta} \right]_{\text{mode}}, \quad (\alpha, \beta \in \{x, y, z\}, \alpha \leq \beta) \quad (7)$$

を計算し, 単位変換後に出力する.

■バイアス処理 対応する `compute_temp_partial` 等を指定すると, まず補正速度 \mathbf{u} を取り除き

$$\mathbf{v}_i \leftarrow \mathbf{v}_i - \mathbf{u}, \quad \boldsymbol{\omega}_i \leftarrow \boldsymbol{\omega}_i,$$

で (??),(??) を評価し, 温度算出後に元の速度を復元する. これにより並進運動の集団流速や回転バイアスを精密に分離できる.

■まとめ 最終的に, 本クラスは剛体球系の部分温度

$$T = \frac{\text{mvv}2e}{\text{DOF } k_B} \sum_i (m_i v_i^2 + I_i \omega_i^2)_{\text{mode}} \quad (8)$$

および対応テンソル (??) を並列集計し, 剛体球 DEM/MD シミュレーションの熱統計解析に供する.